ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТЕЙ по неточным данным с интервальной неопределённостью

С.П. Шарый

ФИЦ информационных и вычислительных технологий

Новосибирский государственный университет

18 декабря 2025 г.

I. Постановка задачи

Восстановление функциональных зависимостей

Задача восстановления зависимостей

— по эмпирическим данным требуется построить
функциональную зависимость заданного вида.

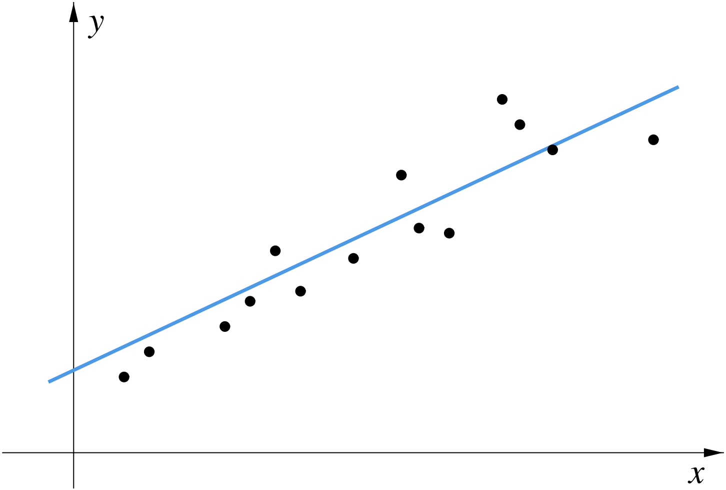
Далее

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_m x_m.$$

Нужно найти такие коэффициенты β_i, чтобы линейная функция «наилучшим образом» приближала заданный набор значений

$$\begin{array}{ccccc} x_{11}, & x_{12}, & \ldots, & x_{1m}, & y_1, \\ x_{21}, & x_{22}, & \ldots, & x_{2m}, & y_2, \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1}, & x_{n2}, & \ldots, & x_{nm}, & y_n. \end{array}$$

Задача восстановления зависимостей



Задача восстановления зависимостей

Подставляя данные в выражение для функции, получаем систему

$$\begin{cases} \beta_0 & + & x_{11}\beta_1 & + & x_{12}\beta_2 & + & \dots & + & x_{1m}\beta_m & = & y_1, \\ \beta_0 & + & x_{21}\beta_1 & + & x_{22}\beta_2 & + & \dots & + & x_{2m}\beta_m & = & y_2, \\ & \vdots & & \vdots & & & \ddots & & & \vdots & \\ \beta_0 & + & x_{n1}\beta_1 & + & x_{n2}\beta_2 & + & \dots & + & x_{nm}\beta_m & = & y_m, \end{cases}$$

или

$$X\beta = y$$

с $n\times(m+1)$-матрицей $X = (\, x_{ij})$ и n-вектором $y = (\, y_i)$.

Её решение — обычное или в обобщённом смысле — принимается за оценку параметров β_0, β_1, ..., β_m.

Задача восстановления функциональной зависимости

Данные почти всегда неточны ...

Какую модель неопределённости мы используем?

Задача восстановления функциональной зависимости

Данные почти всегда неточны ...

Какую модель неопределённости мы используем?

Традиционный выбор — вероятностная модель погрешностей данных (К.Ф. Гаусс, П.-С. Лаплас и другие):

погрешности измерений и наблюдений являются случайными величинами в смысле теории вероятностей, с (более или менее) известными свойствами

Вероятностная модель погрешностей измерений

— дискуссия между Ю.И. Алимовым и В.Н. Тутубалиным

в 70е – 90е годы XX века в СССР :

- Имеется ли статистическая устойчивость (однородность)?
- Каково вероятностное распределение? Его характеристики?
- Имеет ли выборка достаточный объём? «Малые выборки».
- Имеют ли данные корелляцию? Или они независимы?
- Какова «робастность» модели обработки данных?
- Насколько удобны вычислительные методы?
- . . . .

Интервальная модель погрешностей измерений

Данные почти всегда неточны ...

Какую модель неопределённости мы используем?

Интервальная модель погрешностей измерений

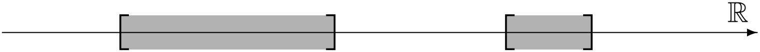
Данные почти всегда неточны ...

Какую модель неопределённости мы используем?

Неточности и неопределённости в данных могут быть описаны интервалами их возможных значений:

> погрешности измерений и наблюдений являются ограниченными величинами, адекватно описываемыми интервалами их возможных значений

Интервалы



$$[1, 2], \qquad [1000, 1003], \qquad \ldots$$

Интервальная модель погрешностей измерений

Данные почти всегда неточны ...

Какую модель неопределённости мы используем?

Неточности и неопределённости в данных могут быть описаны интервалами их возможных значений:

заданы принадлежности x_{ij} и y_i некоторым интервалам,

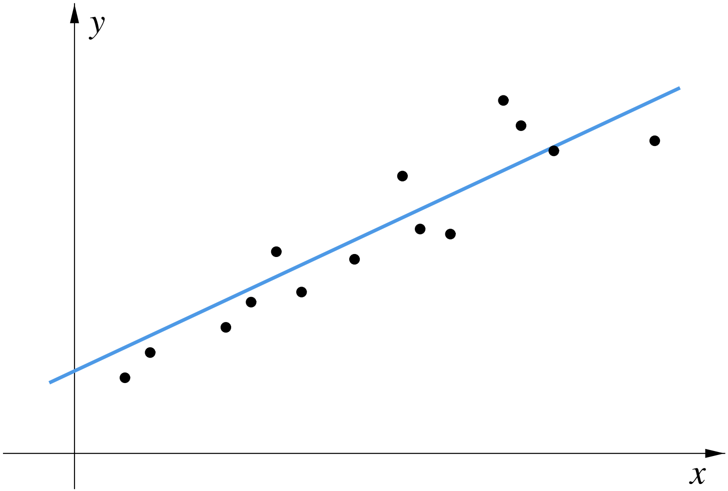
$$x_{ij} \in [\,\widetilde{x}_{ij} - \Delta x_{ij}, \widetilde{x}_{ij} + \Delta x_{ij}] \qquad \text{и} \qquad y_i \in [\,\widetilde{y}_i - \Delta y_i, \widetilde{y}_i + \Delta y_i]$$

или

$$x_{ij} \in \boldsymbol{x}_{ij} = [\,\underline{\boldsymbol{x}}_{ij}, \overline{\boldsymbol{x}}_{ij}] \qquad \text{и} \qquad y_i \in \boldsymbol{y}_i = [\,\underline{\boldsymbol{y}}_i, \overline{\boldsymbol{y}}_i].$$

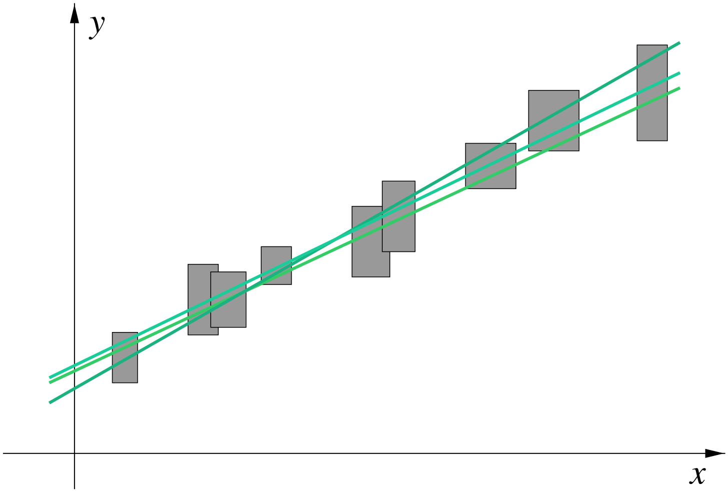
Восстановление зависимости по неточным данным

Вместо



Восстановление зависимости по неточным данным

…имеем



Леонид Витальевич Канторович (1912–1986)

пионер нового подхода,

действительный член
Академии Наук СССР,

основатель кафедры
вычислительной математики НГУ,

лауреат Сталинской
и Ленинской премий,

лауреат Нобелевской премии
по экономике

СИБИРСКИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Том III, № 5 Сентябрь — Октябрь 1962 г.

Л. В. КАНТОРОВИЧ

О НЕКОТОРЫХ НОВЫХ ПОДХОДАХ К ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ МЕТОДАМ И ОБРАБОТКЕ НАБЛЮДЕНИЙ*.

Введение

Имевшие место сдвиги в развитии математики и вычислительных средств должны иметь следствием коренные изменения в технике, а возможно и теории численных методов и обработки наблюдений. В той или иной форме отдельные высказываемые ниже соображения встречались в литературе, но не разрабатывались систематически. В частности, мы считаем, что существенное значение имеют следующие моменты:

1. Бо́льшая ответственность за результаты расчетов, на которых сейчас нередко базируются решения, касающиеся сложных дорогостоящих объектов современной физики и техники, наличие больших не наблюдаемых этапов при машинных вычислениях повышают требования к надежности окончательных и промежуточных данных, получаемых в процессе применения численных методов и при обработке данных наблюдений. Это обуславливает систематический переход от построения приближенных значений и результатов, к получению точных двухсторонних границ для искомых величин или, если говорить о нечисловых величинах, областей расположения искомых и наблюдаемых величин; иначе говоря возникает задача возможно более точного описания расположения этих величин в соответствующих пространствах их зна-

использованием вводившихся нами в свое время мажорантного оператора для данного нелинейного. Мы не будем здесь подробно останавливаться на этом.

Отметим еще, что в случаях, когда обращение оператора невозможно или обратный оператор очень велик, например в окрестности собственного значения, целесообразно не строить границы областей, содержащих решения, а оценивать область расположения решения, используя технику линейного программирования.

Замечание. Во всех формулах для границ предполагалось, что действия над исходными границами производятся точно. Если эти действия производятся приближенно, например на машине, то формулы видоизменяются за счет дополнительного введения погрешностей этих действий. Не будем приводить записи формул для этого случая.

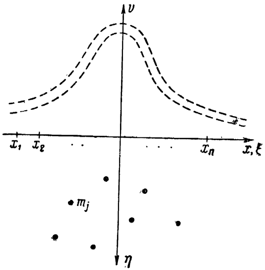
§ 3. Некоторые задачи прикладной математики

1. Задача обработки наблюдений. Обычно полученную в результате измерений избыточную систему уравнений обрабатывают по методу наименьших квадратов Гаусса. При этом происходит значительная потеря информации. По-видимому, в настоящее время более целесообразна другая техника. Уравнения, связывающие искомые величины, выписать с учетом погрешностей в форме неравенств

$$l_i - \delta \leqslant \sum_{k=1}^{n} c_{ik} x_k \leqslant l_i + \delta,$$

$$i = 1, \ldots, m,$$

и разыскивать возможные границы для x_k методами линейного программирования.



Восстановление функциональной зависимости по интервальным данным

Л.В. Канторович, О некоторых новых подходах
к вычислительным методам и обработке наблюдений
// Сибирский математический журнал. – 1962.
– Том 3, № 5. – С. 701–709.

Эта работа была продолжена

С.И. Спивак, А.П. Вощинин, Н.М. Оскорбин, С.И. Жилин,
С.И. Носков, Б.Т. Поляк, С.И. Кумков, С.П. Шарый, . . .

F.S. Schweppe, R.E. Moore, J.P. Norton, M. Milanese,
G. Belforte, L. Pronzato, P. Combettes, E. Walter, L. Jaulin, . . .

Первая западная работа по теме

22 IEEE TRANSACTIONS ON AUTOMATIC CONTROL, VOL. AC-13, NO. 1, FEBRUARY 1968

Recursive State Estimation: Unknown but Bounded Errors and System Inputs

FRED C. SCHWEPPE, MEMBER, IEEE

***Abstract*—A method is discussed for estimating the state of a linear dynamic system using noisy observations, when the input to the dynamic system and the observation errors are completely unknown except for bounds on their magnitude or energy. The state estimate is actually a set in state space rather than a single vector. The optimum estimate is the smallest calculable set which contains the unknown system state, but it is usually impractical to calculate this set. A recursive algorithm is developed which calculates a time-varying ellipsoid in state space that always contains the system's true state. Unfortunately the algorithm is still unproven in the sense that its performance has not yet been evaluated. The algorithm is closely related in structure but not in performance to the algorithm obtained when the system inputs and observation errors are white Gaussian processes. The algoıithm development is motivated by the problem of tracking an evasive target, but the results have wider applications.**

I. Introduction

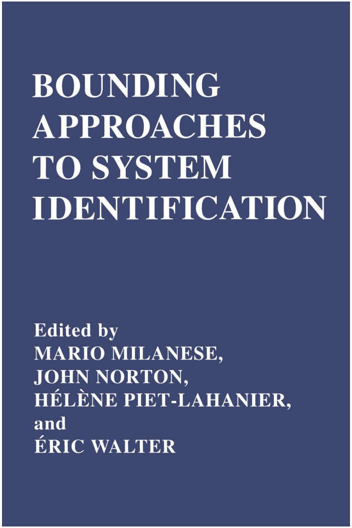
PROCESSING *noisy* observations of some function of a dynamic system's state is often necessary to provide an estimate of the system's current state. The nature of the algorithm to be used depends on the assumed structures of the dynamic system, the observa-

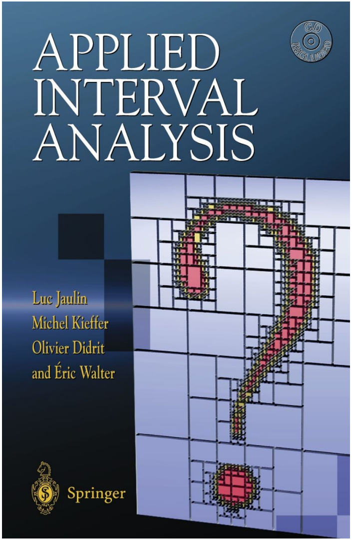
other situations. An assumption of unknown but bounded input to a dynamic system can be used simply as a way to reflect uncertainty about nature. Unknown but bounded observation errors are common; quantization errors are one example.

The basic idea of the estimation procedure is to combine knowledge of the system dynamics and bounds with the observations to specify a time-varying set in state space which always contains the true state of the system. Thus the actual estimate is a set in state space rather than a single vector. Specification of the smallest estimate set is conceptually straightforward but computationally impractical for most real problems. Therefore, an algorithm for calculating a bounding ellipsoid which always contains the state is developed. This ellipsoid is not the smallest possible estimate set, but it can be calculated recursively in real time.

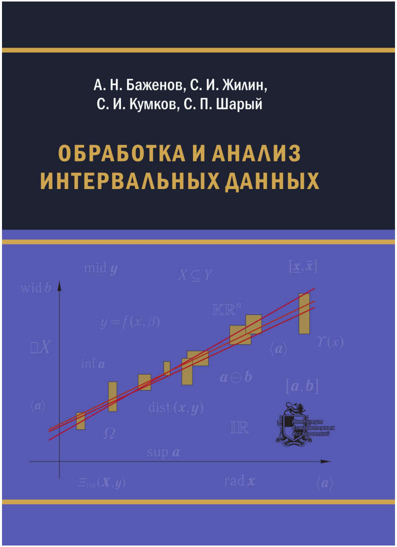
The algorithm for the bounding ellipsoid estimate is computationally similar to the estimation algorithm (Kalman–Bucy) obtained when the input to the dy-

Интервальный анализ данных





Интервальный анализ данных

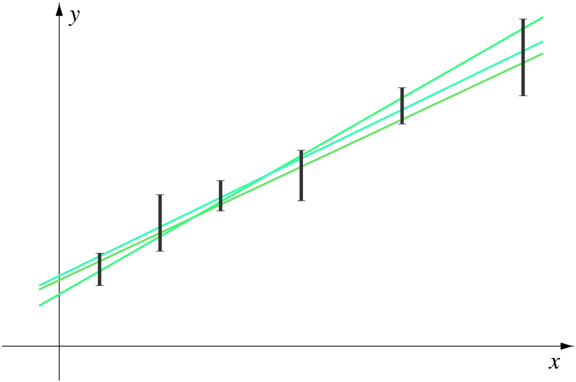


II. Постановка задачи

Восстановление зависимостей по интервальным данным

Задача восстановления функциональной зависимости по данным с интервальной неопределённостью

Постановка задачи, рассмотренная Л.В. Канторовичем, не имела неточности значений независимых переменных, т. е. $\boldsymbol{x}_{ij} = x_{ij}$.



Задача восстановления функциональной зависимости по данным с интервальной неопределённостью

Постановка задачи, рассмотренная Л.В. Канторовичем, не имела неточности значений независимых переменных, т. е. $\boldsymbol{x}_{ij} = x_{ij}$.

Тогда

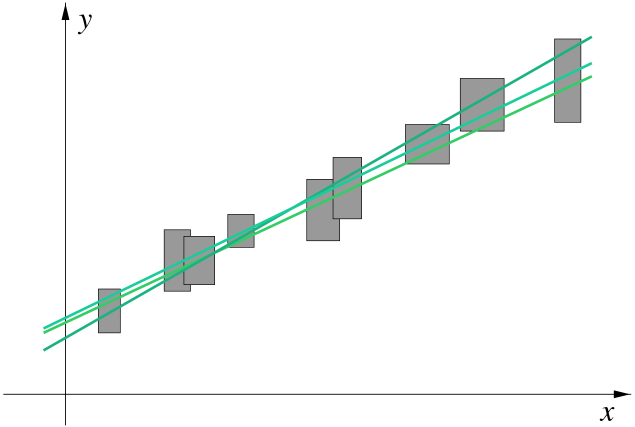
$$\underline{\boldsymbol{y}}_i \;\leq\; \beta_0 + x_{i1}\beta_1 + \dots + x_{im}\beta_m \;\leq\; \overline{\boldsymbol{y}}_i, \qquad i = 1, 2, \dots, n,$$

т. е. получаем систему линейных неравенств.

Она может быть решена,

к примеру, методами линейного программирования.

Восстановление зависимости по интервальным данным



Основной вопрос: в каком смысле понимается факт

«график функции проходит через брусы неопределённости»?

Более тонкий анализ задачи

«Раздувшиеся» брусы неопределённости приобретают новую структуру, которой не было у бесконечно малых точек.

Они становятся прямыми декартовыми произведениями интервалов, которые выражают

- независимые (входные, предикторные, . . .) переменные

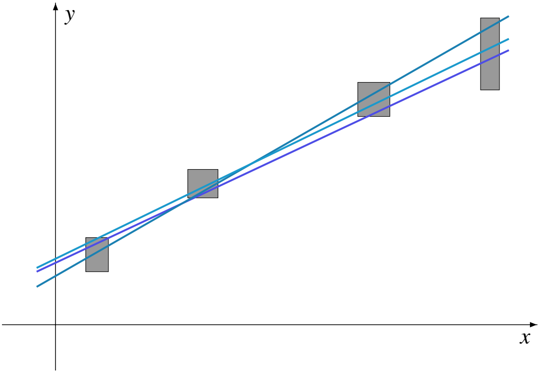
  и

- зависимые (выходные, критериальные, . . .) переменные.

Становится важным, как именно график функции проходит через брусы неопределённости!

Восстановление зависимости по интервальным данным

Параметры $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m$ функции $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_m x_m$ слабо совместны с интервальными данными $(\boldsymbol{x}_{i1}, \ldots, \boldsymbol{x}_{im}, \boldsymbol{y}_i)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, если для каждого i существуют такие $x_{i1} \in \boldsymbol{x}_{i1}, \ldots, x_{im} \in \boldsymbol{x}_{im}$ и $y_i \in \boldsymbol{y}_i$ в пределах измеренных интервалов, что они делают истинным равенство $\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \ldots + \beta_m x_{im} = y_i$.



Более тонкий анализ задачи

«Раздувшиеся» брусы неопределённости приобретают новую структуру, которой не было у бесконечно малых точек.

Они становятся прямыми декартовыми произведениями интервалов, которые выражают

- независимые (входные, предикторные, ...) переменные

  и

- зависимые (выходные, критериальные, ...) переменные.

Более тонкий анализ задачи

«Раздувшиеся» брусы неопределённости приобретают новую структуру, которой не было у бесконечно малых точек.

Они становятся прямыми декартовыми произведениями интервалов, которые выражают

- независимые (входные, предикторные, ...) переменные

  и

- зависимые (выходные, критериальные, ...) переменные.

$\Longrightarrow$ разные грани брусов неопределённости имеют разный смысл!

Становится важным, как именно график функции проходит через брусы неопределённости!

Восстановление зависимости по интервальным данным

Измерение независимых и зависимых переменных обычно разделено во времени и разбивается на две стадии:

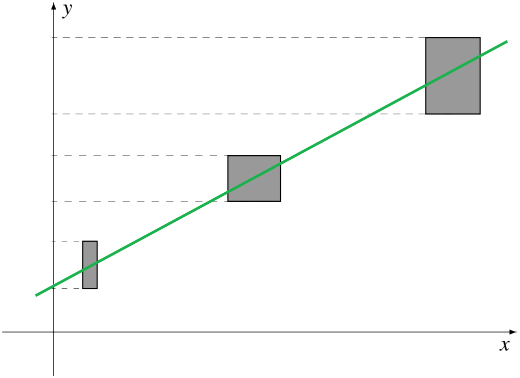
- во-первых, фиксируем значения на входе системы,
  т. е., независимые (предикторные, ...) переменные,
- во-вторых, измеряем значениях на выходе системы,
  т. е., зависимые (критериальные, ...) переменные.

Тогда более адекватно другое понимание «совместности»:

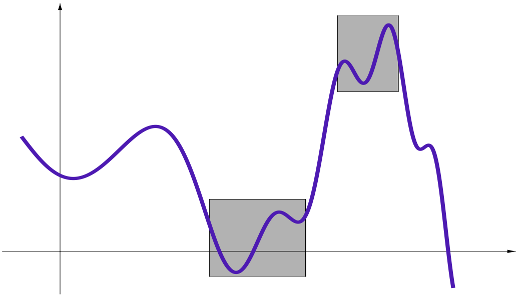
> интервалы на выходе должны удовлетворяться равномерно относительно входных значений.

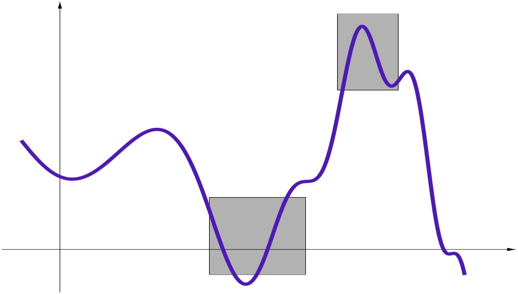
Восстановление зависимости по интервальным данным

Параметры $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m$ функции $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_m x_m$ сильно совместны с интервальными данными $(\boldsymbol{x}_{i1}, \ldots, \boldsymbol{x}_{im}, \boldsymbol{y}_i)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, если для каждого i при любых значениях $x_{i1} \in \boldsymbol{x}_{i1}$, $\ldots$, $x_{im} \in \boldsymbol{x}_{im}$ существуют $y_i \in \boldsymbol{y}_i$ в пределах измеренных интервалов, что выполнено равенство $\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \ldots + \beta_m x_{im} = y_i$.



сильная совместность





слабая совместность

Множество параметров, слабо совместных с данными —

$$\Big\{\, \beta \in \mathbb{R}^{m+1} \;\Big|\; \big(\,\exists X_{i:} \in \boldsymbol{X}_{i:}\,\big)\big(\,\exists y_i \in \boldsymbol{y}_i\,\big)\big(\,X_{i:}\beta = y_i\,\big),\; i = 1, 2, \ldots, n \,\Big\},$$

где $\boldsymbol{X}$ — $n \times (m+1)$-матрица с элементами $\boldsymbol{x}_{ij}$.

В интервальном анализе это *объединённое множество решений* интервальной системы алгебраических уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$.

Восстановление зависимости по интервальным данным

Множество параметров, сильно совместных с данными —

$$\Big\{\, \beta \in \mathbb{R}^{m+1} \;\Big|\; (\,\forall X_{i:} \in \boldsymbol{X}_{i:}\,)(\,\exists y_i \in \boldsymbol{y}_i\,)(\,X_{i:}\beta = y_i\,),\; i = 1, 2, \ldots, n \,\Big\},$$

где $\boldsymbol{X}$ — $n \times (m+1)$-матрица с элементами $\boldsymbol{x}_{ij}$.

В интервальном анализе это *допусковое множество решений* интервальной системы алгебраических уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$.

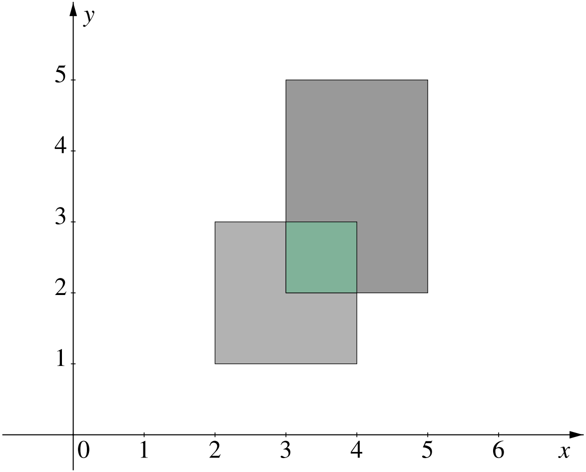
Практический смысл

Инженеры часто не воспринимают абстрактную теорию, но ...

Они хорошо понимают преимущества сильной совместности:

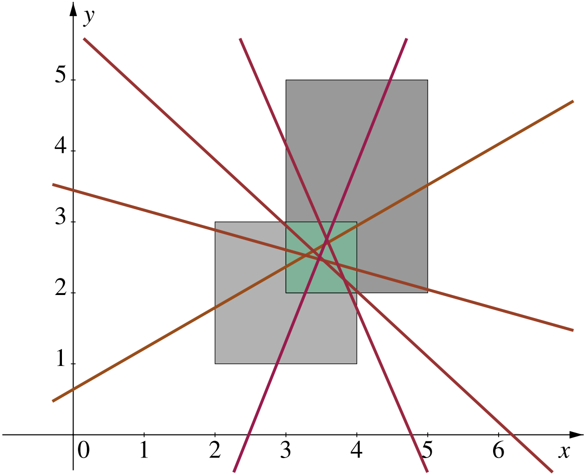
- Для линейного случая сильная совместность полиномиально разрешима, а распознавание слабой совместности NP-трудно.
- Во многих практических ситуациях сильная совместность приводит к гораздо более корректным ответам!

Для таких данных



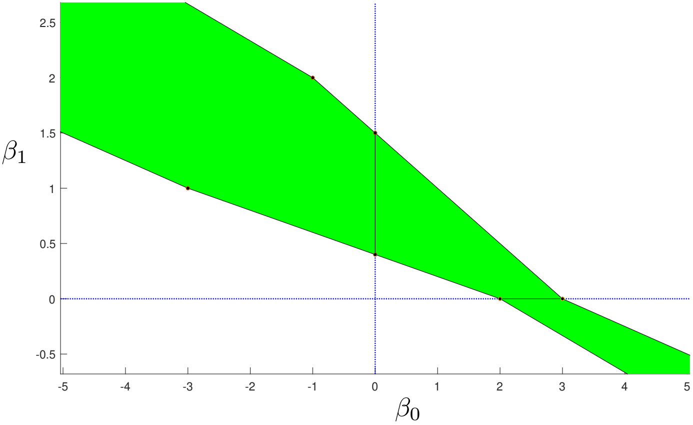
сильная совместность даёт более осмысленные результаты.

Для таких данных



слабая совместность даёт недопустимую неопределёность.

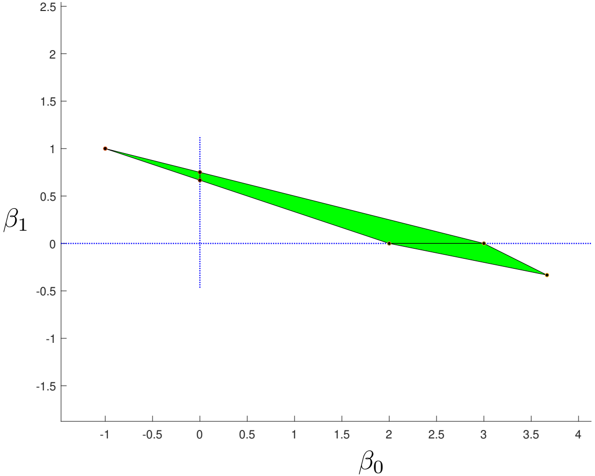
Объединённое множество решений



... т. е., множество параметров функции $y = \beta_0 + \beta_1 x$

слабо совместных с данными, неограниченно.

Допусковое множество решений



... т. е., множество параметров функции $y = \beta_0 + \beta_1 x$

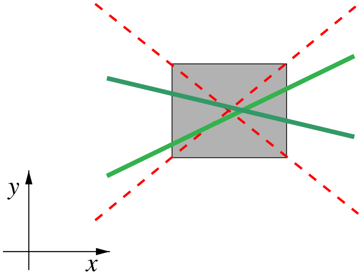
сильно совместных с данными, ограниченно.

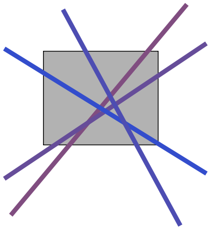
Ограниченность допускового множества решений

Критерий И.А. Шарой

Непустое допусковое множество решений для интервальной линейной системы уравнений $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ является неограниченным тогда и только тогда, когда $\boldsymbol{A}$ имеет линейно зависимые столбцы.

Irene A. Sharaya, On unbounded tolerable solution sets // *Reliable Computing*. – 2005. – Vol. 11, Issue 1. – P. 425–432.





Ограничения на наклон прямой (штрихами)

в условиях сильной совместности.

III. Как решать задачу

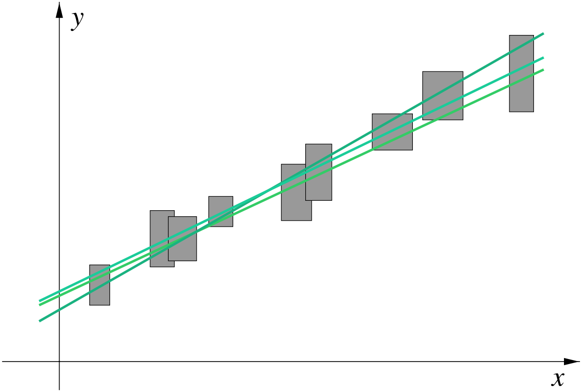
Общий подход

Восстановление зависимости по интервальным данным

Общий подход является стандартным:

1) определяем «меру совместности» между данными и параметрами

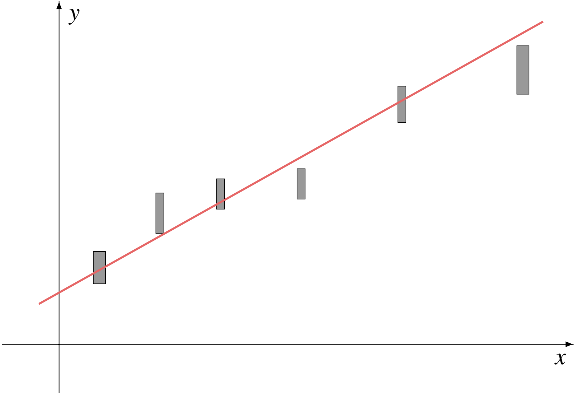
2) точка её максимума берётся в качестве оценки параметров



Восстановление зависимости по интервальным данным

Иногда не существует набора параметров

совместных с данными



Тем не менее, мы всё равно должны как-то построить функцию, которая имеет наименьшую «сильную несовместность» с данными.

Мера совместности интервальных уравнений

Что брать в качестве количественной меры совместности
для интервальных уравнений и систем уравнений?

Мера совместности интервальных уравнений

Что брать в качестве количественной меры совместности
для интервальных уравнений и систем уравнений?

В традиционном случае естественная мера совместности уравнения или системы уравнений на приближённом решении — это *невязка*:

$$A\tilde{x} - b$$

Но для исследования совместности интервальных уравнений — непустоты их множеств решений — эта конструкция не годится.

Совместность интервальных уравнений

Условия принадлежности точки множествам решений интервальной системы уравнений формулируются как условия на взаимное расположение области значений левой части, т. е. множества

$$\boldsymbol{X}\beta := \{X\beta \in \mathbb{R}^{m+1} \mid X \in \boldsymbol{X}\},$$

и бруса правой части $\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_n)^\top$.

Совместность интервальных уравнений

Из определений множеств решений вытекает, что

1. точка $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \ldots, \tilde{\beta}_l)^\top$ принадлежит объединённому множеству решений Ξ_{uni} тогда и только тогда, когда

$$\boldsymbol{X}\tilde{\beta} \cap \boldsymbol{y} \neq \varnothing.$$

Совместность интервальных уравнений

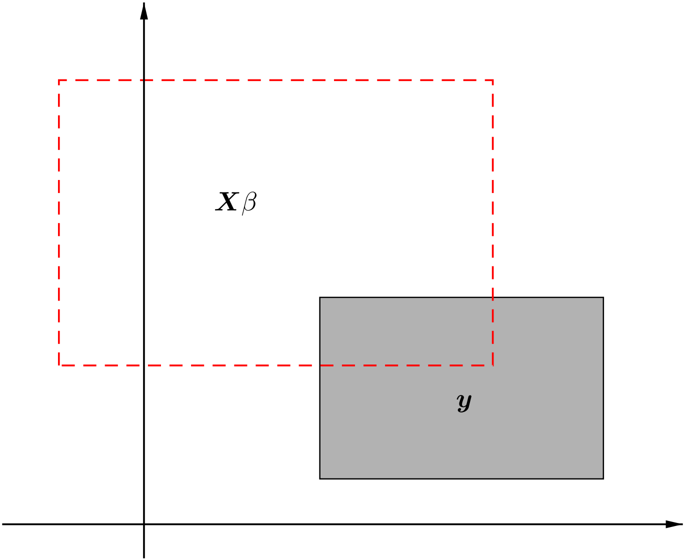
Из определений множеств решений вытекает, что

1. точка $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l)^\top$ принадлежит объединённому множеству решений Ξ_{uni} тогда и только тогда, когда

$$\boldsymbol{X}\tilde{\beta} \cap \boldsymbol{y} \neq \varnothing.$$

2. точка $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l)^\top$ принадлежит допусковому множеству решений Ξ_{tol} тогда и только тогда, когда

$$\boldsymbol{X}\tilde{\beta} \subseteq \boldsymbol{y}.$$


$\boldsymbol{X}\beta$
$\boldsymbol{y}$

IV. Теория

Распознающий функционал

Классическая интервальная арифметика $\mathbb{IR}$

— алгебраическая система,

образованная интервалами $\boldsymbol{a} = [\underline{\boldsymbol{a}}, \overline{\boldsymbol{a}}] \subset \mathbb{R}$ так, что

$$\boldsymbol{a} \star \boldsymbol{b} = \{\, a \star b \mid a \in \boldsymbol{a},\, b \in \boldsymbol{b} \,\}$$ для любых $\star \in \{+, -, \cdot, /\}$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} &= \left[\underline{\boldsymbol{a}} + \underline{\boldsymbol{b}},\ \overline{\boldsymbol{a}} + \overline{\boldsymbol{b}}\right] \\
\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b} &= \left[\underline{\boldsymbol{a}} - \overline{\boldsymbol{b}},\ \overline{\boldsymbol{a}} - \underline{\boldsymbol{b}}\right] \\
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} &= \left[\min\{\underline{\boldsymbol{a}}\,\underline{\boldsymbol{b}}, \underline{\boldsymbol{a}}\,\overline{\boldsymbol{b}}, \overline{\boldsymbol{a}}\,\underline{\boldsymbol{b}}, \overline{\boldsymbol{a}}\,\overline{\boldsymbol{b}}\},\ \max\{\underline{\boldsymbol{a}}\,\underline{\boldsymbol{b}}, \underline{\boldsymbol{a}}\,\overline{\boldsymbol{b}}, \overline{\boldsymbol{a}}\,\underline{\boldsymbol{b}}, \overline{\boldsymbol{a}}\,\overline{\boldsymbol{b}}\}\right] \\
\boldsymbol{a} / \boldsymbol{b} &= \boldsymbol{a} \cdot \left[1/\overline{\boldsymbol{b}},\ 1/\underline{\boldsymbol{b}}\right] \qquad \text{для } \boldsymbol{b} \not\ni 0
\end{aligned}$$

Характеристики интервалов

$$\underline{\boldsymbol{a}}, \qquad \overline{\boldsymbol{a}}$$ — нижний и верхний концы

$$\operatorname{mid} \boldsymbol{a} = \tfrac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{a}} + \underline{\boldsymbol{a}})$$ — середина

$$\operatorname{wid} \boldsymbol{a} = \overline{\boldsymbol{a}} - \underline{\boldsymbol{a}}$$ — ширина

$$\operatorname{rad} \boldsymbol{a} = \tfrac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{a}} - \underline{\boldsymbol{a}})$$ — радиус

$$|\boldsymbol{a}| = \max\{\, |\underline{\boldsymbol{a}}|, |\overline{\boldsymbol{a}}| \,\}$$ — абсолютное значение (модуль)

Характеризация допускового множества решений

$$\boxed{\quad \boldsymbol{X}\beta \ \subseteq \ \boldsymbol{y} \quad}$$

Естественная идея:

количественно охарактеризовать «меру совместности»

как запас включения левой части в правую в этом соотношении,

т. е. «насколько сильно» левая часть включена в правую.

Характеризация допускового множества решений

$$\boxed{\boldsymbol{X}\beta \subseteq \boldsymbol{y}}$$

«Запас» (резерв) включения?

Станем раздувать $\boldsymbol{a}$ относительно середины на t и отслеживать момент, когда нарушится включение полученного интервала в $\boldsymbol{b}$.

Чем большее t необходимо взять, чтобы включение $\boldsymbol{a} + [-t, t] \subseteq \boldsymbol{b}$ нарушилось, тем больше резерв (запас) включения $\boldsymbol{a}$ в $\boldsymbol{b}$.

Резерв включения

Определение

Для интервальных векторов $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{IR}^n$ *резервом интервального включения* $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$ (или просто *резервом*) называется наибольшее число $\mathrm{Rsv} \in \mathbb{R}$, такое что

$$\boldsymbol{a} + [-\mathrm{Rsv}\,, \mathrm{Rsv}\,] \cdot (1, 1, \ldots, 1)^\top \subseteq \boldsymbol{b}\,.$$

Резерв включения

Определение

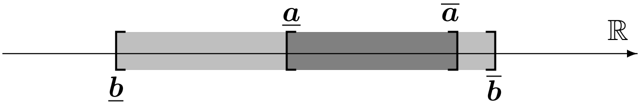
Для интервальных векторов $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{IR}^n$ *резервом интервального включения* $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$ (или просто *резервом*) называется наибольшее число $\mathrm{Rsv} \in \mathbb{R}$, такое что

$$\boldsymbol{a} + [-\mathrm{Rsv}, \mathrm{Rsv}] \cdot (1, 1, \dots, 1)^\top \subseteq \boldsymbol{b}.$$

Определение имеет смысл для $\mathrm{Rsv} < 0$, если операции и отношения понимаются в полной интервальной арифметике Каухера $\mathbb{KR}$.

Если $\mathrm{Rsv} < 0$, то $[-\mathrm{Rsv}, \mathrm{Rsv}]$ — «неправильный интервал» из $\mathbb{KR}$, и $|\mathrm{Rsv}|$ показывает, насколько левая часть в $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$ далека от правой.

Тогда резерв превращается в «дефицит».

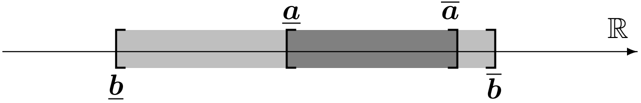


Если $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ — интервалы и $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$, то $\underline{\boldsymbol{a}} \geq \underline{\boldsymbol{b}}$ и $\overline{\boldsymbol{a}} \leq \overline{\boldsymbol{b}}$, поскольку

$$\mathrm{Rsv} \; = \min \left\{ \underline{\boldsymbol{a}} - \underline{\boldsymbol{b}}, \overline{\boldsymbol{b}} - \overline{\boldsymbol{a}} \right\}. \qquad (*)$$

Если $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ — интервальные n-векторы, для которых $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$, то

$$\mathrm{Rsv} \; = \min_{1 \leq i \leq n} \, \min \left\{ \underline{\boldsymbol{a}}_i - \underline{\boldsymbol{b}}_i, \overline{\boldsymbol{b}}_i - \overline{\boldsymbol{a}}_i \right\}. \qquad (**)$$



Если $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ — интервалы и $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$, то $\underline{\boldsymbol{a}} \geq \underline{\boldsymbol{b}}$ и $\overline{\boldsymbol{a}} \leq \overline{\boldsymbol{b}}$, поскольку

$$\mathrm{Rsv} \ = \min \left\{ \underline{\boldsymbol{a}} - \underline{\boldsymbol{b}}, \overline{\boldsymbol{b}} - \overline{\boldsymbol{a}} \right\}. \tag{$*$}$$

Если $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ — интервальные n-векторы, для которых $\boldsymbol{a} \subseteq \boldsymbol{b}$, то

$$\mathrm{Rsv} \ = \min_{1 \leq i \leq n} \min \left\{ \underline{\boldsymbol{a}}_i - \underline{\boldsymbol{b}}_i, \overline{\boldsymbol{b}}_i - \overline{\boldsymbol{a}}_i \right\}. \tag{$**$}$$

Выражения $(*)$ и $(**)$ не очень удобны, так как представляют резерв через концы интервалов, тогда как он определён с помощью раздутия.

$$\begin{aligned}\min\left\{\underline{\boldsymbol{a}}-\underline{\boldsymbol{b}},\overline{\boldsymbol{b}}-\overline{\boldsymbol{a}}\right\}&=\min\left\{\underline{\boldsymbol{a}}-\operatorname{mid}\boldsymbol{b}+\operatorname{rad}\boldsymbol{b},\operatorname{mid}\boldsymbol{b}+\operatorname{rad}\boldsymbol{b}-\overline{\boldsymbol{a}}\right\}\\&=\operatorname{rad}\boldsymbol{b}+\min\left\{\underline{\boldsymbol{a}}-\operatorname{mid}\boldsymbol{b},\operatorname{mid}\boldsymbol{b}-\overline{\boldsymbol{a}}\right\}\\&=\operatorname{rad}\boldsymbol{b}-\max\left\{\operatorname{mid}\boldsymbol{b}-\underline{\boldsymbol{a}},\overline{\boldsymbol{a}}-\operatorname{mid}\boldsymbol{b}\right\}\\&=\operatorname{rad}\boldsymbol{b}-\left|\boldsymbol{a}-\operatorname{mid}\boldsymbol{b}\right| \;=\; \operatorname{rad}\boldsymbol{b}-\left|\operatorname{mid}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a}\right|,\end{aligned}$$

где используется короткое представление модуля:

$$|\boldsymbol{a}|=\max\{-\underline{\boldsymbol{a}},\overline{\boldsymbol{a}}\}.$$

В многомерном случае

$$\mathrm{Rsv}\;=\min_{1\leq i\leq n}\;\left\{\,\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i-\left|\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i-\boldsymbol{a}_i\right|\,\right\}.$$

Точка $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_0, \tilde{\beta}_1, \ldots, \tilde{\beta}_m)$ лежит в допусковом множестве решений интервальной системы уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$ тогда и только тогда

$$\min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \operatorname{rad} \boldsymbol{y}_i - \left| \operatorname{mid} \boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{X}_{i:} \tilde{\beta} \right| \right\} \geq 0.$$

Отрицательные значения означают «дефицит совместности».

Удобно ввести специальную функцию

$$\operatorname{Tol}(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \;=\; \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \operatorname{rad} \boldsymbol{y}_i - \left| \operatorname{mid} \boldsymbol{y}_i - \sum_{j=0}^{m} \boldsymbol{x}_{ij} \beta_j \right| \right\}.$$

которая зна́ком и величиной своих значений показывает совместность или несовместность точки $\beta = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m)^\top$ с данными — $\boldsymbol{X}$ и $\boldsymbol{y}$ — и даёт количественную меру этой совместности.

Распознающий функционал множества решений

Теорема

Для интервальной системы уравнений пусть выражением

$$\mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \;=\; \min_{1\leq i\leq n} \left\{ \operatorname{rad} \boldsymbol{y}_i - \left| \operatorname{mid} \boldsymbol{y}_i - \sum_{j=0}^{m} \boldsymbol{x}_{ij}\beta_j \right| \right\},$$

определяется функционал $\mathrm{Tol}\, : \mathbb{R}^{m+1} \to \mathbb{R}$, такой что принадлежность точки $\tilde{\beta}$ допусковому множеству решений $\Xi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$ интервальной системы уравнений равносильна неотрицательности Tol в точке $\tilde{\beta}$, т. е.

$$\tilde{\beta} \in \Xi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathrm{Tol}\,(\tilde{\beta}, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \geq 0.$$

Распознающий функционал множества решений

— допусковое множество решений $\mathit{\Xi}_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$
для интервальной системы уравнений
является лебеговым множеством (множеством уровня)

$$\{\ \tilde{\beta} \in \mathbb{R}^{m+1} \mid \ \mathrm{Tol}\,(\tilde{\beta}, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \geq 0\ \}$$

функционала Tol.

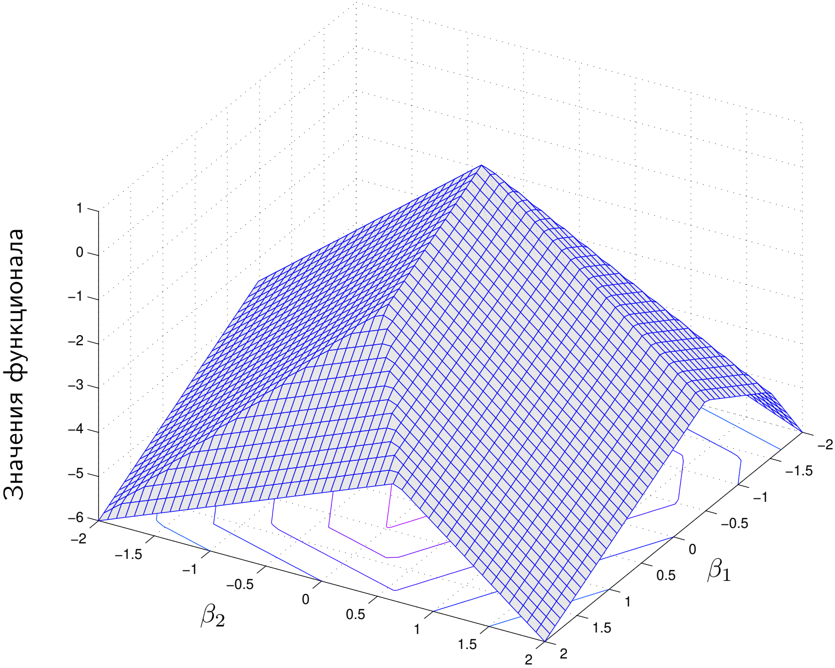
... с помощью знака своих значений функционал Tol
«распознаёт», принадлежит ли точка множеству $\mathit{\Xi}_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$.

Свойства распознающего функционала

Функционал Tol является непрерывной функцией.
Функционал Tol непрерывен с сильном смысле, т. е. по Липшицу.

Функционал Tol является вогнутым по β всюду в $\mathbb{R}^{m+1}$.

Функционал $\mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$ является полиэдральным, т. е. его график составлен из кусков гиперплоскостей.



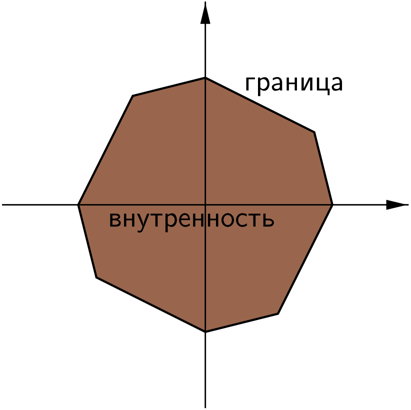
Значения функционала
1
0
−1
−2
−3
−4
−5
−6
β_2
−2
−1.5
−1
−0.5
0
0.5
1
1.5
2
β_1
−2
−1.5
−1
−0.5
0
0.5
1
1.5
2

Свойства распознающего функционала

Функционал $\operatorname{Tol}(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$ достигает конечного максимума по β.

$$\operatorname{Tol}(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = \min_{1 \le i \le n} \left\{ \operatorname{rad} \boldsymbol{y}_i - \left| \operatorname{mid} \boldsymbol{y}_i - \sum_{j=0}^{m} \boldsymbol{x}_{ij} \beta_j \right| \right\}$$

Свойства распознающего функционала



С помощью функционала Tol можем различать
границу и внутренность допускового множества решений.

Исследование допускового множества решений

Для интервальной системы уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$ решаем задачу безусловной максимизации функционала $\mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$.

Исследование допускового множества решений

Для интервальной системы уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$ решаем задачу безусловной максимизации функционала $\operatorname{Tol}(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$.

Пусть $U = \max_{\beta \in \mathbb{R}^{m+1}} \operatorname{Tol}(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$ и достигается в точке $\tau \in \mathbb{R}^{m+1}$.

- Если $U \geq 0$, то $\tau \in \mathit{\Xi}_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \neq \varnothing$, т. е. допусковое иножество решений непусто и τ лежит в нём;

Исследование допускового множества решений

Для интервальной системы уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$ решаем задачу безусловной максимизации функционала $\mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$.

Пусть $U = \max_{\beta \in \mathbb{R}^{m+1}} \mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$ и достигается в точке $\tau \in \mathbb{R}^{m+1}$.

- Если $U \geq 0$, то $\tau \in \varXi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \neq \varnothing$, т. е. допусковое иножество решений непусто и τ лежит в нём;

- Если $U > 0$, то $\tau \in \mathrm{int}\,\varXi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \neq \varnothing$;

Исследование допускового множества решений

Для интервальной системы уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$ решаем задачу безусловной максимизации функционала $\mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$.

Пусть $U = \max_{\beta \in \mathbb{R}^{m+1}} \mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y})$ и достигается в точке $\tau \in \mathbb{R}^{m+1}$.

- Если $U \geq 0$, то $\tau \in \varXi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \neq \varnothing$, т. е. допусковое иножество решений непусто и τ лежит в нём;
- Если $U > 0$, то $\tau \in \mathrm{int}\, \varXi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \neq \varnothing$;
- Если $U < 0$, то $\varXi_{tol}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = \varnothing$, т. е. допусковое множество решений пусто.

V. Метод максимума совместности

Восстановление зависимостей по интервальным данным

Какой следует взять

«меру совместности / несовместности»

между параметрами функции и данными ?

- Она должна быть положительной для точек из непустого допускового множества решений, где совместность в самом деле достигается.

- Она может быть отрицательной для точек вне множества решений, так как для них совместность не выполнена.

Восстановление зависимостей по интервальным данным

Какой следует взять

«меру совместности / несовместности»

между параметрами функции и данными ?

- Она должна быть положительной для точек из непустого допускового множества решений, где совместность в самом деле достигается.
- Она может быть отрицательной для точек вне множества решений, так как для них совместность не выполнена.

Распознающий функционал Tol удовлетворяет этим условиям

Распознающий функционал, как мера совместности параметров и данных

Распознающий функционала допускового множества решений
для интервальной системы уравнений $\boldsymbol{X}\beta = \boldsymbol{y}$

$$\mathrm{Tol}\,(\beta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) \;=\; \min_{1\leq i\leq n}\left\{ \mathrm{rad}\;\boldsymbol{y}_i - \left|\, \mathrm{mid}\;\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{X}_{i:}\,\beta \right| \right\}$$

Его значения могут служить «мерой совместности» точки β
в отношении допускового множества решений.

Метод максимума совместности

...для оценивания параметров функции

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_m x_m$$

В качестве оценки параметров функции берём точку $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_m)$ в которой достигается максимум распознающего функционала Tol

Метод максимума совместности

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_m x_m$$

- Если $\max \mathrm{Tol} \geq 0$, то точка $\hat{\beta}$ лежит во множестве параметров сильно совместных с данными, максимизируя совместность.

- Если $\max \mathrm{Tol} < 0$, то множество параметров, сильно совместных с данными, пусто, но точка $\hat{\beta}$ минимизирует несовместность.

Метод максимума совместности

— для неинтервальных (точечных) данных

превращается в чебышёвское сглаживание.

Если $\boldsymbol{X}$ и $\boldsymbol{y}$ — неинтервальные, т. е. $\boldsymbol{X} = X = (x_{ij})$ и $\boldsymbol{y} = y = (y_i)$, то

$$\operatorname{rad} \boldsymbol{y}_i = 0, \qquad \operatorname{mid} \boldsymbol{y}_i = y_i, \qquad \boldsymbol{x}_{ij} = x_{ij} \qquad \text{для всех } \ i,\ j.$$

Тогда распознающий функционал принимает вид

$$\operatorname{Tol}(\beta, X, y) = \min_{1\leq i\leq n} \left\{ -\Bigl| \, y_i - X_{i:}\,\beta \, \Bigr| \right\} = -\max_{1\leq i\leq n} \Bigl| \, y_i - X_{i:}\,\beta \, \Bigr|$$

$$= -\max_{1\leq i\leq n} \bigl| \, X_{i:}\,\beta - y_i \, \bigr| = -\Bigl\| \bigl(\, X_{i:}\,\beta - y_i \, \bigr)_{i=1}^{n} \Bigr\|_{\infty}.$$

В выписанной выше формуле $\|\cdot\|_\infty$ — чебышёвская норма (∞-норма):

$$\|z\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |z_i|.$$

Получаем

$$\max\ \mathrm{Tol}\,(\beta) \ = \ -\min_{\beta\in\mathbb{R}^m} \left\|\left(\, X_{i:}\,\beta - y_i \,\right)_{i=1}^{n}\right\|_\infty,$$

поскольку $\max\big(-f(\beta)\big) = -\min\ f(\beta)$.

В выписанной выше формуле $\|\cdot\|_\infty$ — чебышёвская норма (∞-норма):

$$\|z\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |z_i|.$$

Получаем

$$\max\ \mathrm{Tol}\,(\beta) \ = \ -\min_{\beta\in\mathbb{R}^m} \Big\|\big(\,X_{i:}\,\beta - y_i\,\big)_{i=1}^{n}\Big\|_\infty,$$

поскольку $\max\,\big(-f(\beta)\big) = -\min\ f(\beta)$.

$\Rightarrow$ для точечных данных максимум распознающего функционала эквивалентен минимуму чебышёвской нормы невязки.

VI. Практическая реализация

Максимизация распознающего функционала

Практическая реализация

В общем случае — задача безусловной максимизации
вогнутой негладкой функции $\mathrm{Tol}\,(x)$.

На сегодняшний день созданы несколько хороших реализаций:

1. r-алгоритмы (Н.З. Шор, Н.Г. Журбенко, П.И. Стецюк, . . .)
2. метод эллипсоидов (Н.З. Шор, П.И. Стецюк)
3. метод отсечений (Е.А. Нурминский, Е.А. Воронцова)
4. сведение к задачам ЛП (С.И. Жилин, С.П. Шарый)

Практическая реализация

Шарый С.П., Жилин С.И.
Простые, быстрые и надежные способы максимизации распознающего функционала // *Вычислительные технологии*. – 2023. – Т. 28, №5. – С. 87–100.

1. сведение к одной задаче ЛП
2. «метод варьирования уровня»

Свободно распространяемая программа `tolsolvty`, реализующая метод максимума согласования в сильном смысле, использует код `ralgb5` П.И. Стецюка (Институт кибернетики, Киев)

... лежит, в частности, на сайте

«Интервальный анализ и его приложения» —

http://www.nsc.ru/interval/

Там же — программа `tolinprog`,

реализующая алгоритмы из работы С.П. Шарого и С.И. Жилина

VII. Практический пример

Исследование алюмотермии

Практический пример

— исследование алюмотермического процесса
утилизации отходов металлургии и машиностроения
в г. Комсомольске-на-Амуре (ИММ ДВО РАН)

Худякова В.А., Жилин С.Г., Предеин В.В., Комаров О.Н. Повышение износостойкости графитового реактора, предназначенного для расплавления термитной шихты // Металлург. – 2024. – №9. – С. 70–77.

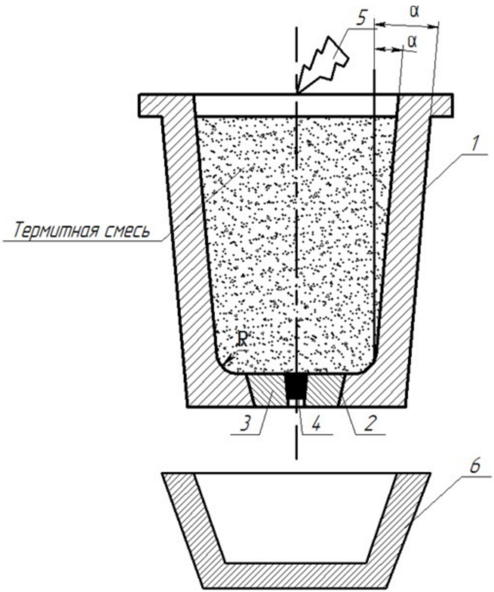
Алюмотермический процесс

Алюминиевая стружка и железная окалина с помощью алюмотермии превращаются в железоалюминиевый сплав ...

Стружка измельчается до порошка, смешивается с железной окалиной, формируя шихту. Помещается в графитовый реактор, где запускается бурная экзотермическая реакция ...

Температура $\approx 2500\,^{\circ}\mathrm{C}$ и более, что приводит к износу реактора.

Его замена или ремонт — доп. эксплуатационные расходы.


5
α
α
1
Термитная смесь
R
3
4
2
6

Исследование алюмотермического процесса

Один из способов продления срока службы реактора
— предварительный нагрев реактора и шихты.

Но это может повлиять на протекание реакции, что отразится на характеристиках итогового сплава — структуре и твёрдости.

Как предварительный нагрев влияет на свойства сплава?

Исследование алюмотермического процесса

Твёрдость «по Виккерсу»

$$HV = HV(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3,$$

где x — доля содержания Al в термитной шихте, в %,

a_0, a_1, a_2, a_3 — параметры модели,

HV — микротвёрдость финального сплава, в МПа.

Метод наименьших квадратов

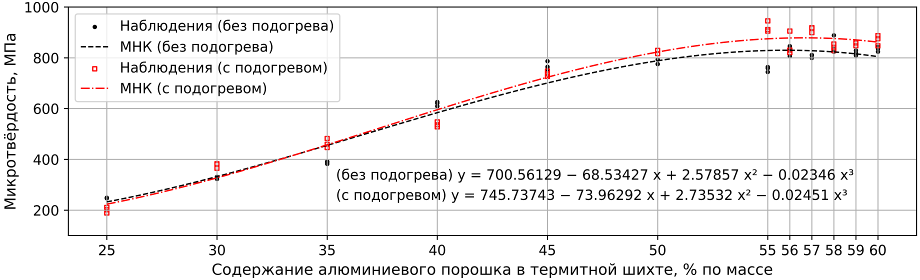


График «с подогревом» и график «без подогрева» пересекаются, и ни один из них не лучше другого на всей области определения.

Метод максимума совместности

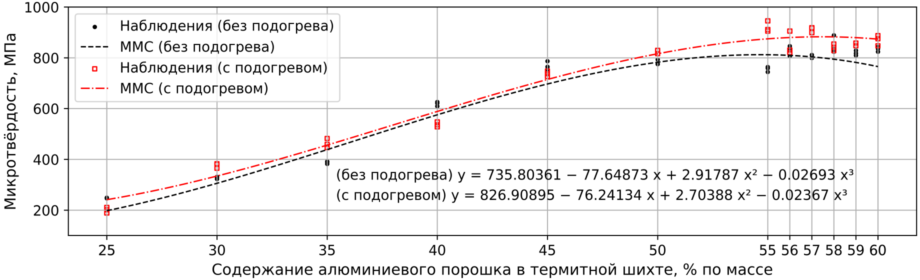


График «с подогревом» равномерно выше графика «без подогрева», так что предварительный подогрев увеличивает твёрдость.

Спасибо за внимание