

Методы восстановления дробно-линейных зависимостей по данным с интервальной неопределенностью

С. П. ШАРЫЙ^{1,*}, Е. П. ШАШКИНА²

¹Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

*Контактный автор: Шарый Сергей Петрович, e-mail: shary@ict.nsc.ru

Поступила 06 октября 2022 г., доработана 07 декабря 2022 г., принята в печать 10 января 2023 г.

Рассмотрены методы восстановления дробно-линейных функциональных зависимостей по данным с интервальной неопределенностью. В качестве практического приложения решена задача обработки интервальных данных измерений электрохимического процесса формирования осадка металла. Для восстановления искомой функциональной зависимости предлагается развитие метода максимума совместности, ранее успешно зарекомендовавшего себя при решении задач нахождения параметров линейных зависимостей. Для случая сильной совместности параметров и данных показана квазивогнутость распознающего функционала, точка максимума которого берется в качестве оценки параметров зависимости. Рассматривается обобщение на произвольные дробно-линейные функции.

Ключевые слова: задача восстановления зависимостей, интервальная неопределенность данных, дробно-линейная функция, совместность параметров и данных, сильная совместность, метод максимума совместности, распознающий функционал, квазивогнутость.

Цитирование: Шарый С.П., Шашкина Е.П. Методы восстановления дробно-линейных зависимостей по данным с интервальной неопределенностью. Вычислительные технологии. 2024; 29(2):35–61. DOI:10.25743/ICT.2024.29.2.004.

Сергею Ивановичу Кумкову в честь его юбилея.

Введение

Задача восстановления функциональной зависимости — это распространенная практическая задача, в которой по эмпирическим данным, представляющим ряд значений независимых переменных и соответствующих им значений зависимой переменной, требуется построить саму функцию заданного вида. При этом эмпирические данные, полученные опытным путем, как правило, неточны, имеют неизбежные погрешности и т. п. На сегодняшний день существует немало математических подходов к решению таких задач, и большинство из них опирается на теоретико-вероятностную модель погрешностей, знание их вероятностных характеристик, а также достаточный объем обрабатываемых данных. Результаты восстановления зависимости представляются в виде точечной

оценки в пространстве параметров данной функции, дополнительно к которым строятся “доверительные интервалы” оценок, соответствующие заданному уровню доверительной вероятности.

Помимо используемого нами названия “задача восстановления зависимости” [1] очень часто можно встретить и другие эквивалентные термины: “задача построения эмпирических формул” [2, 3], “задача выравнивания или слаживания наблюдений” [4]. Иногда говорят о задаче идентификации, задаче оценки параметров и т. п. В контексте теоретико-вероятностной статистики эта задача рассматривается в регрессионном анализе и называется задачей построения регрессии [5]. Наконец, в последние десятилетия задача восстановления функциональной зависимости стала классифицироваться как одна из основных задач машинного обучения.

В этой работе рассматривается ситуация, когда объем данных может быть небольшим и вероятностные характеристики погрешностей измерений неизвестны. В этих условиях применение традиционных статистических методов обработки данных, которые основаны на теоретико-вероятностных моделях, является необоснованным. Тем не менее часто бывают известны максимальные величины погрешностей измерений значений функции и/или ее аргументов. Основываясь на этой информации, мы можем применять подход к обработке неточных эмпирических данных, впервые предложенный в 1962 г. в пионерной работе Л.В. Канторовича [6]. Его отличительная особенность — описание погрешностей и неточностей с помощью неравенств и интервалов, а не как случайных величин с какими-то функциями распределения. Таким образом, в самой постановке задачи присутствует “интервальность” данных, отражающая тот факт, что вместо точных значений результатов измерений у нас имеются лишь некоторые интервалы их возможных значений. Иными словами, исходными данными задачи являются “интервалы неопределенности” или, в многомерном случае, “брюсы неопределенности”, а математической основой решения задачи служат методы интервального анализа (см., к примеру, [7–9]).

Главная цель этой работы — построение и обоснование методов восстановления дробно-линейных функциональных зависимостей по данным, которые имеют интервальную неопределенность. Это востребованная практическая задача, которая встречается во многих физических, экономических и других вопросах. Мы будем решать поставленную задачу с помощью *метода максимума совместности* (ранее — метод максимума согласования), разработанного первым автором этой статьи в работах [10–15]. Для решения задач восстановления зависимостей по интервальным данным на сегодняшний день существует немало различных подходов, в частности метод центра неопределенности, методы исчерпывания информационного множества и др. Среди них метод максимума совместности выгодно отличается возможностью обобщения на нелинейные задачи, а также своей способностью справляться с любыми интервальными данными как для независимых аргументов, так и для значений функции.

Теоретические результаты работы иллюстрируются решением практической задачи, относящейся к определению времени наращивания рыхлого осадка в электрохимических процессах. Ранее эта задача решалась командой исследователей из Института математики и механики УрО РАН и Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН [16, 17]. В настоящее время нет ее полного и точного решения. Для адекватного моделирования явления необходим подход, который включал бы в себя выбор показателя, характеризующего изменение свойств рыхлого осадка, а также оценку области возможного изменения этого показателя. Поскольку процесс формирования рыхлых

осадков — случайный и неточный по своей природе, а также зависит от внешних факторов, для определения времени получения осадка нужна тщательная математическая обработка входных данных.

Функция, описывающая образование рыхлых осадков, в работах [16, 17] рассматривается в виде

$$W(t) = \frac{at + b}{ct + d},$$

где t — время; a, b, c и d — некоторые параметры. При измерениях W допускаются погрешности, для которых известно предельное абсолютное значение Δ . Как следствие, можно считать, что данные измерений адекватно описываются интервалами своих возможных значений вида $[W - \Delta, W + \Delta]$. Измерение моментов времени t может быть как точным, так и неточным, имея в последнем случае также интервальную неопределенность.

Для выбора показателя, определяющего переход от электроосаждения цинка в форме дендритных частиц к компактному металлу, в работе [16] выполнены измерения физических и электрохимических характеристик процесса роста рыхлого осадка на электроде. Полученный в результате эксперимента набор данных в графической интерпретации напоминает набор “отрезков-столбиков” (интервалов неопределенности), через которые необходимо провести графики функций заданного вида. На этой основе далее может быть построен так называемый коридор совместных зависимостей [18], который позволит оценить пределы возможных значений восстанавливаемых функций, т. е. неопределенность предсказания будущего по построенной зависимости.

1. Базовые понятия интервального анализа

Цель этого раздела — напомнить некоторые понятия и факты из интервального анализа, на которые опирается изложение нашей статьи. Если читатель уже знаком с этим материалом, он может переходить к следующему разделу.

Интервалом вещественной оси \mathbb{R} называется замкнутый числовой промежуток вида $\mathbf{x} = [\underline{x}, \bar{x}]$, образованный всеми числами между \underline{x} и \bar{x} , включая их самих. Всюду в тексте интервалы и другие интервальные объекты будут обозначаться жирным математическим шрифтом в соответствии с неформальным стандартом [19]. Кроме того, нижний (левый) конец интервала \mathbf{x} будем обозначать с помощью подчеркивания — как $\underline{\mathbf{x}}$, а верхний (правый) конец интервала \mathbf{x} — с помощью надчеркивания, как $\bar{\mathbf{x}}$, так что в целом

$$\mathbf{x} = [\underline{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{x}}] = \{x \in \mathbb{R} \mid \underline{\mathbf{x}} \leq x \leq \bar{\mathbf{x}}\}.$$

Интервал называется *вырожденным* при $\bar{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{x}}$ и *невырожденным* иначе. В целом множество всех интервалов вещественной оси обозначается \mathbb{IR} .

В дальнейшем потребуются также некоторые характеристики интервалов:

$$\text{mid } \mathbf{x} = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{x}}) \quad \text{— середина интервала } \mathbf{x},$$

$$\text{rad } \mathbf{x} = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}} - \underline{\mathbf{x}}) \quad \text{— радиус интервала } \mathbf{x},$$

$$|\mathbf{x}| = \max\{|\underline{\mathbf{x}}|, |\bar{\mathbf{x}}|\} \quad \text{— модуль или абсолютное значение интервала } \mathbf{x}.$$

Абсолютное значение интервала — это максимум модулей чисел из этого интервала. Различные свойства введенных понятий и дальнейшие результаты можно найти, например, в книгах [7–9].

В многомерном случае интервалы можно определять различными способами, выбор которых диктуется удобством решения тех или иных задач. Одно из наиболее популярных определений многомерного интервала — это прямое декартово произведение одномерных интервалов

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 \times \mathbf{x}_2 \times \dots \times \mathbf{x}_n = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_i \in \mathbf{x}_i \text{ для всех } i = 1, \dots, n\}.$$

Будем называть \mathbf{x} *интервальным вектором* и писать $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)^\top$. Для таких многомерных интервалов часто используют также термин *брюсы*, так как геометрически они соответствуют прямоугольным параллелепипедам в \mathbb{R}^n с гранями, параллельными координатным осям. Введенные выше характеристики интервалов — середина, радиус, модуль — для случая интервалов-брюсов применяются покомпонентно и поэлементно. Помимо брюсов популярны также многомерные интервалы в виде косых параллелепипедов, параллелотопов, шаров некоторой нормы, эллипсоидов и т. п.

На множестве интервалов могут быть определены операции и отношения, позволяющие организовать преобразования интервалов, выкладки и рассуждения с ними для решения различных математических задач. Одним из популярных способов определения на множестве интервалов арифметических операций является определение “по представителям”:

$$\mathbf{x} \star \mathbf{y} := \{x \star y \mid x \in \mathbf{x}, y \in \mathbf{y}\}, \quad \text{где } \star \in \{+, -, \cdot, /\}.$$

Иными словами, результат интервальной арифметической операции определяется как множество всевозможных результатов этой операции между представителями интервалов (при условии, что этот результат определен). Нетрудно показать, что, за исключением деления на интервал с нулем, это множество тоже является интервалом. Справедливы следующие конструктивные формулы [7–9]:

$$\mathbf{x} + \mathbf{y} = [\underline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{y}}], \quad (1)$$

$$\mathbf{x} - \mathbf{y} = [\underline{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{x}} - \underline{\mathbf{y}}], \quad (2)$$

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = [\min \{\underline{\mathbf{x}} \bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{y}}, \underline{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{x}} \bar{\mathbf{y}}\}, \max \{\underline{\mathbf{x}} \bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{y}}, \underline{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{x}} \bar{\mathbf{y}}\}], \quad (3)$$

$$\mathbf{x}/\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot [1/\bar{\mathbf{y}}, 1/\underline{\mathbf{y}}], \quad \text{если } 0 \notin \mathbf{y}. \quad (4)$$

Алгебраическая система $\langle \mathbb{IR}, +, -, \cdot, /\rangle$, носителем которой является множество \mathbb{IR} интервалов вещественной оси \mathbb{R} , а арифметические операции “+”, “-”, “·”, “/” определены по формулам (1)–(4), называется *классической интервальной арифметикой*. Интервальные арифметические операции можно комбинировать между собой и далее использовать для оценки областей значений различных выражений. Напомним результат, который будет широко использоваться далее.

Основная теорема интервальной арифметики [7, 8]. *Пусть $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ — рациональная функция вещественных аргументов x_1, x_2, \dots, x_n , т. е. f задается аналитическим выражением, которое является конечной комбинацией переменных x_1, x_2, \dots, x_n и констант с четырьмя арифметическими операциями. Если для нее определен результат $\mathbf{f}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ подстановки вместо аргументов интервалов их изменения $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{IR}$ и выполнения всех действий над ними по правилам интервальной арифметики, то*

$$\{f(x_1, x_2, \dots, x_n) \mid x_1 \in \mathbf{x}_1, x_2 \in \mathbf{x}_2, \dots, x_n \in \mathbf{x}_n\} \subseteq \mathbf{f}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (5)$$

t. e. $\mathbf{f}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ содержит область значений функции $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ на брусе $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$. Если же выражение для $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ содержит не более чем по одному вхождению каждой переменной в первой степени, то в (5) вместо включения выполняется точное равенство.

Обобщением конструкции, которая используется в основной теореме интервальной арифметики, является понятие интервального расширения функции [7–9].

Напомним, что интервальная функция $\mathbf{f} : \mathbb{K}\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{K}\mathbb{R}^m$ является *интервальным продолжением* точечной функции $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ на множестве $D \subset \mathbb{R}^n$, если $\mathbf{f}(x) = f(x)$ для всех точечных аргументов $x \in D$.

Интервальная функция $\mathbf{f} : \mathbb{I}\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{I}\mathbb{R}^m$ называется *интервальным расширением* точечной функции $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ на $D \subset \mathbb{R}^n$, если она определена на множестве $\mathbb{I}D$ всех интервалов, содержащихся в D и, кроме того:

- является интервальным продолжением f на D ;
- монотонна по включению на $\mathbb{I}D$, т. е. для любых $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{I}D$, имеет место импликация $\mathbf{x} \subseteq \mathbf{y} \Rightarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}) \subseteq \mathbf{f}(\mathbf{y})$.

Если \mathbf{f} — интервальное расширение для точечной функции f , то для всякого бруса \mathbf{X} и любого $x \in \mathbf{X}$ справедливо $f(x) = \mathbf{f}(x) \in \mathbf{f}(\mathbf{X})$ и потому интервал $\mathbf{f}(\mathbf{X})$ является внешней интервальной оценкой области значений $\text{ran}(f, \mathbf{X})$. В интервальном анализе за последние полвека было предложено и исследовано немало различных способов построения интервальных расширений функций, отличающихся сложностью вычисления, точностью оценок и т. п. В частности, простейшее интервальное расширение рациональной функции, конструкция которого дается основной теоремой интервальной арифметики, называют *естественным интервальным расширением*.

2. Теоретические основы

2.1. Обсуждение задачи восстановления зависимости

Пусть дано параметрическое семейство функциональных зависимостей

$$y = f(x, \beta), \quad (6)$$

где $x \in \mathbb{R}^m$ — вектор независимых переменных, $y \in \mathbb{R}$ — зависимая переменная, β — параметр (одномерный или многомерный). Одной из наиболее важных и популярных практических задач является задача определения значения параметра β , при котором функция (6) заданного вида наилучшим образом приближает (аппроксимирует и пр.) данный набор значений x и y . Эти значения могут быть получены в результате измерений или наблюдений в ходе экспериментов и т. п. Сформулированная выше задача называется *задачей восстановления зависимостей*. Ее простейший вариант — нахождение параметров $(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)$ линейной функции вида

$$y = \beta_1 x_1 + \dots + \beta_m x_m \quad (7)$$

по данным измерений независимых переменных x_1, x_2, \dots, x_m и соответствующих значений функции y .

Далее будем считать, что исходными данными задачи является набор интервалов для независимых и зависимых переменных, так что в результате i -го измерения (эксперимента) получены брусы $(\mathbf{x}_{i1}, \dots, \mathbf{x}_{im})$ для независимых переменных и интервал \mathbf{y}_i для

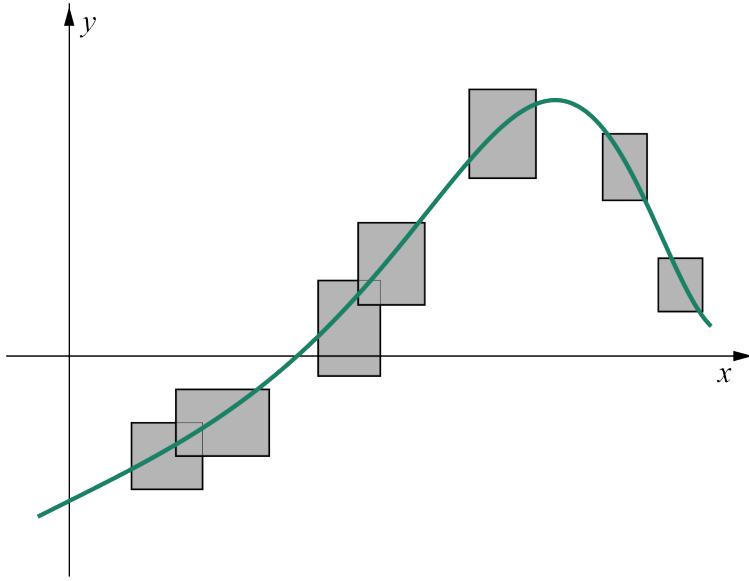


Рис. 1. Иллюстрация задачи восстановления функциональной зависимости по данным с интервальной неопределенностью

Fig. 1. An illustration of the data fitting problem under interval uncertainty

зависимой переменной, $i = 1, \dots, n$. Конкретные способы возникновения интервальных данных могут быть очень разнообразны, и читатель может составить представление о них, к примеру, из книги [18]. В целом полученные данные можно записать в виде прямоугольной $n \times (m + 1)$ -таблицы

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{x}_{11}, \quad \mathbf{x}_{12}, \quad \dots \quad \mathbf{x}_{1m}, \quad \mathbf{y}_1, \\
 & \mathbf{x}_{21}, \quad \mathbf{x}_{22}, \quad \dots \quad \mathbf{x}_{2m}, \quad \mathbf{y}_2, \\
 & \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \quad \vdots \\
 & \mathbf{x}_{n1}, \quad \mathbf{x}_{n2}, \quad \dots \quad \mathbf{x}_{nm}, \quad \mathbf{y}_n,
 \end{aligned} \tag{8}$$

где \mathbf{x}_{ij} — значение x_j в i -м измерении, а \mathbf{y}_i — значение y в i -м измерении, $i = 1, 2, \dots, n$. Эти данные образуют семейство брусов вида $(\mathbf{x}_{i1}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \mathbf{y}_i)$ в \mathbb{R}^{m+1} , которые соответствуют отдельным измерениям (наблюдениям). Их называют *брюсами неопределенности* измерений [18], и наглядно они показаны на рис. 1.

Ниже в наших конструкциях будут интенсивно использоваться интервальная $n \times m$ -матрица $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_{ij})$ и интервальный вектор-брюс $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_i)$, составленные из данных задачи (8), т. е. интервалов независимых переменных и интервалов значений функции соответственно. Отдельному i -му измерению отвечает i -я строка $(\mathbf{x}_{i1}, \dots, \mathbf{x}_{im})$ матрицы \mathbf{X} , которую будем обозначать посредством $\mathbf{X}_{i:}$, т. е. как сечение массива \mathbf{X} .¹ В целом искомую функцию вида (6) нужно построить так, чтобы она наилучшим образом “приближала” интервальные данные, а ее график в идеале проходил бы, тем или иным способом, через заданные брусы неопределенности (рис. 1).

Пусть β — l -мерный вектор параметров, т. е. $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) \in \mathbb{R}^l$. Формально подставляя полученные в ходе экспериментов интервальные данные (8) в выражение для функциональной зависимости (6), получаем интервальную систему уравнений относительно неизвестных $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l$:

¹Напомним, что это удобное и выразительное обозначение из MATLAB'a и подобных ему языков программирования в настоящее время широко распространено в вычислительной математике.

$$\begin{cases} f(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) = \mathbf{y}_i, \\ i = 1, 2, \dots, n, \end{cases} \quad (9)$$

или в краткой форме

$$\begin{cases} f(\mathbf{X}_{i:}, \beta) = \mathbf{y}_i, \\ i = 1, 2, \dots, n. \end{cases}$$

Нахождение оценки параметров зависимости (6) — это фактически “решение”, в определенном смысле, выписанной выше интервальнойной системы уравнений (9) относительно $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l$ аналогично тому, как построение параметров модели в случае обычных точечных данных сводится к нахождению решений или псевдорешений системы уравнений, похожей на систему (9).

Для случая восстановления линейной зависимости вида (7) интервальная система уравнений (9) принимает более специальную форму

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{11}\beta_1 + \mathbf{x}_{12}\beta_2 + \dots + \mathbf{x}_{1m}\beta_m = \mathbf{y}_1, \\ \mathbf{x}_{21}\beta_1 + \mathbf{x}_{22}\beta_2 + \dots + \mathbf{x}_{2m}\beta_m = \mathbf{y}_2, \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \quad \vdots \\ \mathbf{x}_{n1}\beta_1 + \mathbf{x}_{n2}\beta_2 + \dots + \mathbf{x}_{nm}\beta_m = \mathbf{y}_n, \end{cases} \quad (10)$$

или кратко

$$\mathbf{X}\beta = \mathbf{y}, \quad (11)$$

где $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_{ij})$ и $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_i)$ — введенные выше интервальнаяя $n \times m$ -матрица и интервальный n -вектор, которые образованы данными измерений.

Но для интервальных уравнений и систем уравнений понятие решения гораздо богаче, чем его прародитель — решения (или даже псевдорешения) обычных уравнений. Решения интервальных уравнений, неравенств и т. п. можно трактовать различными способами, смотря по тому, какой тип интервальной неопределенности несут интервалы, входящие параметрами в это уравнение, систему уравнений или неравенств [7]. Эти различные смыслы понимания решений интервальных уравнений отвечают различным способам приближения интервальных данных в нашей задаче восстановления зависимости, т. е. различным способом прохождения графика восстанавливаемой функциональной зависимости (6) через брусы неопределенности измерений. Впервые это обстоятельство было отмечено в работе [11], и оно влечет важные следствия для методов решения задачи восстановления зависимостей по интервальным данным.

Исторически первым множеством решений для интервальных систем уравнений было объединенное множество решений, которое определяется как множество всевозможных решений обычных (точечных) систем, параметры которых принадлежат заданным интервалам. Для системы уравнений (9) строгое определение этого множества решений, которое мы будем обозначать Ξ_{uni} (от фразы *united solution set*), выглядит следующим образом:

$$\Xi_{uni} = \{\beta \in \mathbb{R}^l \mid f(x, \beta) = y_i \text{ для некоторых } x \in \mathbf{X}_{i:} \text{ и } y_i \in \mathbf{y}_i, i = 1, 2, \dots, n\},$$

или формально

$$\Xi_{uni} = \{\beta \in \mathbb{R}^l \mid (\exists x \in \mathbf{X}_{i:})(\exists y_i \in \mathbf{y}_i) f(x, \beta) = y_i, i = 1, 2, \dots, n\}. \quad (12)$$

Определение 1. Набор параметров $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l$ функции (6) называется *слабо совместным* с интервальными данными $(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \mathbf{y}_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$, если для каждого измерения i в пределах соответствующих интервалов найдутся такие представители $x_{i1} \in \mathbf{x}_{i1}, x_{i2} \in \mathbf{x}_{i2}, \dots, x_{im} \in \mathbf{x}_{im}$ и $y_i \in \mathbf{y}_i$, что

$$f(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) = y_i.$$

Этому определению отвечает тот способ прохождения графика восстанавливаемой функциональной зависимости через брусы неопределенности, когда график может просто иметь какие-то общие точки с этим брусами (рис. 2, *a*).

Но объединенное множество решений — не единственное из множеств решений для интервальных уравнений и систем уравнений. В 1970–1980-е гг. была осознана ценность другого множества решений, которое получило название *допускового множества решений*. Для системы уравнений (9) строгое определение этого множества решений, которое мы будем обозначать Ξ_{tol} (от фразы tolerable solution set), выглядит следующим образом:

$$\Xi_{tol} = \{\beta \in \mathbb{R}^n \mid \text{для любого } x \in \mathbf{X}_{i:} \text{ выполнено } f(x, \beta) \in \mathbf{y}_i, i = 1, 2, \dots, n\},$$

или формально

$$\Xi_{tol} = \{\beta \in \mathbb{R}^l \mid (\forall x \in \mathbf{X}_{i:})(\exists y_i \in \mathbf{y}_i) f(x, \beta) = y_i, i = 1, 2, \dots, n\}. \quad (13)$$

Допусковое множество решений образовано всеми такими решениями β точечных систем (9), для которых значение $f(x, \beta)$ попадает в интервалы правой части \mathbf{y}_i , $i = 1, 2, \dots, n$, при любых значениях $x \in \mathbf{X}_{i:}$. Таким образом, Ξ_{tol} отличается от Ξ_{uni} тем, что в его определении при интервальных величинах $\mathbf{X}_{i:}$ логическими кванторами (задающими тип интервальной неопределенности [7]) вместо кванторов существования “ \exists ” стоят кванторы всеобщности “ \forall ”.

Из самого определения множеств решений (12) и (13) следует, что

$$\Xi_{tol} \subseteq \Xi_{uni},$$

т. е. допусковое множество решений всегда является подмножеством объединенного множества решений. Условия, определяющие допусковое множество решений, более

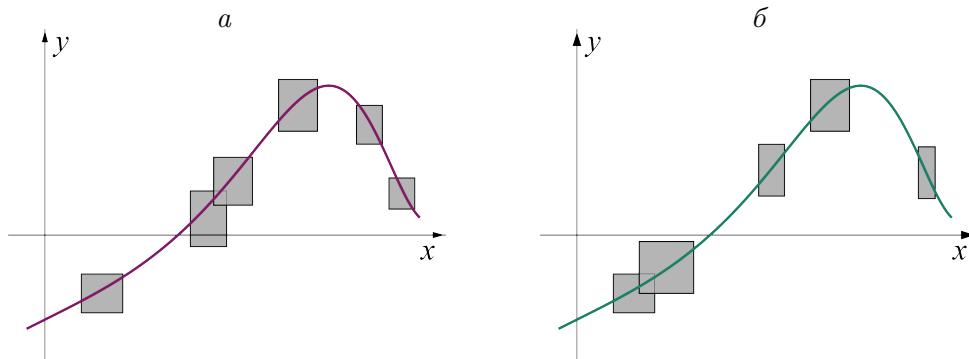


Рис. 2. Иллюстрация слабой (*a*) и сильной (*б*) совместности параметров функциональной зависимости и интервальных данных задачи

Fig. 2. Illustration of weak (*a*) and strong (*б*) compatibility for parameters of a functional dependence and interval data of the problem

жесткие, и оно может оказаться пустым даже для вполне обыденных случаев. Для нас важно то, что допусковому множеству решений отвечает другой способ приближения интервальных данных, который мы также отметим своим определением.

Определение 2. Набор параметров $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l$ функции (6) называется *сильно совместным* с интервальными данными $(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \mathbf{y}_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$, если для каждого измерения i для любых значений аргументов $x_{i1} \in \mathbf{x}_{i1}, x_{i2} \in \mathbf{x}_{i2}, \dots, x_{im} \in \mathbf{x}_{im}$ найдется такое $y_i \in \mathbf{y}_i$ в пределах интервала значений функции, что

$$f(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) = y_i.$$

Этому определению соответствует способ прохождения графика восстановленной функциональной зависимости $f(x, \beta)$ через брусы неопределенности данных, когда график содержится в “коридоре”, задаваемом интервалом \mathbf{y}_i , независимо от конкретных значений $x_{i1} \in \mathbf{x}_{i1}, x_{i2} \in \mathbf{x}_{i2}, \dots, x_{im} \in \mathbf{x}_{im}$ (еще говорят — “равномерно по $x_{i1} \in \mathbf{x}_{i1}, x_{i2} \in \mathbf{x}_{i2}, \dots, x_{im} \in \mathbf{x}_{im}$ ”). В то же время слабая совместность согласно определению 1 подразумевает, что график восстановленной функциональной зависимости $f(x, \beta)$ “хоть как-то задевает” брусы неопределенности. Как было показано в [11, 14], это может привести к появлению бессмысленных и “нефизичных” ответов при решении сложных задач восстановления зависимостей для сильно налагающих друг на друга брусов неопределенности. Сильная совместность не допускает подобных патологий.

Множества решений (12) и (13) часто объединяют общим термином — *информационные множества* задачи восстановления зависимостей [18]. Так называют множества параметров, которые являются совместными (согласуются) с данными в том или ином конкретном смысле, который требуется в задаче.

Если информационное множество задачи (т. е. необходимое по смыслу задачи множество решений) непусто, то из него можно выбирать оценку параметров. Но если множество решений системы (9) пусто, т. е. система уравнений несовместна в нужном нам смысле, то возникает методическая проблема — как выбирать оценку?

Естественная идея состоит в том, чтобы тогда в качестве оценки параметров функции (6) взять точку, в которой достигается “наименьшая несовместность”. Для этого необходимо определить количественную меру совместности/несовместности системы уравнений, построенной по данным задачи и восстанавливаемой зависимости, и для нахождения оценки параметров максимизировать эту меру.

2.2. Мера совместности интервальных уравнений

Что брать в качестве количественной меры совместности для интервальных уравнений и систем уравнений? В традиционном неинтервальном случае естественной мерой совместности уравнения или системы уравнений на каком-нибудь приближенном решении является *невязка* — разность между левой и правой частями уравнения при подстановке в него этого приближения. Но для исследования совместности интервальных уравнений, под которой понимается непустота их множеств решений, подобная конструкция не годится. Для определения подходящей меры совместности для интервальных уравнений и систем уравнений нужно внимательнее посмотреть на условия, которые характеризуют принадлежность точки множеству решений.

Условия принадлежности точки различным множествам решений интервальной системы уравнений (9) могут быть сформулированы как условия на взаимное расположение в \mathbb{R}^n области значений левой части системы уравнений, т. е. множества

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}, \beta) := \left\{ \begin{pmatrix} f(x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1m}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) \\ f(x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2m}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{nm}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n \middle| \begin{array}{l} x_{ij} \in \mathbf{x}_{ij}, \\ i = 1, 2, \dots, n, \\ j = 1, 2, \dots, m \end{array} \right\}, \quad (14)$$

и бруса правой части $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n)^\top$. Точка $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l)^\top$ принадлежит объединенному множеству решений Ξ_{uni} тогда и только тогда, когда

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}, \tilde{\beta}) \cap \mathbf{y} \neq \emptyset. \quad (15)$$

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

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}, \tilde{\beta}) \subseteq \mathbf{y}. \quad (16)$$

Это вытекает из самих определений объединенного и допускового множеств решений. Но для того чтобы практически применять сформулированные выше признаки и далее развивать вычислительные методы, нужно указать конструктивный способ нахождения области значений $\mathcal{F}(\mathbf{X}, \tilde{\beta})$.

Это непростая задача даже в одномерном случае, т. е. при оценивании областей значений отдельных компонент вектор-функции. Но в многомерной ситуации трудности возрастают за счет новых эффектов. Прежде всего это несовпадение формы идеальной области значений с формой интервальных брусов, которыми мы ее оцениваем. В результате оценивание области значений интервальными методами даст брус внешней оценки, который, скорее всего, не будет равен точной области значений, но лишь содержит ее. Тогда, к примеру, проверка пересечения (15) становится проблематичной (рис. 3).

Сформулированное затруднение преодолевается в случае, когда область значений вектор-функции $\mathcal{F}(\mathbf{X}, \tilde{\beta})$ есть прямое декартово произведение областей значений отдельных компонент. Тогда область значений сама является интервальным бруском. Это условие выполнено для множества (14), если интервальные величины, получающиеся в результате различных измерений и входящие в разные компоненты вектор-функции,

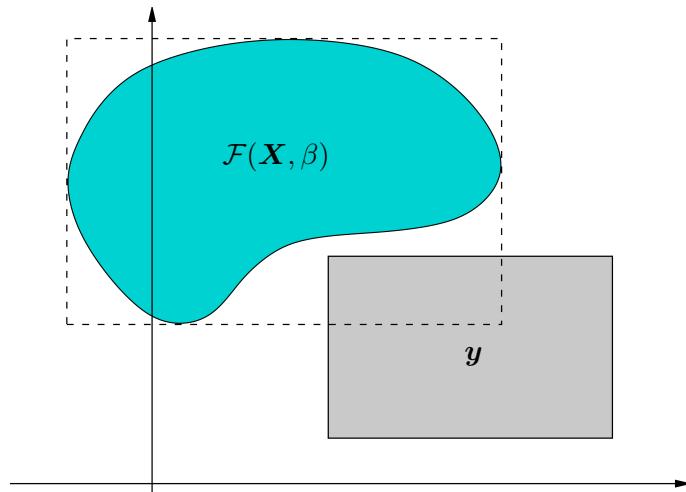


Рис. 3. Проблема оценивания области значений вектор-функции

Fig. 3. Illustration to the problem when the range of values for a vector function is established

являются независимыми друг от друга в том смысле, как это понимается в современном интервальном анализе. Обычно считается, что это условие выполнено для интервальных результатов измерений, полученных в разные моменты времени (см. подробности в [7, 18]).

Обозначим посредством $f(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l)$ область значений отображения f при изменении первых m аргументов в пределах интервалов $\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}$ соответственно, т. е. пусть

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) := \\ := \{f(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l) \mid x_{i1} \in \mathbf{x}_{i1}, x_{i2} \in \mathbf{x}_{i2}, \dots, x_{im} \in \mathbf{x}_{im}\}. \end{aligned}$$

Эта область значений может быть найдена точно или же оценена объемлющим интервалом с помощью методов интервального анализа. Ниже для простоты предположим, что нам доступна точная интервальная оценка этого множества значений. Это в самом деле реализуется на практике для линейных и некоторых частных случаев нелинейных отображений (см. разд. 3). Тогда условиям (15) и (16) можно придать более конструктивный характер.

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

$$(f(\mathbf{X}_{i1}, \beta), f(\mathbf{X}_{i2}, \beta), \dots, f(\mathbf{X}_{in}, \beta))^\top \cap \mathbf{y} \neq \emptyset,$$

или, в развернутой форме,

$$\begin{pmatrix} f(\mathbf{x}_{11}, \mathbf{x}_{12}, \dots, \mathbf{x}_{1m}, \tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l) \\ f(\mathbf{x}_{21}, \mathbf{x}_{22}, \dots, \mathbf{x}_{2m}, \tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(\mathbf{x}_{n1}, \mathbf{x}_{n2}, \dots, \mathbf{x}_{nm}, \tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l) \end{pmatrix} \cap \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_n \end{pmatrix} \neq \emptyset.$$

Это утверждение является непосредственным обобщением критерия Бекка принадлежности объединенному множеству решений для интервальных линейных систем уравнений (см. [7]).

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

$$(f(\mathbf{X}_{i1}, \beta), f(\mathbf{X}_{i2}, \beta), \dots, f(\mathbf{X}_{in}, \beta))^\top \subseteq \mathbf{y},$$

или, в развернутой форме,

$$\begin{pmatrix} f(\mathbf{x}_{11}, \mathbf{x}_{12}, \dots, \mathbf{x}_{1m}, \tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l) \\ f(\mathbf{x}_{21}, \mathbf{x}_{22}, \dots, \mathbf{x}_{2m}, \tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(\mathbf{x}_{n1}, \mathbf{x}_{n2}, \dots, \mathbf{x}_{nm}, \tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l) \end{pmatrix} \subseteq \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_n \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Для пересечения брусов и для включения одного бруса в другой, соответственно, можно ввести количественные меры, так что совместность или несовместность

интервальной системы уравнений будет охарактеризована количественным образом. Этот план был реализован в линейном случае в работах [10–13], и его результатом являются так называемые распознающие функционалы множеств решений, специальные функции, с помощью которых можно дать количественную меру совместности или несовместности интервальных уравнений. Фактически в этой статье мы распространяем разработанную ранее технику на общий нелинейный случай.

Ниже мы подробно рассматриваем допусковое множество решений и связанную с ним сильную совместность интервальных данных и параметров восстанавливаемой функции, так как они обладают более благоприятными математическими свойствами и смысл сильной совместности лучше соответствует реальному процессу измерений с погрешностями для входов и выходов какого-то объекта. Рассмотрим поэтому отношение включения (17).

Пусть даны два интервала $\mathbf{a}, \mathbf{b} \subset \mathbb{R}$, причем $\mathbf{a} \subseteq \mathbf{b}$. Как можно количественно охарактеризовать “запас включения” интервала \mathbf{a} в интервал \mathbf{b} , т. е. то, “насколько сильно” \mathbf{a} включен в \mathbf{b} ? Один из возможных естественных способов сделать это был предложен в [20], и он заключается в следующем. Начнем равномерно “раздувать” меньший интервал \mathbf{a} относительно его середины на величину t , т. е. организуем семейство интервалов $\mathbf{a} + [-t, t]$ для различных $t \in \mathbb{R}$, и отследим момент, когда включение получающегося интервала в \mathbf{b} нарушится. Чем больше нужно будет взять значение t для нарушения включения $\mathbf{a} + [-t, t] \subseteq \mathbf{b}$, тем большим является резерв (запас) включения интервала \mathbf{a} в интервал \mathbf{b} . В многомерном случае, если \mathbf{a} и \mathbf{b} — интервальные векторы, то эту конструкцию можно применить покомпонентно.

Основываясь на сформулированных выше идеях, введем

Определение 3. Для интервальных векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{IR}^n$ резервом интервального включения $\mathbf{a} \subseteq \mathbf{b}$ (или же просто резервом) мы называем наибольшее число $Rsv \in \mathbb{R}$, такое что

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

Отметим, что это определение имеет смысл также при отрицательном Rsv , если все арифметические операции и отношение включения рассматриваются в полной интервальной арифметике Каухера \mathbb{KR} (см. детали в [7]). Если $Rsv < 0$, то $[-Rsv, Rsv]$ — неправильный интервал из \mathbb{KR} и абсолютное значение резерва показывает, насколько сильно в отношении $\mathbf{a} \subseteq \mathbf{b}$ левая часть далека от включения в правую. В целом смысл понятия резерва вполне очевиден из его определения: если рассматриваемое включение истинно, то его “резерв” — это наибольший радиус интервала, на который можно “раздуть” левую часть включения (или сузить правую), чтобы оно еще оставалось истинным. Если же рассматриваемое включение неверно, то мы всегда можем добиться его выполнения, сужая левую часть, хотя для этого может понадобиться перейти к неправильным интервалам. В этом случае резерв превращается в “дефицит включения” и показывает, насколько нужно сузить левую часть, чтобы она стала включаться в правую или, что равносильно, насколько нужно раздуть правую часть, чтобы она поглотила левую.

Выведем аналитическое представление для резерва Rsv . Если \mathbf{a} и \mathbf{b} — одномерные интервалы, для которых $\mathbf{a} \subseteq \mathbf{b}$, то $\underline{\mathbf{a}} \geq \underline{\mathbf{b}}$ и $\bar{\mathbf{a}} \leq \bar{\mathbf{b}}$, так что

$$Rsv = \min \{ \underline{\mathbf{a}} - \underline{\mathbf{b}}, \bar{\mathbf{b}} - \bar{\mathbf{a}} \}. \quad (18)$$

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

$$\text{Rsv} = \min_{1 \leq i \leq n} \min \{ \underline{\mathbf{a}}_i - \underline{\mathbf{b}}_i, \bar{\mathbf{b}}_i - \bar{\mathbf{a}}_i \}. \quad (19)$$

Выражения (18) и (19) не очень удобны для исследования, поскольку дают представление для резерва через концы интервалов, тогда как в определении резерва раздутье и сужение интервалов \mathbf{a} и \mathbf{b} выполняются симметрично относительно их середин. Как следствие, желательно иметь альтернативное представление резерва включения через середины и радиусы интервалов.

Имеем

$$\begin{aligned} \min \{ \underline{\mathbf{a}} - \underline{\mathbf{b}}, \bar{\mathbf{b}} - \bar{\mathbf{a}} \} &= \min \{ \underline{\mathbf{a}} - \text{mid } \mathbf{b} + \text{rad } \mathbf{b}, \text{mid } \mathbf{b} + \text{rad } \mathbf{b} - \bar{\mathbf{a}} \} = \\ &= \text{rad } \mathbf{b} + \min \{ \underline{\mathbf{a}} - \text{mid } \mathbf{b}, \text{mid } \mathbf{b} - \bar{\mathbf{a}} \} = \\ &= \text{rad } \mathbf{b} - \max \{ \text{mid } \mathbf{b} - \underline{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{a}} - \text{mid } \mathbf{b} \} = \\ &= \text{rad } \mathbf{b} - |\mathbf{a} - \text{mid } \mathbf{b}| = \text{rad } \mathbf{b} - |\text{mid } \mathbf{b} - \mathbf{a}|, \end{aligned}$$

где использовано представление модуля интервала в виде $|\mathbf{a}| = \max \{ -\underline{\mathbf{a}}, \bar{\mathbf{a}} \}$ (см. [7]). Соответственно, для многомерного случая вместо (19) получаем следующее выражение для резерва включения:

$$\text{Rsv} = \min_{1 \leq i \leq n} \{ \text{rad } \mathbf{b}_i - |\text{mid } \mathbf{b}_i - \mathbf{a}_i| \}.$$

Отталкиваясь от полученного выражения, можем переписать критерий (17) принадлежности точки допусковому множеству решений в следующем виде. Точка $\tilde{\beta} = (\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_l)^\top$ принадлежит допусковому множеству решений интервальной системы уравнений (9) тогда и только тогда, когда

$$\min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - f(\mathbf{X}_{i:}, \tilde{\beta}) \right| \right\} \geq 0.$$

С другой стороны, даже отрицательные значения выражения в левой части имеют смысл, так как они показывают “дефицит совместности” системы в точке $\tilde{\beta}$.

В силу сказанного будет удобно ввести специальную функцию

$$\text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - f(\mathbf{X}_{i:}, \beta) \right| \right\}, \quad (20)$$

которая знаком и величиной своих значений показывает совместность или несовместность точки $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l)^\top$ с данными, \mathbf{X} и \mathbf{y} , задачи восстановления зависимости и дает количественную меру этой совместности. Будем называть функцию $\text{Tol} : \mathbb{R}^l \times \mathbb{IR}^{n \times m} \times \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{R}$, задаваемую посредством (20), *распознающим функционалом* допускового множества решений Ξ_{tol} интервальной системы уравнений (9). Он обладает следующим основным свойством:

$$\text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y}) \geq 0 \iff \beta \in \Xi_{tol},$$

т. е. знаком своих значений “распознает” принадлежность точки множеству решений.

Отметим, что описанные выше конструкции ранее были детально разработаны для линейного случая, когда восстанавливаемая функция имеет вид (7) и мы должны решать интервальную линейную систему вида (10)–(11). Распознающий функционал для линейного случая имеет вид (см. [7, 11, 14])

$$\text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - \sum_{j=1}^m \mathbf{x}_{ij} \beta_j \right| \right\}, \quad (21)$$

т. е. является специальным случаем функционала (20). Он обладает хорошими свойствами, в частности, является вогнутой функцией.

2.3. Метод максимума совместности

Метод максимума совместности — это метод нахождения оценок параметров функциональной зависимости по интервальным данным, основанный на нахождении точки, обеспечивающей наибольшее значение совместности. Он опирается на нахождение безусловного максимума (на всем пространстве \mathbb{R}^l) распознающего функционала Tol .

Опираясь на вид восстанавливаемой зависимости (6) и интервальные данные (8), организуем интервальную систему уравнений (9)

$$\begin{cases} f(\mathbf{X}_{i:}, \beta) = \mathbf{y}_i, \\ i = 1, 2, \dots, n, \end{cases}$$

где $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_{ij})$ — $n \times m$ -матрица интервалов независимых переменных, \mathbf{y}_i — интервалы значений функции, $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_l)^\top$ — вектор параметров функции (6). Организуем распознающий функционал $\text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y})$ вида (20) для допускового множества решений этой интервальной системы уравнений. Решая задачу безусловной максимизации распознающего функционала, естественно приходим к методу оценивания параметров, который и будем называть методом максимума совместности:

Оценкой параметров берем точку $\text{argmax } \text{Tol}$, в которой достигается наибольшее значение распознающего функционала Tol .

В силу теории, изложенной в предшествующем разделе, найденная точка в самом деле доставляет максимум совместности системе уравнений (9). Более точно:

- если $\max \text{Tol} \geq 0$, то эта точка лежит в непустом множестве параметров, сильно совместных с данными;
- если $\max \text{Tol} < 0$, то множество параметров, сильно совместных с данными, пусто, но в этой точке минимизируется “несовместность” параметров и данных.

3. Восстановление дробно-линейной функции

Выше мы изложили метод максимума совместности для решения задачи восстановления зависимостей в общем виде для произвольных нелинейных функций. Здесь детально рассмотрим конкретизацию метода максимума совместности для восстановления дробно-линейной функции по интервальным данным.

3.1. Постановка задачи

Для описания зависимости дифференциального выхода по току $W(t)$ от времени t в электрохимическом процессе осаждения металлов ранее была предложена [16] дробно-линейная функция

$$W(t) = \frac{at + b}{ct + d} \quad (22)$$

с положительными параметрами a, b, c и d . Необходимо найти эти параметры по ряду измерений значений W_i функции $W(t)$ в заданные моменты времени $t_i, i = 1, 2, \dots, n$. При этом измерения значений функции сопровождаются погрешностями, для которых известна только их максимальная абсолютная величина $\Delta = 0.0175$. Таким образом, можно рассматривать получаемые значения W_i как интервальные, обозначая их $\mathbf{W}_i = [W_i - \Delta, W_i + \Delta], i = 1, 2, \dots, n$.

Более сложная ситуация связана с неточным заданием самих моментов времени t_i , которые также могут иметь интервальную неопределенность. В этом случае нужно найти параметры a, b, c и d по набору данных $(\mathbf{t}_i, \mathbf{W}_i), i = 1, 2, \dots, n$.

Количество параметров в выражении (22) можно, очевидно, уменьшить до трех, поделив числитель и знаменатель на какой-то из ненулевых параметров. Будем считать таким ненулевым параметром c , поскольку при его занувлении дробно-линейная специфика функции исчезает и она становится просто линейной. Иными словами, условие $c \neq 0$ требуется по существу рассмотрения дробно-линейной функции. Итак, будем восстанавливать далее функциональную зависимость вида

$$W(t) = \frac{at + b}{t + d}, \quad (23)$$

зависящую от трех параметров a, b, d .

Метод максимума совместности, который мы применяем для решения поставленной задачи, требует исследования множества решений интервальной системы уравнений, построенной по обрабатываемым данным и восстанавливаемой зависимости. В нашем случае она имеет вид

$$\begin{cases} \frac{at_i + b}{t_i + d} = \mathbf{W}_i, \\ i = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (24)$$

В слабой версии метода максимума совместности оценки параметров берутся из объединенного множества решений этой интервальной системы, т. е. множества

$$\Xi_{uni} = \left\{ (a, b, d) \in \mathbb{R}^3 \mid (\exists t_i \in \mathbf{t}_i)(\exists W_i \in \mathbf{W}_i) \left(\frac{at_i + b}{t_i + d} = W_i \right), i = 1, 2, \dots, n \right\}, \quad (25)$$

а в сильной версии — из допускового множества решений

$$\Xi_{tol} = \left\{ (a, b, d) \in \mathbb{R}^3 \mid (\forall t_i \in \mathbf{t}_i)(\exists W_i \in \mathbf{W}_i) \left(\frac{at_i + b}{t_i + d} = W_i \right), i = 1, 2, \dots, n \right\}. \quad (26)$$

Для случая точного (неинтервального) задания моментов времени t_i , когда интервалы \mathbf{t}_i стягиваются в точки, интервальная система уравнений (24) принимает упрощенный вид

$$\begin{cases} \frac{at_i + b}{t_i + d} = \mathbf{W}_i, \\ i = 1, 2, \dots, n, \end{cases} \quad (27)$$

а ее объединенное и допусковое множества решений, т. е. множества (25) и (26), совпадают друг с другом. Но если интервальная неопределенность присутствует также в значениях t_i , то объединенное множество решений и допусковое множество решений отличаются друг от друга и аналогично отличаются друг от друга результаты применения слабой и сильной версий метода максимума совместности. Далее для случая интервальных t_i применим сильную версию метода максимума совместности, обладающую лучшими свойствами и меньшей трудоемкостью получения оценки (см. подразд. 3.2 и 3.3).

3.2. Свойства распознающего функционала

Для выбора подходящих численных методов и эффективного нахождения максимума распознающего функционала и нужно исследовать его свойства. Рассмотрим сначала упрощенную ситуацию, когда моменты времени t_i задаются точно. Распознающий функционал множества решений (допускового или объединенного) для интервальной системы уравнений (27) в соответствии с теорией, изложенной в разд. 2, имеет вид

$$\text{Tol}((a, b, d)^\top) = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{W}_i - \left| \text{mid } \mathbf{W}_i - \frac{at_i + b}{t_i + d} \right| \right\}. \quad (28)$$

Оценка параметров a, b и d функции (22) по методу максимума совместности получается как аргумент безусловного максимума этого распознающего функционала.

Трудоемкость решения задачи оптимизации существенно зависит от “рельефа” графика целевой функции и от того, сколько у нее локальных экстремумов и как они соотносятся друг с другом. Если какая-либо функция имеет кроме глобального экстремума еще и отличные от него локальные экстремумы, то нахождение глобального оптимума в этом случае, как правило, сильно затрудняется. Большое количество численных методов оптимизации предназначены для поиска только локальных экстремумов и фактически должны опираться на информацию о том, что локальные экстремумы являются одновременно и глобальными. Функции одного вещественного аргумента, обладающие этим свойством, называются, как известно, *унимодальными* (этот термин происходит из статистики). В многомерном случае понятие унимодальности почти не применяется, но существуют другие равнозначные ему понятия, одним из которых мы и воспользуемся.

Напомним

Определение 4. Множество $S \subseteq \mathbb{R}^l$ называется *выпуклым*, если одновременно с любыми двумя своими точками содержит отрезок прямой, который их соединяет. Иными словами, множество $S \subseteq \mathbb{R}^l$ называется *выпуклым*, если для любых $x, y \in S$ и любого $\lambda \in [0, 1]$ точка $\lambda x + (1 - \lambda)y$ также лежит в S .

Определение 5. Пусть S — выпуклое множество в \mathbb{R}^l . Функция $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ называется *квазивогнутой*, если для любых $x, y \in S$ и $\lambda \in [0, 1]$ выполняется неравенство

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \min\{f(x), f(y)\}.$$

Квазивогнутые функции являются дальнейшим обобщением вогнутых функций. В частности, если функция вогнута, т. е. если

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \quad \text{для } \lambda \in [0, 1],$$

то она также квазивогнута, поскольку $\min\{f(x), f(y)\} \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$.

Одним из полезных свойств квазивогнутых функций является тот факт, что поточечный минимум набора квазивогнутых функций — тоже квазивогнутая функция. Далее нам потребуется свойство квазивогнутых функций, эквивалентное их определению и основанное на понятии лебеговых множеств. Напомним, что для вещественного числа α лебеговыми множествами функции f , соответствующими уровню α , называют множества вида $\{x \mid f(x) \geq \alpha\}$ и $\{x \mid f(x) \leq \alpha\}$. Справедливо

Свойство (см. [21]). Функция $f(x) : \mathbb{R}^l \supseteq S \rightarrow \mathbb{R}$, заданная на выпуклом множестве S , является квазивогнутой функцией тогда и только тогда, когда ее лебеговы множества $f_\alpha = \{x \in S \mid f(x) \geq \alpha\}$ — выпуклые для любого $\alpha \in \mathbb{R}$.

Предложение 1. Распознающий функционал $\text{Tol}(a, b, d)$, задаваемый с помощью выражения (28), является квазивогнутой функцией переменной $(a, b, d)^\top \in \mathbb{R}^3$ в полу-пространстве $d \geq 0$.

Доказательство. Покажем, что для любого вещественного числа α лебегово множество уровня α функционала Tol является выпуклым.

Выражение (28) для распознающего функционала имеет специфический вид: его значение формируется как минимум значений семейства n однотипных выражений, которые стоят внутри фигурных скобок в (28). Будем называть их *образующими* распознающего функционала. Если $\text{Tol}(a, b, d) \geq \alpha$, то

$$\text{rad } \mathbf{W}_i - \left| \text{mid } \mathbf{W}_i - \frac{at_i + b}{t_i + d} \right| \geq \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

что равнозначно

$$\left| \text{mid } \mathbf{W}_i - \frac{at_i + b}{t_i + d} \right| \leq \text{rad } \mathbf{W}_i - \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Раскрывая модуль, получим

$$-\text{rad } \mathbf{W}_i + \alpha \leq \text{mid } \mathbf{W}_i - \frac{at_i + b}{t_i + d} \leq \text{rad } \mathbf{W}_i - \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

т. е.

$$\text{mid } \mathbf{W}_i - \text{rad } \mathbf{W}_i + \alpha \leq \frac{at_i + b}{t_i + d} \leq \text{mid } \mathbf{W}_i + \text{rad } \mathbf{W}_i - \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Учитывая, что

$$\text{mid } \mathbf{W}_i - \text{rad } \mathbf{W}_i = \underline{\mathbf{W}}_i \quad \text{и} \quad \text{mid } \mathbf{W}_i + \text{rad } \mathbf{W}_i = \overline{\mathbf{W}}_i,$$

в качестве промежуточного итога получаем

$$\underline{\mathbf{W}}_i + \alpha \leq \frac{at_i + b}{t_i + d} \leq \overline{\mathbf{W}}_i - \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (29)$$

Вспомним, что по условию задачи параметр d положителен. Моменты времени t_i — числа также положительные, так что все $t_i + d > 0$. Как следствие, можем умножить обе части i -го двойного неравенства (29) на $t_i + d$, и смысл неравенств при этом сохранится:

$$(\underline{\mathbf{W}}_i + \alpha)(t_i + d) \leq at_i + b \leq (\overline{\mathbf{W}}_i - \alpha)(t_i + d), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

После преобразований будем окончательно иметь

$$\begin{cases} d \geq 0, \\ t_i a + b - (\bar{\mathbf{W}}_i - \alpha)d \leq (\bar{\mathbf{W}}_i - \alpha)t_i, \\ t_i a + b - (\underline{\mathbf{W}}_i + \alpha)d \geq (\underline{\mathbf{W}}_i + \alpha)t_i, \\ i = 1, 2, \dots, n, \end{cases}$$

Полученная система линейных алгебраических неравенств относительно переменных a, b и d задает в пространстве \mathbb{R}^3 пересечение $2n + 1$ замкнутых полупространств, т. е. выпуклое многогранное множество. В силу приведенного выше свойства мы доказали квазивогнутость распознающего функционала. ■

Рассмотрим теперь общий случай, когда моменты времени t_i , в которые проводятся измерения, неточны и сами имеют интервальную неопределенность. Иными словами, заданы интервалы $\mathbf{t}_i, i = 1, 2, \dots, n$, и теперь нужно рассматривать допусковое множество решений интервальной системы уравнений (24) и его распознающий функционал вида (20). При этом для вычисления значений функционала мы должны точно оценивать область значений отображения f из (20), которое в нашем конкретном случае является функцией $W(t)$ аргумента t и имеет вид (23).

Чтобы получить с помощью интервальной техники точную область значений для функции (22), т. е.

$$W(t) = \frac{at + b}{t + d}$$

на интервале $t \in \mathbf{t}_i$, можно использовать простой трюк. Выполним преобразования:

$$\frac{at + b}{t + d} = \frac{(at + ad) - (ad - b)}{t + d} = a - \frac{ad - b}{t + d}. \quad (30)$$

Полученное выражение содержит лишь одно вхождение переменной t , а потому его естественное интервальное расширение по $t \in \mathbf{t}_i$ совпадает с точной областью значений. Как следствие, распознающий функционал допускового множества решений интервальной системы уравнений (24) можно взять в следующем виде, удобном для вычислений:

$$\text{Tol}(a, b, d) = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{W}_i - \left| \text{mid } \mathbf{W}_i + \frac{ad - b}{\mathbf{t}_i + d} - a \right| \right\}. \quad (31)$$

Предложение 2. Распознающий функционал $\text{Tol}(a, b, d)$, задаваемый с помощью (31), является квазивогнутой функцией переменной (a, b, d) в полупространстве \mathbb{R}^3 , задаваемом неравенством $d \geq 0$.

Доказательство. Снова будем опираться на приведенное выше свойство и покажем, что для любого вещественного числа α лебегово множество уровня α функционала Tol является выпуклым.

Если $\text{Tol}(a, b, d) \geq \alpha$, то

$$\text{rad } \mathbf{W}_i - \left| \text{mid } \mathbf{W}_i + \frac{ad - b}{\mathbf{t}_i + d} - a \right| \geq \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

что равнозначно

$$\left| \text{mid } \mathbf{W}_i + \frac{ad - b}{\mathbf{t}_i + d} - a \right| \leq \text{rad } \mathbf{W}_i - \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (32)$$

Вспомнив, что модуль интервала определяется как

$$|\mathbf{a}| = \max\{|\underline{\mathbf{a}}|, |\bar{\mathbf{a}}|\},$$

можем переписать систему неравенств (32) в виде

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \text{mid } \mathbf{W}_i + \frac{ad - b}{\underline{\mathbf{t}}_i + d} - a \right| \leq \text{rad } \mathbf{W}_i - \alpha, \\ \left| \text{mid } \mathbf{W}_i + \frac{ad - b}{\bar{\mathbf{t}}_i + d} - a \right| \leq \text{rad } \mathbf{W}_i - \alpha, \\ i = 1, 2, \dots, n. \end{array} \right.$$

Каждое отдельное неравенство в полученной системе далее рассматривается аналогично тому, как это сделано в доказательстве предложения 1, поскольку теперь интервальности в них нет. Снова решением этой системы неравенств относительно a, b и d получаем пересечение полупространств в \mathbb{R}^3 , т. е. выпуклое многогранное множество. ■

На практике измерения, выполненные в разные моменты времени, могут оказаться неравноценными, так как условия их выполнения не вполне одинаковы и т. п. Для учета этого обстоятельства можно ввести вектор положительных весовых множителей $w = (w_1, w_2, \dots, w_n)^\top$, с помощью которого выражение для распознающего функционала (31) получит вид

$$\text{Tol}(a, b, d) = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ w_i \left(\text{rad } \mathbf{W}_i - \left| \text{mid } \mathbf{W}_i + \frac{ad - b}{\mathbf{t}_i + d} - a \right| \right) \right\}. \quad (33)$$

3.3. Реализация и результаты

Из доказанной выше квазивогнутости функционала Tol следует, что восстановление параметров искомой дробно-линейной зависимости, как аргумента максимума распознающего функционала, выполняется без больших трудностей. Квазивогнутая функция не может иметь более одного локального максимума, хотя он может достигаться на “плато”, т. е. множестве аргументов с ненулевой мерой. Для численного отыскания этого максимума могут быть применены развитые методы негладкой выпуклой оптимизации (см., к примеру, [22]).

Ранее первым автором для систем компьютерной математики Scilab, MATLAB и Octave была реализована программа `tolsoolv` [23], вычисляющая максимум распознающего функционала (21) допускового множества решений для интервальных линейных систем уравнений. Мы адаптировали ее для нахождения максимума распознающего функционала допускового множества решений (26) для интервальной системы уравнений (24), соответствующей дробно-линейным зависимостям. Кроме того, программа была переписана на языке программирования Python и вошла составной частью в популярную библиотеку интервальных вычислений IntvalPy [24]. С помощью новой программы были найдены оценки коэффициентов a, b и d в дробно-линейной функции (23) для ряда практических задач.

В табл. 1 представлен листинг наиболее важной части нашей программы — функции `calcfg` для вычисления значений максимизируемого распознающего функционала

(обозначено идентификатором f) и его суперградиента (обозначено идентификатором g). Для удобства программирования вектор аргументов распознающего функционала, т. е. $(a, b, d)^\top$, обозначен посредством \mathbf{x} , так что $\mathbf{x} = (\mathbf{x}[0], \mathbf{x}[1], \mathbf{x}[2])^\top$. Предполагается, что к моменту вызова этой программы определены переменные \mathbf{t} , \mathbf{Wc} и \mathbf{Wr} , обозначающие соответственно интервальный вектор \mathbf{t} моментов времени, вектор середин и вектор радиусов для интервального вектора \mathbf{W} результатов измерений функции. Кроме того, должна быть задана переменная \mathbf{weight} — вектор весовых коэффициентов для образующих распознающего функционала из выражения (33).

Помимо значений f и g функция `calcfg` вычисляет также вектор \mathbf{cn} из значений образующих распознающего функционала в найденной точке аргумента максимума. Вектор \mathbf{cn} может оказаться полезным при более глубоком анализе результатов обработки данных на предмет выявления “аномальных” измерений, которые являются выбросами (промахами). Наконец, стоит пояснить, что в строках 17 и 19 применяется операция “ \sim ”, заменяющая в булевом векторе `index` нули на единицы и наоборот.

Опишем теперь результаты расчетов по восстановлению дробно-линейной зависимости для одного электрохимического эксперимента, выполненного в Институте высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук. Исходные числовые данные этого эксперимента сведены в табл. 2, причем значения функции W рассматриваются как базовые, вокруг которых далее строятся, как вокруг центров, интервалы с радиусом $\Delta = 0.0175$. Исходная выборка содержала 63 измерения, но на этапе предобработки 11 из них были определены как “возможные выбросы” и удалены из выборки.

Для интервальных данных, полученных на основе табл. 2, была выполнена аппроксимация с помощью функции вида (23), т. е.

$$W(t) = \frac{at + b}{t + d}.$$

Т а б л и ц а 1. Процедура-функция для вычисления значений распознающего функционала и его суперградиента

Table 1. The function for computing the values of the recognizing functional and its supergradient

```

1  def calcfg():
2      index = x >= 0
3      Wcm = Wc - (x[0]*t + x[1]) / (t + x[2])
4      inf_s, sup_s = Wcm.inf, Wcm.sup
5      cn = weight*(Wr - np.maximum(abs(inf_s), abs(sup_s)))
6      mc = np.argmin(cn)
7
8      tmc = t[mc]
9      dx1 = 1 / (tmc + x[2])
10     dx2 = tmc / (tmc + x[2])
11     dx3 = -(x[0]*tmc + x[1]) / (tmc + x[2])**2
12     infg = np.array([dx1.inf, dx2.inf, dx3.inf])
13     supg = np.array([dx1.sup, dx2.sup, dx3.sup])
14
15     f = cn[mc]
16     if -inf_s[mc] <= sup_s[mc]:
17         g = weight[mc]*(infg*index + supg*(~index))
18     else:
19         g = -weight[mc]*(supg*index + infg*(~index))
20     return f, g

```

Т а б л и ц а 2. Данные измерений параметров электрохимического эксперимента
Table 2. Measurement data of electrochemical experiment parameters

№	t	W	№	t	W
1	0.7	0.79018	27	13.683	0.89509
2	1.2333	0.80252	28	14.25	0.90126
3	2.05	0.81349	29	14.8	0.89827
4	2.7333	0.82331	30	15.833	0.90408
5	3.3333	0.82331	31	16.35	0.89170
6	3.7	0.84740	32	17.017	0.91607
7	4.2833	0.84740	33	17.6	0.90408
8	4.6833	0.86012	34	18.283	0.91812
9	5.0667	0.85404	35	18.833	0.89827
10	5.4667	0.86012	36	19.533	0.92007
11	5.8833	0.86571	37	20.3	0.92702
12	6.25	0.84740	38	21.083	0.92857
13	7.15	0.87088	39	21.767	0.91812
14	7.55	0.86012	40	22.45	0.91812
15	8	0.87566	41	23.233	0.92857
16	8.3833	0.85404	42	24.017	0.92857
17	8.8	0.86571	43	24.85	0.93286
18	9.25	0.87566	44	25.767	0.93896
19	9.7	0.87566	45	26.683	0.93896
20	10.15	0.87566	46	27.667	0.94318
21	10.633	0.88424	47	28.717	0.94671
22	11.15	0.89170	48	29.567	0.93417
23	11.65	0.88809	49	30.75	0.95272
24	12.083	0.87088	50	31.983	0.95463
25	12.683	0.90674	51	37.267	0.96891
26	13.15	0.88010	52	45.617	0.98002

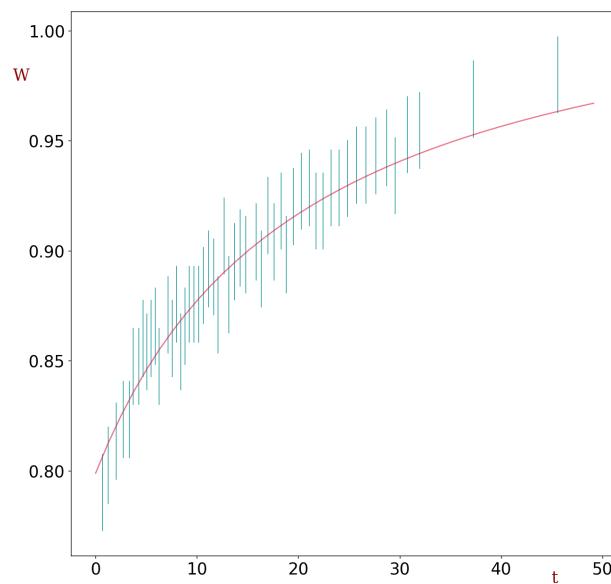


Рис. 4. Отрезки неопределенности и график функции $W(t)$, соответствующей максимуму совместности

Fig. 4. Uncertainty segments and graph of the function $W(t)$, corresponding to the maximum compatibility

Фактически функция этого вида приближалась на временном интервале $t \in [0, 50]$. Параметры искомой функции были найдены методом максимума совместности с помощью модифицированной версии программы `tolstolv`, которая дала значения параметров $a = 16.237$, $b = 1.0366$ и $d = 20.323$. Таким образом, искомая зависимость получает вид

$$W(t) = \frac{16.237t + 1.0366}{t + 20.323}. \quad (34)$$

Максимальное значение распознающего функционала, т. е., иными словами, мера совместности исходных интервальных данных задачи и построенной функциональной зависимости (34), равна

$$\text{Tol}((16.237, 1.0366, 20.323)^\top) = 0.0008275.$$

Она положительна, так что допусковое множество решений (26) непусто, а найденная оценка параметров $(a, b, d)^\top$ лежит в нем и сильно совместна с данными.

4. Обобщения

Рассмотрим обобщение развитой выше техники восстановления функциональных зависимостей на дробно-линейные функции произвольного числа переменных, имеющие вид

$$y = y(x_1, x_2, \dots, x_m) = \frac{a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_mx_m + b}{c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_mx_m + d}, \quad (35)$$

где x_1, x_2, \dots, x_m — независимые переменные.

Пусть дан ряд измеренных значений x_1, x_2, \dots, x_m и y , имеющих интервальную неопределенность, т. е.

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}_{11}, \quad \mathbf{x}_{12}, \quad \dots, \quad \mathbf{x}_{1m}, \quad \mathbf{y}_1, \\ & \mathbf{x}_{21}, \quad \mathbf{x}_{22}, \quad \dots, \quad \mathbf{x}_{2m}, \quad \mathbf{y}_2, \\ & \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \quad \vdots \\ & \mathbf{x}_{n1}, \quad \mathbf{x}_{n2}, \quad \dots, \quad \mathbf{x}_{nm}, \quad \mathbf{y}_n, \end{aligned} \quad (36)$$

причем результаты i -го измерения суть $\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}, \mathbf{y}_i$. Требуется найти значения параметров $a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d$, при которых функция (35) наилучшим образом приближает данные (36). Как и ранее, исследуем сначала частный случай задачи, когда значения независимых переменных x_1, x_2, \dots, x_m задаются точно и интервальная неопределенность присутствует только в значениях y .

В соответствии с теорией, развитой в подразд. 2.2 и 2.3, распознающий функционал допускового множества решений интервальной системы уравнений (9), которая должна решаться для определения параметров функции (35), выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{Tol}(a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d) &= \\ &= \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - \frac{a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_mx_m + b}{c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_mx_m + d} \right| \right\}. \end{aligned} \quad (37)$$

Оценки параметров $a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d$ функции (35) по методу максимума совместности получаются как аргументы безусловного максимума этого распознающего функционала.

Предложение 3. Распознающий функционал $\text{Tol} : \mathbb{R}^{2m+2} \rightarrow \mathbb{R}$, задаваемый посредством (37), является квазивогнутой функцией переменной $(a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d)$ на любом выпуклом множестве из \mathbb{R}^{2m+2} , на котором знаменатель выражения (35) не обращается в нуль.

Доказательство. Оно фактически повторяет доказательство предложения 1 с той лишь разницей, что тогда знаменатель дроби предполагался положительным, а сейчас он может быть и отрицательным. ■

Перейдем теперь к общей ситуации, когда значения независимых переменных также имеют интервальную неопределенность. Согласно теории, изложенной в разд. 2, распознающий функционал допускового множества решений интервальной системы уравнений (9) должен иметь в этом случае вид

$$\text{Tol}(a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d) = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - y(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im}) \right| \right\}, \quad (38)$$

где $y(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im})$ — область значений дробно-линейной функции (35) на брусе $(\mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{im})$. Ее нахождение представляет основную трудность при работе с этим распознающим функционалом, так как воспользоваться трюком (30) с преобразованием дробно-линейного выражения к единственному вхождению переменной мы уже не можем. Тем не менее другие средства приводят к успеху и в этом случае.

Задача вычисления оптимальной интервальной оценки области значений дробно-линейной функции вида (35) решена в работе [25], где построен алгоритм, имеющий квадратичную по числу переменных трудоемкость. Его можно применить для вычисления распознающего функционала (38).

Если количество m переменных невелико, то для нахождения области значений выражения (35) можно воспользоваться следующими простыми соображениями. Рассмотрим производную дробно-линейной функции одной переменной x :

$$\left(\frac{ax + b}{cx + d} \right)' = \frac{a(cx + d) - (ax + b)c}{(cx + d)^2} = \frac{ad - bc}{(cx + d)^2}.$$

Всюду для тех аргументов x , где знаменатель не зануляется, т. е. $cx + d \neq 0$, дробно-линейная функция имеет производную одного знака, совпадающую со знаком выражения $ad - bc$. Им определяется характер возрастания или убывания функции.² Если $ad - bc = 0$, то производная зануляется и рассматриваемая функция является константой. В любом случае минимум и максимум дробно-линейной функции одной переменной достигаются на концах интервала области определения.

Далее, для отыскания минимума общего дробно-линейного выражения (35) (для максимума рассуждения аналогичны) можно использовать то обстоятельство, что нахождение минимума по совокупности переменных сводится к последовательному нахождению минимумов по отдельным переменным:

$$\min_{x_1 \in \mathbf{x}_{i1}, \dots, x_m \in \mathbf{x}_{im}} y(x_1, x_2, \dots, x_m) = \min_{x_1 \in \mathbf{x}_{i1}} \min_{x_2 \in \mathbf{x}_{i2}} \dots \min_{x_m \in \mathbf{x}_{im}} y(x_1, x_2, \dots, x_m).$$

Каждый из выписанных экстремумов достигается на концах соответствующего интервала, т. е.

$$\min_{x_1 \in \mathbf{x}_{i1}, \dots, x_n \in \mathbf{x}_{im}} y(x_1, x_2, \dots, x_m) = \min_{x_1 \in \{\mathbf{x}_{i1}, \bar{\mathbf{x}}_{i1}\}} \min_{x_2 \in \{\mathbf{x}_{i2}, \bar{\mathbf{x}}_{i2}\}} \dots \min_{x_n \in \{\mathbf{x}_{im}, \bar{\mathbf{x}}_{im}\}} y(x_1, x_2, \dots, x_m). \quad (39)$$

²Напомним, что дробно-линейная функция рассматриваемого нами вида (22) при условии $ad - bc \neq 0$ называется *невырожденной*; см., к примеру, [26].

Поэтому общий минимум можно найти, перебрав все 2^m вершин бруса области определения $(\underline{\mathbf{x}}_{i1}, \underline{\mathbf{x}}_{i2}, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{im})$. Аналогично с максимумом выражения (22).

Предложение 4. Распознающий функционал $\text{Tol} : \mathbb{R}^{2m+2} \rightarrow \mathbb{R}$, задаваемый посредством (38), является квазивогнутой функцией переменной $(a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d)$ на любом выпуклом множестве, где знаменатель не обращается в нуль.

Доказательство. В силу представления (39) распознающий функционал (38) является нижней огибающей конечного семейства функционалов вида (37). Более точно, в силу определения модуля интервала

$$\begin{aligned} \text{Tol}(a_1, a_2, \dots, a_m, b, c_1, c_2, \dots, c_m, d) &= \\ &= \min_{1 \leq i \leq n} \min_{x_1 \in \{\underline{\mathbf{x}}_{i1}, \bar{\mathbf{x}}_{i1}\}} \dots \min_{x_n \in \{\underline{\mathbf{x}}_{im}, \bar{\mathbf{x}}_{im}\}} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - \frac{a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_m x_m + b}{c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_m x_m + d} \right| \right\} = \\ &= \min_{\substack{x_1 \in \{\underline{\mathbf{x}}_{i1}, \bar{\mathbf{x}}_{i1}\} \\ 1 \leq i \leq n}} \dots \min_{\substack{x_n \in \{\underline{\mathbf{x}}_{im}, \bar{\mathbf{x}}_{im}\} \\ 1 \leq i \leq n}} \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - \frac{a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_m x_m + b}{c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_m x_m + d} \right| \right\}. \end{aligned}$$

В предложении 3 обоснована квазивогнутость функций вида

$$\min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - \frac{a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_m x_m + b}{c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_m x_m + d} \right| \right\}.$$

Следовательно, их минимум по всем $x_1 \in \{\underline{\mathbf{x}}_{i1}, \bar{\mathbf{x}}_{i1}\}, \dots, x_n \in \{\underline{\mathbf{x}}_{im}, \bar{\mathbf{x}}_{im}\}$, $i = 1, 2, \dots, n$, т. е. нижняя огибающая, также квазивогнута. \blacksquare

Выводы

Главные итоги нашей работы таковы:

- ✓ Разработана теоретическая схема метода максимума совместности (сильная версия) для восстановления нелинейных функциональных зависимостей.
- ✓ Доказана квазивогнутость распознающего функционала допускового множества решений для случая восстановления дробно-линейной функции, что дает возможность эффективно находить максимум функционала и быть уверенным в однозначности ответа.
- ✓ Программа `tolsolvty` для нахождения максимума распознающего функционала допускового множества решений для интервальных линейных систем была модифицирована под дробно-линейную задачу.
- ✓ Для конкретных данных электрохимического эксперимента найдены параметры дробно-линейной функции, при которых эта функциональная зависимость обеспечивает наилучшую аппроксимацию.

Список литературы

- [1] Вапник В.Н. Восстановление зависимостей по эмпирическим данным. М.: Наука; 1979: 448.
- [2] Демидович Б.П., Марон И.А., Шувалова Э.З. Численные методы анализа. М.: Наука; 1967: 368.
- [3] Скарборо Дж. Численные методы математического анализа. М.-Л.: ГТТИ; 1934: 440.

- [4] **Уиттекер Э., Робинсон Г.** Математическая обработка результатов наблюдений. М.: ГТТИ; 1933: 364.
- [5] **Дрейпер Н., Смит Г.** Прикладной регрессионный анализ. М.: Диалектика; 2016: 912.
- [6] **Канторович Л.В.** О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений. Сибирский математический журнал. 1962; 3(5):701–709.
- [7] **Шарый С.П.** Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: XYZ; 2023: 660. Адрес доступа: <http://www.nsc.ru/interval/?page=Library/InteBooks>.
- [8] **Moore R.E., Kearfott R.B., Cloud M.** Introduction to interval analysis. Philadelphia: SIAM; 2009: 223.
- [9] **Neumaier A.** Interval methods for systems of equations. Cambridge: Cambridge University Press; 1990: 255.
- [10] **Шарый С.П.** Разрешимость интервальных линейных уравнений и анализ данных с неопределенностями. Автоматика и телемеханика. 2012; (2):111–125.
- [11] **Шарый С.П.** Сильная согласованность в задаче восстановления зависимостей при интервальной неопределенности данных. Вычислительные технологии. 2017; 22(2):150–172.
- [12] **Шарый С.П., Шарай И.А.** Распознавание разрешимости интервальных уравнений и его приложения к анализу данных. Вычислительные технологии. 2013; 18(3):80–109.
- [13] **Шарый С.П.** Метод максимума согласования для восстановления зависимостей по данным с интервальной неопределенностью. Известия РАН. Теория и системы управления. 2017; (6):3–19.
- [14] **Shary S.P.** Weak and strong compatibility in data fitting problems under interval uncertainty. Advances in Data Science and Adaptive Analysis. 2020; 12(1):2050002. DOI:10.1142/S2424922X20500023.
- [15] **Шарый С.П.** Восстановление функциональных зависимостей по данным с интервальной неопределенностью. Информатика и системы управления. 2022; 73(3):130–143. DOI:10.22250/18142400_2022_73_3_130.
- [16] **Ostanina T.N., Rudoi V.M., Patrushev A.V., Darintseva A.B., Farlenkov A.S.** Modelling the dynamic growth of copper and zinc dendritic deposits under the galvanostatic electrolysis conditions. Journal of Electroanalytical Chemistry. 2015; (750):9–18. DOI:10.1016/j.jelechem.2015.04.031.
- [17] **Kumkov S.I., Nikitin V.S., Ostanina T.N., Rudoy V.M.** Interval processing of electrochemical data. Journal of Computational and Applied Mathematics. 2020; (380):112961. DOI:10.1016/j.cam.2020.112961.
- [18] **Баженов А.Н., Жилин С.И., Кумков С.И., Шарый С.П.** Обработка и анализ интервальных данных. М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований; 2024: 355.
- [19] **Kearfott R.B., Nakao M., Neumaier A., Rump S., Shary S.P., van Hentenryck P.** Standardized notation in interval analysis. Computational Technologies. 2010; 15(1):7–13.
- [20] **Шарай И.А., Шарый С.П.** Резерв характеристического включения для интервальных линейных систем отношений. Вычислительные технологии. 2021; 26(3):61–85. DOI:10.25743/ICT.2021.26.3.005.
- [21] **Базара М., Шетти К.** Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. М.: Мир; 1982: 583.
- [22] **Шор Н.З.** Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. Киев: Наукова думка; 1979: 200.
- [23] TOLSOLVITY2. Адрес доступа: https://www.researchgate.net/publication/294889566_TOLSOLVITY2.
- [24] IntvalPy 1.6.2. Адрес доступа: <https://pypi.org/project/intvalpy>.

- [25] **Lea R.N., Kreinovich V., Trejo R.** Optimal interval enclosures for fractionally-linear functions, and their application to intelligent control. *Reliable Computing*. 1996; 2(3):265–285.
- [26] **Бицадзе А.В.** Основы теории аналитических функций комплексного переменного. М.: Наука; 1984: 320.

Constructing linear-fractional functional dependencies based on data with interval uncertainty

S. P. SHARY^{1,*}, E. P. SHASHKINA²

¹Federal Research Center for Information and Computational Technologies, 630090, Novosibirsk, Russia

²Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia

*Corresponding author: Sergey P. Shary, e-mail: shary@ict.nsc.ru

Received October 06, 2022, revised December 07, 2022, accepted January 10, 2023.

Abstract

The paper addresses methods for the solution of curve fitting problem from inaccurate data that have interval uncertainty, i. e. about which it is only known that they belong to some intervals of possible values. Under these conditions, it is necessary to construct a functional dependence from a given class that has the best possible consistency (compatibility) with the interval data. In order to construct the required functional dependence, we develop the maximum compatibility method, in which, to find the parameters of a function, it is required to maximize the so-called recognizing functional of the solution set to an interval system of equations built from interval data and the expression of the constructed function. A strong version of the maximum compatibility method is preferred, as it is more practical and has better theoretical properties. Previously, a strong version of the maximum compatibility method has successfully proven itself in solving data fitting for linear function, from interval data.

In the theoretical part of the paper, a general approach to the nonlinear curve fitting problem is proposed, and then the practically important fractional-linear function is discussed in more detail. It is shown that the recognizing functional of the information set of the problem in this special case is a quasi-concave function, so that its maximum is unique. In addition, the quasi-concavity property radically simplifies the numerical maximization of the recognizing functional. As a practical application, the problem of processing interval measurement data of the electrochemical process of metal deposit formation is solved.

Finally, the paper considers a generalization of the proposed technique for constructing the best fit linear-fractional functions from interval data applied to the case of an arbitrary number of variables. We substantiate the quasi-concavity of the recognizing functional of the information set for the problem arising in this case, which allows applying the developed methods of non-smooth optimization for finding their maximums.

Keywords: data fitting problem, interval uncertainty, linear-fractional function, compatibility of parameters and data, strong compatibility, maximum compatibility method, recognizing functional, quasiconcavity.

Citation: Shary S.P., Shashkina E.P. Constructing linear-fractional functional dependencies based on data with interval uncertainty. *Computational Technologies*. 2024; 29(2):35–61. DOI:10.25743/ICT.2024.29.2.004. (in Russ.)

References

1. **Vapnik V.N.** Estimation of dependences based on empirical data. N.Y.: Springer-Verlag; 1982: 400.
2. **Demidovich B.P., Maron I.A., Shuvalova E.Z.** Chislennye metody analiza [Numerical methods in analysis. Approximation of functions, differential and integral equations]. 3rd ed. Moscow: Nauka; 1967: 368. (In Russ.)
3. **Scarborough J.B.** Numerical mathematical analysis. 3d ed. Baltimore: Johns Hopkins Press; 1955: 554.
4. **Whittaker E.T., Robinson G.** The calculus of observations. A treatise of numerical mathematics. London: Blackie and Son, Ltd.; 1924: 395.
5. **Draper N.R., Smith H.** Applied regression analysis. 3rd ed. N.Y.: John Wiley & Sons; 1998: 716.
6. **Kantorovich L.V.** On some new approaches to computational methods and processing of observation. Siberian Mathematical Journal. 1962; 3(5):701–709. (In Russ.)
7. **Shary S.P.** Finite-dimensional interval analysis. Novosibirsk: XYZ; 2022: 654. (In Russ.) Available at: <http://www.nsc.ru/interval/?page=Library/InteBooks> (accessed February 28, 2024).
8. **Moore R.E., Kearfott R.B., Cloud M.** Introduction to interval analysis. Philadelphia: SIAM; 2009: 223.
9. **Neumaier A.** Interval methods for systems of equations. Cambridge: Cambridge University Press; 1990: 255.
10. **Shary S.P.** Solvability of interval linear equations and data analysis under uncertainty. Automation and Remote Control. 2012; 73(2):310–322. DOI:10.1134/S0005117912020099.
11. **Shary S.P.** Strong compatibility in data fitting problem under interval data uncertainty. Computational Technologies. 2017; 22(2):150–172. (In Russ.)
12. **Shary S.P., Sharaya I.A.** Recognizing solvability of interval equations and its application to data analysis. Computational Technologies. 2013; 18(3):80–109. (In Russ.)
13. **Shary S.P.** Maximum compatibility method for data fitting under interval uncertainty. Journal of Computer and Systems Sciences International. 2017; 56(6):897–913. DOI:10.1134/S1064230717050100.
14. **Shary S.P.** Weak and strong compatibility in data fitting problems under interval uncertainty. Advances in Data Science and Adaptive Analysis. 2020; 12(1):2050002. DOI:10.1142/S2424922X20500023.
15. **Shary S.P.** Curve fitting problem for data with interval uncertainty. Informatics and Control Systems. 2022; 73(3):130–143. DOI:10.22250/18142400_2022_73_3_130. (In Russ.)
16. **Ostanina T.N., Rudoi V.M., Patrushev A.V., Darintseva A.B., Farlenkov A.S.** Modelling the dynamic growth of copper and zinc dendritic deposits under the galvanostatic electrolysis conditions. Journal of Electroanalytical Chemistry. 2015; (750):9–18. DOI:10.1016/j.jelechem.2015.04.031.
17. **Kumkov S.I., Nikitin V.S., Ostanina T.N., Rudoy V.M.** Interval processing of electrochemical data. Journal of Computational and Applied Mathematics. 2020; (380):112961. DOI:10.1016/j.cam.2020.112961.
18. **Bazhenov A.N., Zhilin S.I., Kumkov S.I., Shary S.P.** Processing and analysis of interval data. Moscow; Izhevsk: Institute of Computer Researches; 2024: 355. (In Russ.)
19. **Kearfott R.B., Nakao M., Neumaier A., Rump S., Shary S.P., van Hentenryck P.** Standardized notation in interval analysis. Computational Technologies. 2010; 15(1):7–13.
20. **Sharaya I.A., Shary S.P.** Reserve of characteristic inclusion for interval linear systems of relations. Computational Technologies. 2021; 26(3):61–85. DOI:10.25743/ICT.2021.26.3.005. (In Russ.)
21. **Bazaraa M.S., Sherali H.D., Shetty C.M.** Nonlinear programming. Theory and algorithms. 3rd ed. N.Y.: John Wiley & Sons; 2006: 853.
22. **Shor N.Z.** Minimization methods for non-differentiable functions and applications. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag; 1985: viii+164.
23. TOLSOLVITY2. Available at: https://www.researchgate.net/publication/294889566_TOLSOLVITY2 (accessed February 28, 2024).
24. IntvalPy 1.6.2. Available at: <https://pypi.org/project/intvalpy> (accessed February 28, 2024).
25. **Lea R.N., Kreinovich V., Trejo R.** Optimal interval enclosures for fractionally-linear functions, and their application to intelligent control. Reliable Computing. 1996; 2(3):265–285.
26. **Bitsadze A.V.** Osnovy teorii analiticheskikh funktsiy kompleksnogo peremennogo [Foundations of the theory for analytical functions of a complex variable]. 3rd ed. Moscow: Nauka; 1984: 320. (In Russ.)