Когнитивные технологии в адаптивных моделях сложных объектов

А.П. Кулешов

Аннотация. Обсуждаются теоретические проблемы, возникающие при создании адаптивных (или суррогатных) моделей сложных технических объектов, основанных на имеющихся данных (например, результатах натурных и/или вычислительных экспериментов с различными объектами из исследуемого класса). Технология построения таких моделей и используемые методы в значительной мере основаны на синергии методов предметной области и когнитивных технологий и в значительной степени инвариантны по отношению к предметной области.

Введение

В процессе проектирования и создания сложного технического объекта рассматриваются и сравниваются различные технические решения, касающиеся структуры объекта, механизмов его функционирования, выбора параметров и других элементов объекта. Например, в процессе проектирования пассажирского самолета B-777 были рассмотрены более 20 000 вариантов компоновки самолета. Сравнение решений и выбор оптимального (рационального) решения производятся на основе сравнения характеристик (свойств) объекта для множества вариантов его построения в различных условиях его функционирования, полученных в результате проведения различных экспериментов. Например, существующая практика проектирования нового самолета опирается на результаты приблизительно 2.5 миллионов аэродинамических экспериментов [1].

Эксперименты с реальными объектами проводятся на завершающих этапах проектирования, когда большинство технических решений уже принято. Такие эксперименты (например, летные испытания самолета) проводятся для сравнения реально полученных характеристик с их предполагаемыми значениями, используемыми в процессе проектирования. Поэтому неотъемлемой частью процесса проектирования является использование различных моделей создаваемого объекта или его компонентов для анализа и сравнения вариантов построения объекта и оценки ожидаемых значений его характеристик.

Наиболее достоверные результаты получаются в ходе натурных экспериментальных исследований с реальными моделями (макетами) объектов или их компонентов при различных внешних условиях функционирования - например, эксперименты с макетами самолетов в аэродинамических трубах (АДТ). При создании самолета B-747 на эксперименты в АДТ было израсходовано 14000 трубо-часов, а при создании отечественных самолетов ИЛ-76, ИЛ-86 и ИЛ-96 было израсходовано 7000, 10000 и 10 200 трубо-часов соответственно.

Однако натурные эксперименты с макетами являются дорогостоящими и требуют значительного времени, и с их помощью можно сравнить лишь небольшое количество вариантов технических решений. Поэтому такие эксперименты проводятся либо для проверки уже найденных решений, либо для валидации и верификации математических моделей.

В настоящее время все большую роль играют аналитические (математические) модели, которые исследуются путем проведения вычислительных экспериментов. Значительный прогресс в области математического моделирования и возможностей вычислительной техники позволяет провести широкий спектр исследований без проведения натурных экспериментов и делает вычислительные эксперименты одним из самых распространенных методов анализа и оптимизации структуры технических объектов.

В основе большинства моделирующих пакетов лежат математические модели объекта и окружающей его среды, основанные на описании физических процессов и явлений, происходящих при функционировании объекта в различных условиях. Эти процессы описываются, как правило, сложными дифференциальными уравнениями в частных производных с граничными условиями (например, краевые задачи для усредненного по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса в аэродинамике). Сами моделирующие пакеты реализуют те или иные численные методы решения таких уравнений (например, методы вычислительной аэрогидродинамики - Computational Fluid Dynamics, CFD [2]).

Однако имеется ряд проблем и при использовании математических моделей, основанных на описании физических процессов и явлений. Для описывающих их дифференциальных уравнений, как правило, неизвестны ни теоремы существования и единственности решения, ни характер зависимости решения от параметров и граничных условий. Поэтому используемые численные методы не гарантируют получение решения с требуемой точностью для любых исходных данных.

Численные методы, реализованные в программных пакетах, имеют значительную вычислительную трудоемкость как самих расчетов, так и подготовки исходных данных, описывающих вариант построения объекта, и расчетных сеток. Например, CFD-коды, применяемые для расчета аэродинамических характеристик самолета, в качестве входных данных используют геометрическое описание поверхности самолета и параметры набегающего потока (режима полета самолета). Описание поверхности самолета представляет собой набор трехмерных координат точек поверхности, лежащих в узлах некоторой решетки, и в CAD-форматах может состоять из десятков тысяч чисел.

Эти причины существенно сокращают возможности использования полноразмерных моделей (Full Order Models), особенно на стадии предварительного (концептуального) проектирования объекта, на которой рассматривается очень большое количество вариантов решений и высока цена неправильно выбранного решения.

Наряду с полноразмерными моделями используются упрощенные модели (Reduced Order Models [3, 4]). В таких моделях либо не учитываются некоторые физические феномены при описании объекта или внешней среды (например, в уравнениях Эйлера в аэродинамике не учитываются эффекты, связанные с вязкостью), либо решения ищутся в определенных классах функций (например, с небольшим числом членов в ряде Фурье). Упрощенные модели применяются, как правило, для предварительного анализа и сравнения вариантов построения объектов и сокращения числа натурных и вычислительных экспериментов с полноразмерными моделями. Однако упрощенные модели, основанные на описании физических процессов и явлений, также не решают проблему кардинально и не всегда позволяют вычислять и сравнивать в режиме реального времени характеристики объектов для различных вариантов их построения.

Поэтому для получения значений требуемых характеристик объектов, особенно на ранних стадиях проектирования, существуют различные полуэмпирические инженерные методы (Semi Empirical Methods), основанные на опыте и знаниях разработчиков и упрощенных моделях и методах. Инженерные методы используют «информационную базу» (приближенные формулы, выражающие однопараметрические зависимости или двухпараметрические номограммы, сводные графики, таблицы и т.п.), отражающую результаты предшествующих исследований и проектов. Однако точность и область применения таких методов не поддается формализации, и они пригодны лишь для получения качественных выводов и достаточно грубых предварительных оценок значений требуемых характеристик.

Тем самым, имеется актуальная проблема создания технологии, позволяющей в режиме реального времени проводить сравнение большого числа вариантов построения сложных технических объектов с обеспечением требуемой достоверности выводов.

В данной работе рассматривается класс адаптивных моделей, основанных на данных. Как правило, имеется большое количество различных данных относительно исследуемых объектов (например, результаты натурных и/или вычислительных экспериментов с различными объектами). Рассматриваемые модели объектов основаны на результатах математической обработки имеющихся данных об объектах рассматриваемого класса с минимальным привлечением знаний из предметной области.

Построенные модели фактически имитируют (заменяют) как источники получения данных, основанные на некоторой исходной (полноразмерной или упрощенной) модели, так и сами модели, созданные на основе изучения физических феноменов, описывающих процессы функционирования объектов. Поэтому таким образом построенные адаптивные модели иногда называют также суррогатными (Surrogate Models). Обе модели (исходная и суррогатная) должны иметь один и тот же набор входных и выходных данных, а результаты, получаемые с помощью обеих моделей (для одних и тех же входных данных), должны быть близкими.

Технология построения суррогатных моделей и используемые методы основаны на синергии методов предметной области и когнитивных технологий, базирующихся на достижениях общенаучных дисциплин (математики, искусственного интеллекта и анализа данных, информационных технологий), и в значительной степени инвариантны по отношению к предметной области [5-7]. Пример использования суррогатных моделей в некоторых прикладных задачах аэродинамического проектирования описан в [8-10].

1. Суть суррогатных моделей и основные этапы их создания

Основная концепция создания суррогатных моделей заключается в следующих положениях.

1. Характеристика объекта (Z), определяющая свойства объекта в некоторых условиях, может быть описана в виде функциональной зависимости Z = F(X, Y), где переменная X описывает сам объект, а переменная Y задает условия функционирования объекта (параметры управления объектом, параметры внешней среды). Например, аэродинамические характеристики самолета (коэффициенты сил, моментов, сопротивлений и др.) в условиях крейсерского полета являются функцией, зависящей от формы поверхности самолета (X) и параметров режима полета и управления (Y) (например, скорости, углов атаки и установки горизонтального оперения и др.).

2. Функция F является неизвестной, и для ее вычисления проводятся натурные или вычислительные эксперименты, то есть значения функции вычисляются с использованием моделей. Пусть M - некоторая модель (способ, функция), позволяющая вычислять приближенное значение $Z_M = F_M(X, Y)$ характеристики Z для входных данных (X, Y). Если функции F_M и F близки друг к другу в некоторой метрике:

$$F_M(X, Y) \approx F(X, Y), \qquad (1)$$

то можно считать, что модель M достаточно адекватна реальности.

3. Имеется некоторое количество измерений

$$\Sigma = \{(X_i, Y_i, Z_i = F_i(X_i, Y_i)), i = 1, 2, \dots \}, \qquad (2)$$

где значение $Z_i = F_i(X_i, Y_i)$ характеристики Z получено методом M_i для объекта, имеющего описания X_i, в условиях функционирования Y_i. Предполагается, что имеющиеся измерения обладают приемлемой точностью, то есть, $F_i(X_i, Y_i) \approx F(X_i, Y_i)$.

4. По известному множеству Σ (2) с помощью тех или иных математических методов анализа и обработки данных строится функция $F_S(X, Y)$, значение которой принимаются в качестве приближенного значения характеристики Z для объекта с описанием X в условиях функционирования Y.

Если все значения в множестве Σ (2) получены при помощи одной и той же модели M и

$$F_S(X, Y) \approx F_M(X, Y), \qquad (3)$$

то построенная функция F_S может рассматриваться как «заменитель» (суррогат) функции F_M. Методы вычисления характеристик с использованием таким образом построенных функций носят название суррогатных моделей.

Если получение данных с помощью модели M (функции F_M) является существенно более затратным (по времени, стоимости и/или другим показателям) по сравнению с построенной моделью S (функцией F_S), то построенную суррогатную модель S = S(M) можно в дальнейшем использовать вместо модели M для вычисления приближенных значений неизвестной функции F(X, Y).

Базируясь на вышеизложенной концепции, можно определить основные этапы и задачи построения суррогатных моделей.

Этап 1. Идентификация класса рассматриваемых объектов и создание математических Моделей описания объектов и условий их функционирования. Как и при построении любой модели M достаточно сложного объекта, определяющей функцию $F_M(X, Y)$, необходимо использовать некоторые модели для описания аргументов (X, Y) функции F: модели описания объектов рассматриваемого класса и модели условий их функционирования. При построении суррогатных моделей, основанных на математических методах анализа и обработки данных, необходимо иметь достаточно компактные описания входных данных, обеспечивая при этом достаточную адекватность. Например, детальное описание поверхности самолета, состоящее из десятков тысяч чисел, необходимо заменить небольшим (порядка десятков и сотен) числом геометрических характеристик объекта, отражающих наиболее существенные (с точки зрения решаемой инженерной задачи) свойства объекта.

Построение «низкоразмерных» параметрических моделей для описания условий функционирования носит, как правило, предметно-ориентированный характер. Например, в крейсерском режиме полета условия набегающего потока описываются несколькими параметрами (числа Маха и Рейнольдса, углы атаки и скольжения и др.), а для учета турбулентности могут применятся низкорейнольдовские (k, ε) модели (или даже более простые алгебраические модели для пути смещения, как это сделано в широко используемом промышленном пакете вычислительной аэродинамики SRAR-CD) [2]. Учитывая, что модели для описания условий функционирования объектов строятся на основании тех же принципов, что и модели описания объектов, в данной статье такие модели рассматриваться не будут (исходный аргумент Y будет использоваться для описания условий функционирования объектов).

Этап 2. Создание консолидированных гармонизированных данных. Имеющиеся данные могли быть получены с помощью разных методов и моделей, для разных условий и с разной точностью. На основании имеющихся данных могут быть построены так называемые консолидированные гармонизированные данные, в которых для каждого значения аргумента имеется ровно одно измерение, характеризуемое единственным точностным параметром. Общая проблема получения консолидированных гармонизированных данных является особенно важной при построении суррогатных моделей, основанном на анализе и обработке данных.

Этот этап может включать в себя также планирование и проведение дополнительных вычислительных экспериментов для получения недостающих данных или повышения точности уже имеющихся данных. Результатом этого этапа является множество консолидированных данных

$$\Sigma_{cons} = \{(X, Y, Z = F_{cons}(X, Y)), (X, Y) \in D_{cons}\}, \quad (4)$$

где D_{cons} состоит из множества значений аргумента (X, Y), для которых имеются консолидированные данные, а F_{cons} обозначает результат построения консолидированных данных. Можно также считать, что имеется метод (способ) M_{cons} получения консолидированных данных.

Так же, как и для исходных данных, предполагается приемлемая точность консолидированных данных:

$$F_{cons}(X, Y) \approx F(X, Y), \quad (X, Y) \in D_{cons}. \quad (5)$$

Этап 3. Создание суррогатной модели объекта. С учетом предположения (5), можно рассматривать множество Σ_{cons} (4) как множество приближенных известных значений искомой неизвестной функции F(X, Y). Поэтому задача построения суррогатной модели может рассматриваться как задача аппроксимации, то есть как задача построения аппроксимирующей функции

$$F_{appr}(X, Y) = F_{appr}(X, Y|\Sigma_{cons}), \quad (6)$$

которая приближенно вычисляет значение характеристики Z в заданной точке (X, Y) по множеству Σ_{cons} (4) приближенных известных значений функции F(X, Y) в конечном числе точек $(X, Y) \in D_{cons}$. Построенная функция (6) и принимается в качестве суррогатной модели $F_S(X, Y)$.

Этап 4. Валидация и оценивание точности созданной суррогатной модели. На этом этапе проверяется адекватность созданной суррогатной модели F_S, то есть оценивается величина погрешности в соотношении (3) с использованием независимых высокоточных данных (High Fidelity Data), которые принимаются в качестве эталонных реальных данных. На этом этапе должна решаться также задача прогноза погрешности (3) для конкретных входных данных (X, Y).

В следующих разделах будут подробно рассмотрены математические задачи, решаемые на каждом из этапов.

2. Создание математических моделей описания объектов как задача снижения размерности

Пусть B = {b} есть множество рассматриваемых объектов. Для каждого объекта $b \in B$ имеется его детальное описание X = X(b) с максимальной степенью детальности. В реальных задачах размерность N вектора X может достигать нескольких тысяч.

Наряду с детальным описанием можно рассмотреть различные обобщенные описания h = H(b) объекта b, состоящие из набора параметров объекта b. Для целей технологии вектор H(b) должен иметь небольшую размерность n (порядка десятков или сотен). В инженерных приложениях желательно, чтобы в качестве параметров обобщенного описания выбирались величины, которыми обычно оперирует инженер в процессе разработки, значения которых являются предметом принятия решений при выборе варианта построения объекта и позволяют достаточно «полно» (адекватно) описывать объект.

Зафиксируем некоторый набор параметров объекта $H_{mod}(b)$, определяющий отображение

$$H_{mod}(b): B \to G_{mod}, \qquad (7)$$

где
$$G_{mod} = \{H_{mod}(b), b \in B\} \qquad (8)$$

есть образ множества B при отображении H_{mod}.

Очевидно, что в общем случае существует целое множество объектов:

$$B_{mod}(h) = \{b \in B: H_{mod}(b) = h\}$$

с одним и тем же набором параметров h, и отображение H_{mod} определяет разбиение пространства B на непересекающиеся подмножества $B_{mod}(h)$, $h \in G_{mod}$. Тем самым, множество G_{mod} является фактор-пространством объектов, определяемое отображением H_{mod}.

Для каждого объекта $b \in B$ определим (выберем) единственный объект

$$b_{mod} = b_{mod}(b) \in B_{mod}(H_{mod}(b)),$$

имеющий тот же набор параметров обобщенного описания $H_{mod}(b)$:

$$H_{mod}(b_{mod}(b)) = H_{mod}(b),$$

и обозначим через

$$B_{mod} = \{b_{mod}(b), b \in B\} \subset B$$

множество всех модельных объектов.

По построению, между множествами B_{mod} и G_{mod} существует взаимно-однозначное соответствие, определяемое прямым (7) отображением и отображением

$$H_{mod}^{-1}: G_{mod} \to B_{mod}, \qquad (9)$$

результат которого определяет модельный объект

$$b_{mod}(b) = H_{mod}^{-1}(H_{mod}(b)). \qquad (10)$$

Объект $b_{mod}(b)$ (10), построенный с помощью пары отображений $\{H_{mod}, H_{mod}^{-1}\}$ и имеющий то же значение параметров $H_{mod}(b)$, что и исходный объект b, будем называть модельным объектом (модельным представлением объекта b, модельным аналогом объекта b).

Тем самым, множество модельных объектов B_{mod} является многообразием в пространстве объектов B, параметризованным с помощью отображения H_{mod}^{-1}, определенного на фактор-пространстве G_{mod}.

Пара отображений $\{H_{mod}, H_{mod}^{-1}\}$ образуют Модель описания объекта, в которой вектор $H_{mod}(b)$ является вектором параметров модели, а фактор-пространство G_{mod} (8) является областью допустимых значений параметров модели.

Обратное отображение H_{mod}^{-1} определяет также «алгоритм восстановления» исходного объекта $b \in B$, позволяющий для каждого исходного объекта $b \in B$ строить детальное описание

$$X_{mod} = X(b_{mod}(b)) \tag{11}$$

соответствующего модельного объекта $b_{mod}(b)$ (10).

Модель описания объекта должна выбираться таким образом, чтобы выполнялись следующие условия.

- Все объекты $b \in B_{mod}(h)$, имеющее одно и то же значение вектора параметров модели h, для всех значений Y условий функционирования объекта, должны иметь близкие детальные описания и близкие значения характеристики Z. Это свойство может быть записано в виде:

$$X(b') \approx X(H_{\mathrm{mod}}^{-1}(h)), \tag{12}$$

$$F(X(b'), Y) \approx F(X(H_{\mathrm{mod}}^{-1}(h)), Y) \tag{13}$$

для всех $h \in G_{mod}$, $b' \in B_{mod}(h)$ и $Y \in \mathbf{Y}$, где $\mathbf{Y}$ - множество рассматриваемых условий функционирования объекта.

Условие (12) может рассматриваться как условие близости описаний исходного объекта и его модельного аналога (например, в задачах аэродинамического проектирование условие (12) определяет геометрическую близость исходной и модельной поверхностей самолета). Условие (13) может рассматриваться как свойство адекватности модели описания объекта с точки зрения рассматриваемой характеристики $Z = F(X, Y)$ (определяет «аэродинамическую» близость исходной и модельной поверхностей самолета).

- Многообразие B_{mod} должно быть гладким. Другими словами, отображение H_{mod}^{-1} должно быть гладким (в некоторой выбранной топологии) и строиться «регулярным образом». В инженерных приложениях это означает, что при малых изменениях параметров модели соответствующие модельные объекты мало меняются. Кроме того, многообразие B_{mod} должно располагаться в множестве B достаточно «плотно», чтобы модельные объекты достаточно «репрезентативно» покрывало все рассматриваемое множество объектов.

- Модель должна иметь минимальную сложность при условии обеспечения адекватности модели (12), (13) (иметь минимальную размерность n фактор-пространства G_{mod}).

Условие адекватности (13) позволяет свести задачу вычисления значения характеристики $F(X(b), Y)$ объекта b к задаче оценки характеристики модельного объекта $F(X(b_{mod}), Y)$.

В силу (10), $X(b_{mod})$ зависит только от модельного объекта b_{mod} только через вектор параметров модели $h = H_{mod}(b)$. Введем модельную функцию

$$F_{mod}(h, Y) = F(X(H_{\mathrm{mod}}^{-1}(h)), Y), \tag{14}$$

тогда соотношение (13) может быть записано следующим образом:

$$F(X(b), Y) \approx F_{mod}(H_{mod}(b), Y). \tag{15}$$

Если модель описания объекта обеспечивает свойство близости (15), то модель позволяет свести проблему вычисления характеристики $F(X(b), Y)$, зависящей от описания объекта $X(b)$, имеющего высокую размерность, к проблеме вычисления значения модельной функции (14), зависящей от объекта только через вектор параметров модели $H_{mod}(b)$, имеющего существенно более низкую размерность.

По существу, модель описания объекта определяет процедуру снижения размерности (сжатия) описания объекта: исходное описание объекта $X(b)$ заменяется описанием модельного объекта $X(b_{mod})$, параметризованным функцией $H_{mod}(b)$.

Отображение H_{mod} определяет процедуру сжатия:

$$X(b) \to H_{mod}(b),$$

и величину $H_{mod}(b)$ можно считать «сжатым» описанием объекта.

Отображение H_{mod}^{-1} определяет процедуру восстановление описания объекта по его сжатому описанию:

$$H_{mod}(b) \to X(H_{\mathrm{mod}}^{-1}(H_{mod}(b))),$$

и погрешность приближенного равенства

$$X(b) \approx X(H_{\mathrm{mod}}^{-1}(H_{mod}(b))) \tag{16}$$

определяет точность процедуры сжатия.

Однако постановка задачи снижения размерности, решаемой при создании суррогатных моделей, имеет ряд особенностей:

- к стандартным требованиям близости (16) исходного описания и описания, восстановленного после сжатия, могут добавляться различные требования, например, требования «функциональной» близости этих описаний:

$$F(X(b), Y) \approx F(X(H_{\mathrm{mod}}^{-1}(H_{mod}(b))), Y).$$

- класс рассматриваемых объектов B = {b} не имеет, как правило, точного описания и определяется конечным множеством его «представителей» (прототипов), задаваемых множеством их детальных описаний

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_T = \{X(b_t), t = 1, 2, \dots, T\}.$$

Рассмотрим два подхода к решению задачи снижения размерности:

- подход, основанный на параметризации описания объекта,
- подход, основанный на данных.

Параметризация описания объекта заключается в попытке описать объект в целом или отдельные его компоненты при помощи аналитических формул, зависящих от небольшого числа параметров. Значительная часть усилий при параметризации описания объекта лежит в предметной области, хотя при этом возникают и решаются отдельные математические задачи. Однако во многих случаях при использовании такого подхода не удается учесть всего многообразия описаний объектов рассматриваемого класса.

Задачи снижения размерности, использующие подход, основанный на данных, обсуждаются в [11, 12].

2. Проблемы создания консолидированных данных

Рассмотрим два аспекта проблемы получения консолидированных данных:

- проблема повышения точности уже имеющихся данных (множества Σ (2));
- проблема проведения дополнительных вычислительных экспериментов для получения новых данных.

Повышение точности. Стандартная ситуация, когда для одного неизвестного параметра ($F(X_0, Y_0)$) имеется несколько независимых наблюдений:

$$F_i(X_0, Y_0) = F(X_0, Y_0) + \varepsilon_i,$$

$$i = 1, 2, \dots, n = n(X_0, Y_0),$$

где ошибки методов получения измерений являются независимыми и, в общем случае, имеют разные распределения, является предметом изучения классической математической статистики и в этой статье рассматриваться не будет.

Наиболее типичная задача, возникающая в приложениях, может быть сформулирована следующим образом. Имеется два метода M_1 и M_2 получения приближенных значений $F_1(X, Y)$ и $F_2(X, Y)$ для характеристики $Z = F(X, Y)$, различающиеся как по степени точности измерений, так и по необходимым затратам на проведение экспериментов (стоимость, время, необходимая квалификация специалистов и т.п.). Примеры методов: проведение экспериментов в аэродинамических трубах и вычислительные расчеты с помощью CFD-кодов. Пусть для определенности метод M_1 является более точным и, в то же время, более «затратным», по сравнению с методом M_2.

Инженерная проблема заключается в предсказании значения величины $F_1(X_0, Y_0)$ (без проведения эксперимента методом M_1) по имеющемуся значению $F_2(X_0, Y_0)$, полученному методом M_2. Если не привлекать «физическую сущность» методов, то такая задача становится содержательной и может быть решена только в статистической постановке, в которой имеется два множества измерений

$$\Sigma_k = \{(X, Y, F_k(X, Y)), (X, Y) \in D\}, \quad (17)$$

$$k = 1, 2,$$

полученных этими методами для одного и того же множества исходных данных D.

Математическая задача предсказания заключается в построении статистической оценки

$$F_{1/2}(X, Y) = F_{1/2}(X, Y | F_2(X, Y), \Sigma) \qquad (18)$$

для неизвестного значения $F_1(X, Y)$, которое потенциально могло бы быть получено методом M_1 для заданных входных данных (X, Y), на основе значения $F_2(X, Y)$ для этих же входных данных. Эта оценка строится с использованием имеющегося множества «общих измерений» $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2$.

Оценку (18) можно искать, например, в виде:

$$F_{1/2}(X, Y) = F_2(X, Y) + \delta(X, Y|\Delta),$$

где поправка $\delta(X, Y|\Delta)$ оценивает неизвестную разность

$$\delta(X, Y) = F_1(X, Y) - F_2(X, Y) \qquad (19)$$

по известному множеству значений $\Delta = \{(X, Y, \delta(X, Y)), (X, Y) \in D\}$ этой функции. В зависимости от используемой техники оценивания, эта задача оценивания величины (19) может формулироваться как задача аппроксимации, задача нелинейной регрессии, задача восстановления функции и т.д.

Конечно, исходная проблема предсказания могла быть также сформулирована как задача аппроксимации: по множеству известных значений Σ_1 (17) неизвестной функции $F_1(X, Y)$ в конечном числе точек $(X, Y) \in D$ построить аппроксимацию для этой функции. Однако во многих инженерных приложениях функция $\delta(X, Y)$ (19) существенно «слабее» зависит от своих параметров, чем компоненты $F_1(X, Y)$ и $F_2(X, Y)$ этой разности, что позволяет построить оценку $\delta(X, Y|\Delta)$ с требуемой точностью на основе существенного меньшего числа наблюдений, чем потребовалось бы для аппроксимации функции $F_1(X, Y)$.

Если прогноз $F_{1/2}(X, Y)$ (18) имеет более высокую точность по сравнению с измерениями $F_2(X, Y)$, то описанный подход может быть использован как один из способов получения консолидированных данных.

Проведение дополнительных вычислительных экспериментов. Наряду с общими проблемами проведения экспериментов (выбор метода, планирование эксперимента и т.п.), имеется сложная проблема генерации входных данных. Как отмечалось выше, описание сложного объекта (например, описание геометрии объекта) может состоять из десятков тысяч чисел, и при этом большинство этих чисел, рассматриваемых изолированно, не несет никакой смысловой нагрузки. Кроме того, множество

$$\mathbf{X} = \{X(b), b \in B\} \subset R^N,$$

состоящее из описаний объектов рассматриваемого класса, лежит, как правило, в окрестности многообразия существенно меньшей размерности, что не позволяет непосредственно использовать стандартную монтекарловскую технику случайной генерации. Тем самым, возникает Задача генерации данных, лежащих на многообразии меньшей размерности.

3. Проблемы создания суррогатной модели объекта

Исходная задача состоит в построении функции $F_S(X, Y)$, которая может быть принята в качестве приближенного значения неизвестного истинного значения $F(X, Y)$ характеристики Z (3).

Технология построения суррогатных моделей [5-7] основана на использовании цепочки преобразований.

Преобразование 1. С использованием Модели описания объектов, вместо исходного объекта b, имеющего детальное описание $X = X(b)$, рассматривается модельный объект $b_{mod}(b)$, имеющий описание $X_{mod} = X(b_{mod}(b))$ (10), (11), (16). Свойства модели обеспечивают приближенное равенство

$$F(X(b), Y) \approx F(X(b_{mod}(b)), Y), \qquad (20)$$

которое позволяет свести задачу вычисления значения характеристики $F(X(b), Y)$ объекта b к задаче оценки характеристики модельного объекта $F(X(b_{mod}), Y)$.

Так как $X(b_{mod})$ зависит от модельного объекта b_{mod} только через вектор параметров модели $h = H_{mod}(b)$, то с учетом обозначения $F_{mod}(h, Y)$ (14) соотношение (20) может быть записано следующим образом:

$$F(X(b), Y) \approx F_{mod}(h, Y),\ \ h = h(b) = H_{mod}(b). \quad (21)$$

Тем самым, задача построения модели для вычисления $F(X(b), Y)$ может быть заменена на задачу построения модели для вычисления функции $F_{mod}(h(b), Y)$, зависящей от аргумента h с существенно более низкой, по сравнению с X, размерностью.

Преобразование 2. Пусть M – некоторая существующая модель, позволяющая вычислять приближенное значение $F_M(X(b), Y)$ характеристики Z. Из условия (1) следует, что для модельных объектов имеет место приближенное равенство:

$F_M(X(b_{mod}(b)), Y) \approx F_{mod}(h, Y)$, $h = h(b) = H_{mod}(b)$.

Обозначив

$$F_{Mmod}(h, Y) = F_M(X(H_{mod}^{-1}(h)), Y),$$

получаем:

$$F_{Mmod}(h, Y) \approx F_{mod}(h, Y), \quad h = h(b) = H_{mod}(b). \quad (22)$$

Тем самым, модель для вычисления функции $F_{mod}(h(b), Y)$ может быть заменена моделью для вычисления функции $F_{Mmod}(h(b), Y)$.

Пусть имеется множество данных Σ результатов экспериментов по вычислению характеристики Z с использованием различных моделей для множества объектов B_{cons}, по которым построено множество консолидированных данных Σ_{cons} (4), состоящих из множества значений характеристики Z, вычисленных для множества значений аргумента (X, Y), $(X, Y) \in D_{cons}$.

Рассматривая в качестве модели M метод получения консолидированных данных M_{cons} (точность которого заведомо не ниже точности каждого частного источника данных), равенство (22) можно записать в виде:

$$F_{cons}(X(b), Y) \approx F_{mod}(H_{mod}(b), Y), \quad (X(b), Y) \in D_{cons}.$$

Обозначив

$$F_{cons\text{-}mod}(h, Y) = F_{cons}(X(H_{mod}^{-1}(h)), Y), \quad (23)$$

$$D_{cons\text{-}mod} = \{(H_{mod}(b), Y): (X(b), Y) \in D_{cons}\}. \quad (24)$$

получаем:

$$F_{cons\text{-}mod}(h, Y) \approx F_{mod}(h, Y), \quad (h, Y) \in D_{cons\text{-}mod}, \quad (25)$$

и, следовательно, имеется множество приближенных значений $F_{cons\text{-}mod}(h, Y)$ (23) неизвестной функции $F_{mod}(h, Y)$ для множества значений аргументов $(h, Y) \in D_{cons\text{-}mod}$ (24).

Преобразование 3. Пусть по множеству известных приближенных значений (40) построена функция $F_{appr}(h, Y)$, достаточно точно аппроксимирующая неизвестную функцию $F_{cons\text{-}mod}(h, Y)$ на множестве значений аргументов $D_{mod} = \{(h, Y): h \in G_{mod}\}$:

$$F_{appr}(h, Y) \approx F_{cons\text{-}mod}(h, Y), \quad (h, Y) \in D_{mod}. \quad (26)$$

В результате цепочки преобразований и построений, обеспечивающих соотношения (21), (25) и (26), может быть построена суррогатная модель M_{surr}, вычисляющая приближенное значение F(X, Y) характеристики Z с помощью функции:

$$F_{surr}(X(b), Y) = F_{appr}(H_{mod}(b), Y). \quad (27)$$

В итоге, исходная задача построения суррогатной модели для приближенного вычисления функции F(X(b), Y) может быть сведена к Задаче построения аппроксимирующей функции $F_{appr}(h, Y)$ для вычисления значения $F_{mod}(h, Y)$.

Задачи аппроксимации, возникающие при создании суррогатных моделей, имеют ряд особенностей.

- Аналитический вид аппроксимируемых функций, как правило, неизвестен. Во многих случаях (в рамках той или иной математической модели) функции F(X, Y), являются решениями сложных дифференциальных уравнений в частных производных, для которых не известны ни теоремы существования и единственности решения, ни теоремы о непрерывной зависимости решений от начальных условий. Поэтому знания о поведении аппроксимируемых функций, в том числе знания о виде зависимости функции от конкретных параметров, носят, как правило, только качественный характер.
- Входные данные для аппроксимируемых функций (вектор параметров модели $h = H_{mod}(b)$ и вектор параметров условий функционирования Y) для сложных объектов имеют размерность порядка десятков или сотен чисел. Во многих случаях это связано с наличием геометрических 3D компонент в описании объекта, которые даже после применения процедур снижения размерности описываются многими десятками чисел.
- В силу высокой размерности входного вектора, множество $D_{cons\text{-}mod}$ аргументов функции, для которых известны приближенные значения аппроксимируемой функции, является очень «разреженным» и не обладает какой-либо регулярной структурой типа «решетки».

Эти особенности ограничивают возможности использования стандартных методов аппроксимации:

- регрессионные методы эффективно реализуются лишь в линейных задачах, а построение нелинейных регрессионных зависимостей требует решения сложных оптимизационных задач с аргументами высокой размерности;
- различные интерполяционные методы аппроксимации (полиномиальные, сплайновые и т.п.) используются для функций с достаточно

малой размерностью аргументов и применимы лишь в случае достаточно регулярной структуры множества $D_{cons\text{-}mod}$;

- «ядерные» методы аппроксимации предполагают, что в «окна» ядерной функции попадает достаточное количество точек с известными значениями функции, что не выполняется для очень «разреженной» структуры множества $D_{cons\text{-}mod}$;

- методы аппроксимации, основанные на разложении аппроксимируемых функций в ряд Фурье по некоторому ортонормированному базису, предполагают априорное знание подходящего базиса, позволяющего получать достаточно точную аппроксимацию рассматриваемых функций их отрезком разложения в ряд Фурье, состоящим из небольшого числа членов. При построении суррогатных моделей такие базисы, как правило, неизвестны.

Поэтому при создании суррогатных моделей приходится разрабатывать новые комбинированные методы аппроксимации, сочетающие в себе методы искусственного интеллекта (Искусственных Нейронных Сетей) и традиционные математические методы аппроксимации и анализа данных.

4. Проблемы валидации и оценивания точности суррогатных моделей

Полная ошибка

$$\varepsilon_{full}(X(b), Y) = F_{surr}(X(b), Y) - F(X(b), Y),$$

возникающая при использовании построенной суррогатной модели, может быть представлена как сумма трех ошибок:

$$\varepsilon_{full}(X(b), Y) = \varepsilon_{model}(X(b), Y) + \varepsilon_{cons}(H_{mod}(b), Y) + \varepsilon_{appr}(H_{mod}(b), Y), \quad (28)$$

компонентами которой являются:

- ошибка Модели описания объектов

$$\varepsilon_{model}(X(b), Y) = F(X(b_{mod}(b)), Y) - F(X(b), Y), \quad (29)$$

порожденная частичной потерей информации об объекте за счет использования модельного объекта $b_{mod} = H_{mod}^{-1}(H_{mod}(b))$ (10) вместо реального объекта b;

- ошибка консолидированных данных

$$\varepsilon_{cons}(H_{mod}(b), Y) = F_{cons\text{-}mod}(H_{mod}(b), Y) - F_{mod}(H_{mod}(b), Y), \quad (30)$$

использованных для построения суррогатной модели (в соотношении (30) использовано обозначение (14));

- ошибка аппроксимации

$$\varepsilon_{appr}(H_{mod}(b), Y) = F_{appr}(H_{mod}(b), Y) - F_{cons\text{-}mod}(H_{mod}(b), Y), \quad (31)$$

связанная с использованием процедуры аппроксимации вместо проведения экспериментов и построения по их результатам консолидированных данных (в соотношении (31) использовано обозначение (27)).

Валидация моделей заключается в сравнении значений аэродинамических характеристик, полученных разными способами. При валидации и оценивании точности суррогатных моделей могут быть использованы данные трех типов:

- независимые высокоточные данные (High Fidelity Data) $F_{test}(X(b), Y)$, $b \in B_{test}$, известные для некоторого множества B_{test} объектов, которые принимаются в качестве эталонных реальных данных;

- имеющиеся консолидированные данные $F_{cons}(X(b_{mod}(b)), Y)$, $b \in B_{cons} \cup B_{test}$, построенные по результатам экспериментов с модельными объектами, в том числе для объектов из множества B_{test};

- значения $F_{surr}(X(b), Y) = F_{appr}(H_{mod}(b), Y)$, вычисленные с помощью построенной суррогатной модели для объектов из множества $B_{cons} \cup B_{test}$.

По этим данным можно провести попарные сравнения, по которым могут быть сделаны следующие выводы.

- Результаты сравнения между высокоточными эталонными и соответствующими консолидированными данными могут оценить сумму ошибок $\varepsilon_{model}(X(b), Y)$ и $\varepsilon_{cons}(H_{mod}(b), Y)$ и использоваться для валидации исходных данных модели, использованных для построения суррогатной модели (то есть для совместной валидации модели описания объекта и Метода получения консолидированных данных, без валидации каждой из компонент в отдельности).
- Результаты сравнения между консолидированными данными и данными, полученными с помощью суррогатной модели, могут оценить

ошибку аппроксимации $\varepsilon_{appr}(H_{mod}(b), Y)$ и провести условную валидацию суррогатной модели в предположении, что:

- заданный объект b совпадает со своим модельным аналогом $b_{mod}(b)$ (то есть, использование модели описания объекта не вносит ошибок: $\varepsilon_{model}(X(b), Y) = 0$),
- множество консолидированных данных Σ_{cons}, используемых для построения суррогатной модели, состоит из точных значений характеристик модельных объектов (то есть $\varepsilon_{cons}(H_{mod}(b), Y) = 0$).

- Результаты сравнения между высокоточными эталонными данными и данными, полученными с помощью суррогатной модели, могут оценить суммарную ошибку $\varepsilon_{full}(X(b), Y)$ и провести полную валидацию суррогатной модели.

Проведение указанных сравнений предполагает выбор различных функционалов для оценивания соответствующих ошибок (средних абсолютных и относительных ошибок, квантилей ошибок, доверительных интервалов и др.) и использование различных методов математической статистики для оценивания выбранных функционалов.

Однако при использования суррогатных моделей возникает дополнительная задача «точечного» оценивания (предсказания) ошибки суррогатной модели. Как видно из формул (28)–(31), все ошибки в общем случае зависят от выбранного объекта b и условий его функционирования Y. Проведенная валидация говорит о точности суррогатной модели «в среднем», в то же время пользователя интересует ожидаемая ошибка для конкретных входных данных в виде доверительного интервала для истинного неизвестного значения характеристики или предсказанного значения ошибки.

Рассматриваемая задача предсказания ошибки может быть сформулирована в различных постановках как задача параметрического или непараметрического статистического оценивания. Однако эта задача может быть сформулирована и как аппроксимационная задача.

Для множества входных данных $D_{cons\text{-}mod}$ (24), для которых имеются консолидированные данные, могут быть проведены вычислительные эксперименты с суррогатной моделью, результатом которых будет множество значений $\{F_{appr}(h, Y), (h, Y) \in D_{mod}\}$. Тем самым, известно множество ошибок

$$\Phi = \{\delta(h, Y) = = |F_{appr}(h, Y) - F_{cons\text{-}mod}(h, Y)|, (h, Y) \in D_{cons\text{-}mod}\}. \quad (32)$$

Поэтому задача оценивания ошибки $\delta(h, Y)$ (точечного или интервального) для заданных входных данных (h, Y) может быть сформулирована как задача построения функции $\delta_{appr}(h, Y)$, аппроксимирующая значение неизвестной функции $\delta(h, Y)$ по множеству Φ (32) известных значений этой функции. Некоторый подход к решению сформулированной задачи рассмотрен в [13].

Заключение

Описаны основные элементы технологии построения суррогатных моделей, основанных на данных, и сформулированы различные теоретические задачи (снижения размерности многомерных данных, генерации многомерных данных, лежащих на многообразиях меньшей размерности, многомерной аппроксимации и другие), которые необходимо решить в процессе построения. Описаны особенности этих задач, не позволяющие непосредственно использовать стандартные подходы и методы.

Литература

1. P.E. Rubbert, “CFD and the changing world of airplane design”. Proceedings of the 19th Congress of the International Council of the Aerodynamic Sciences (ICAS). 18-23 Sept., 1994, Vol. 1, ICAS-94-0.2, 1994.
2. В.В. Вышинский, Г.Г. Судаков. Применение численных методов в задачах аэродинамического проектирования. Труды ЦАГИ, вып. 2673, 1 – 142, 2007.
3. Lucia D.J.; Beran P.S.; Silva W.A. Reduced-order modeling: New approaches for computational physics//Progress in Aerospace Sciences. Vol. 40, no. 1-2, pp. 51-117. Feb. 2004.
4. Antoulas A.C., Sorensen D.C., Gugercin S. A survey of model reduction methods for large-scale systems //Structured Matrices in Operator Theory, Numerical Analysis, Control, Signal and Image Processing,' Contemporary Mathematics, AMS publications, 2001.
5. Кулешов А.П. Технология быстрого вычисления характеристик сложных технических объектов. Информационные технологии. Прил. 2006. № 3. С. 4-11.
6. Кулешов А.П. Основные принципы технологии быстрых расчетов, основанной на знаниях//Тезисы докладов Международной научно-технической конференции «Информационные технологии и математическое моделирование в науке, технике и образовании». Сицилия (Италия), 28 сентября - 5 октября 2006 г.

7. Кулешов А.П. Информационные технологии в проблеме создания моделей сложных объектов. Вторая Международная конференция «Системный анализ и информационные технологии» САИТ-2007 (10–14 сентября 2007 г., г. Обнинск, Россия): Труды конференции. Т. 1, стр. 14 – 16. 2007.
8. Alexander V. Bernstein Alexander P. Kuleshov, Yuri N. Sviridenko, Victor V. Vyshinsky. Fast Aerodynamic Model for Design Technology//Proceedings of West-East High Speed Flow Field Conference. November 19-22, 2007, Moscow, Russia (http://wehsff.imamod.ru/pages/s7.htm).
9. Alexander V. Bernstein Alexander P. Kuleshov, Yuri N. Sviridenko, Victor V. Vyshinsky. Fast Aerodynamic Model for Design Technology//Workbook "West-East High Speed Flow Field Conference. November 19-22, 2007, Moscow, Russia", p. 125 – 126.
10. Вышинский В.В., Свириденко Ю.Н. Применение Технологии быстрого вычисления характеристик сложных технических объектов для расчета аэродинамических характеристик самолета. М.: Информационные технологии, № 3, 2006, с. 12-17.
11. А.В. Бернштейн, А.П. Кулешов. Задачи снижения размерности моделей сложных объектов. Вторая Международная конференция «Системный анализ и информационные технологии» САИТ-2007 (10 – 14 сентября 2007 г., г. Обнинск, Россия): Труды конференции. Т. 1, стр. 243 – 247.
12. А.В. Бернштейн, А.П. Кулешов. Методы снижения размерности моделей сложных объектов. Информационные технологии и вычислительные системы, 2, 2008.
13. Бернштейн А.В., Кулешов А.П. Методология оценивания точности в Технологии быстрого вычисления характеристик сложных технических объектов. М.: Информационные технологии, № 3, 2006, с. 17-22.

Кулешов Александр Петрович. Директор Института проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН, заместитель академика-секретаря Отделения нанотехнологий и информационных технологий РАН. Окончил механико-математический факультет МГУ им. Ломоносова в 1970 году. Доктор технических наук, профессор. Автор 75 научных работ. Область научных интересов: информационные, телекоммуникационные и когнитивные технологии, моделирование.