

# Меры вариабельности оценок параметров в задачах восстановления зависимостей по интервальным данным

С.П. Шарый

ФИЦ ИВТ и НГУ, Новосибирск, Россия

ММОТИ-2021, 16 ноября 2021 г.

# Введение и постановка задачи

Решаем задачу восстановления зависимостей:

для набора результатов измерений или наблюдений необходимо построить функцию заданного вида, которая «лучше всего подходит» этим данным.

# Введение и постановка задачи

Решаем задачу восстановления зависимостей:

для набора результатов измерений или наблюдений необходимо построить функцию заданного вида, которая «лучше всего подходит» этим данным.

Определить параметры  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$  линейной функции

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n$$

из множества значений независимых переменных  $x_1, x_2, \dots, x_n$  и соответствующих значений зависимой переменной  $y$ .

Как  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , так и  $y$  не известны точно, и ,

в  $i$ -ом измерении мы имеем только интервалы

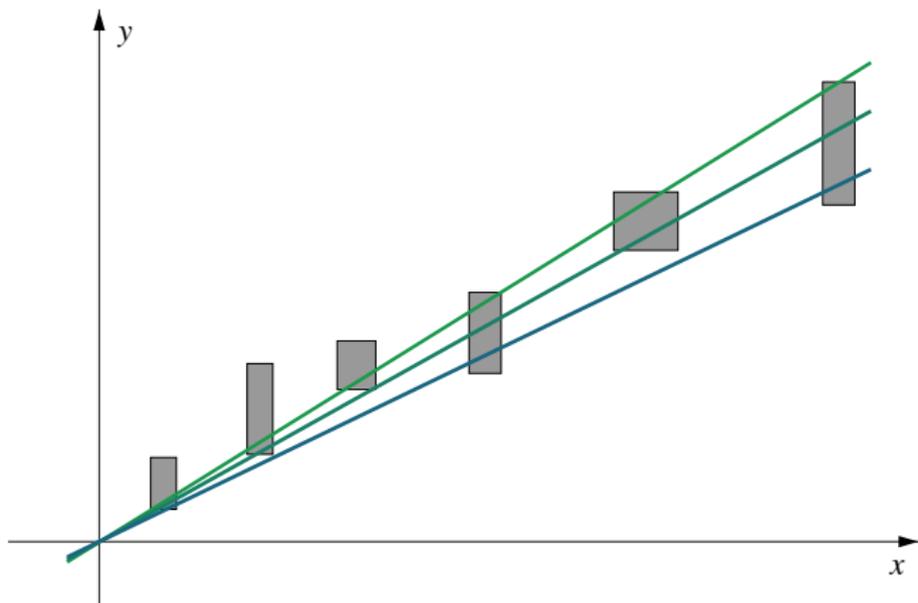
$$x_1 \in [\underline{x}_{i1}, \bar{x}_{i1}] = \mathbf{x}_{i1}, \quad x_2 \in [\underline{x}_{i2}, \bar{x}_{i2}] = \mathbf{x}_{i2}, \quad \dots, \quad x_n \in [\underline{x}_{in}, \bar{x}_{in}] = \mathbf{x}_{in}$$

$$y \in [\underline{y}_i, \bar{y}_i] = \mathbf{y}_i, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Исходными данными задачи является набор интервалов значений независимых и зависимых переменных нашей функции:

$$\begin{array}{cccccc} \mathbf{x}_{11}, & \mathbf{x}_{12}, & \dots & \mathbf{x}_{1n}, & \mathbf{y}_1, & \\ \mathbf{x}_{21}, & \mathbf{x}_{22}, & \dots & \mathbf{x}_{2n}, & \mathbf{y}_2, & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ \mathbf{x}_{m1}, & \mathbf{x}_{m2}, & \dots & \mathbf{x}_{mn}, & \mathbf{y}_m. & \end{array}$$

# Иллюстрация



Для нахождения оценок коэффициентов  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ ,  
разработаны несколько методов.

*Метод максимума совместности* (“метод максимума согласования”):

- Шарый С.П. Разрешимость интервальных линейных уравнений и анализ данных с неопределённостью, *Автоматика и Телемеханика*, №2 (2012), сс. 111–125.
- Shary, S.P. Maximum consistency method for data fitting under interval uncertainty, *Journal of Global Optimization*, vol. 66 (2016), pp. 111–126.
- Shary, S.P. Weak and strong compatibility in data fitting under interval uncertainty, *Advances in Data Science and Adaptive Analysis*, vol. 12 (2020), No. 1, 2050002.

# Введение и постановка задачи

Термином «вариабельность»

мы называем степень изменчивости и неоднозначности оценки.

Обычно мы получаем целое множество различных оценок, которые одинаково согласуются (совместны) с исходными данными и поэтому подходят в качестве решений задачи.

Количественная характеристика того, насколько это множество велико или мало, будет называться «вариабельностью».

# Мера вариабельности

В традиционной вероятностной статистике

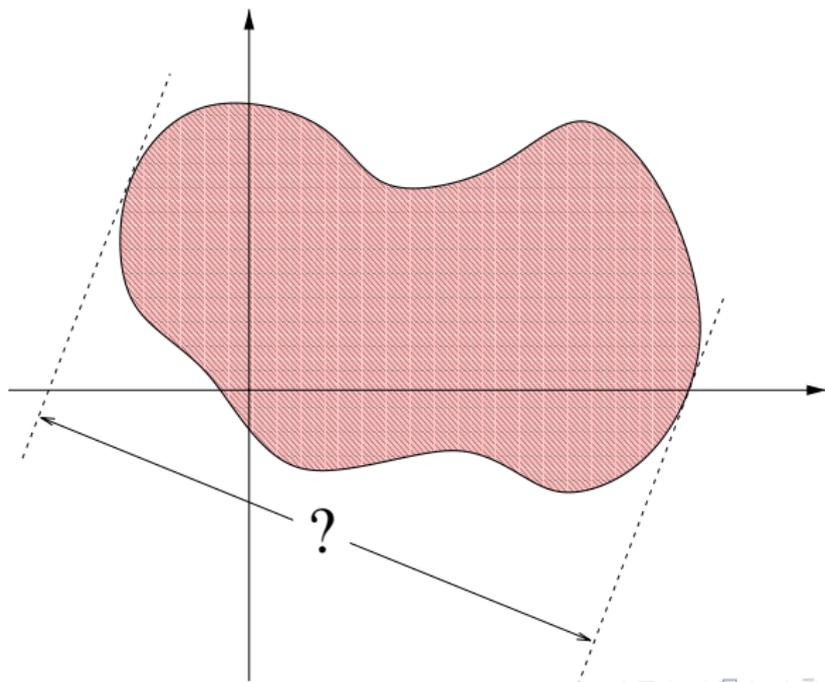
- стандартное отклонение,
- среднее абсолютное отклонение,
- коэффициент Джини,
- медианное абсолютное отклонение,

и другие подобные меры используются для описания вариабельности и рассеяния оценок параметров.

Что может быть их аналогом  
в Интервальном Анализе Данных?

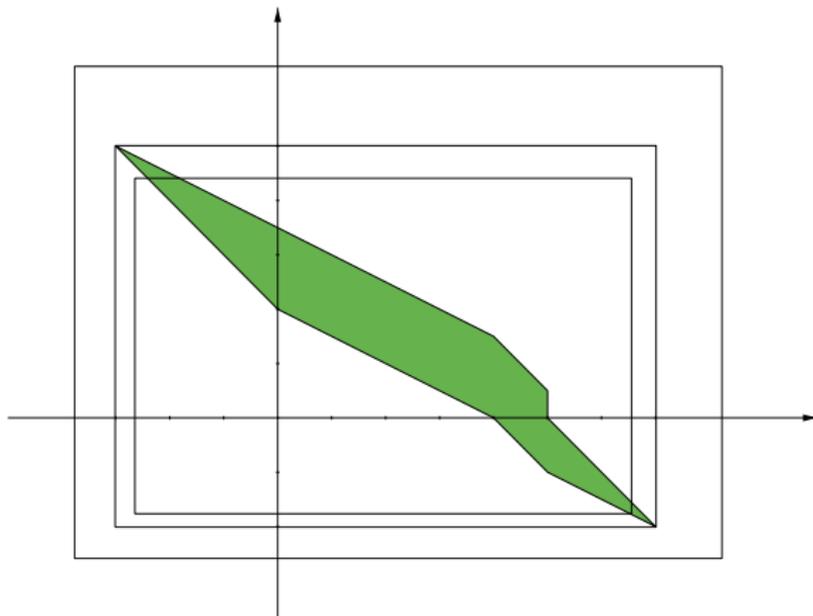
# Мера вариабельности

Мера вариабельности может быть оценкой размеров  
множества решений задачи



# Мера вариабельности

Мы можем даже взять внешнюю оценку множества решений,  
полученную каким-либо интервальным методом.



# Мера вариабельности

Мы можем даже взять внешнюю оценку множества решений,  
полученную каким-либо интервальным методом.

Недостатки:

- излишняя детализация ответа, выдаваемого как интервальный брус в  $\mathbb{R}^n$ , большой объём информации, который ещё нужно «переварить» и редуцировать к компактной форме.
- вычислительная сложность получения такой оценки.

# Мера вариабельности

Нужно иметь относительно простую и эффективно вычисляемую оценку, выражаемую одним числом, которая давала бы общий, «агрегированный», взгляд.

Аналогично дисперсии и другим вероятностным мерам, она могла бы служить приближённой характеристикой качества оценки параметров.

Чем больше вариабельность оценки,  
тем хуже её определённость и однозначность.

# Метод максимума совместности

Исходными данными в нашей задаче является набор значений независимых и зависимых переменных функции:

$$\begin{array}{ccccccccc} \mathbf{x}_{11}, & \mathbf{x}_{12}, & \dots & \mathbf{x}_{1n}, & \mathbf{y}_1, & & & & & \\ \mathbf{x}_{21}, & \mathbf{x}_{22}, & \dots & \mathbf{x}_{2n}, & \mathbf{y}_2, & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & & & & \\ \mathbf{x}_{m1}, & \mathbf{x}_{m2}, & \dots & \mathbf{x}_{mn}, & \mathbf{y}_m. & & & & & \end{array}$$

# Метод максимума совместности

Исходными данными в нашей задаче является набор значений независимых и зависимых переменных функции:

$$\begin{array}{cccccc} \mathbf{x}_{11}, & \mathbf{x}_{12}, & \dots & \mathbf{x}_{1n}, & \mathbf{y}_1, \\ \mathbf{x}_{21}, & \mathbf{x}_{22}, & \dots & \mathbf{x}_{2n}, & \mathbf{y}_2, \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_{m1}, & \mathbf{x}_{m2}, & \dots & \mathbf{x}_{mn}, & \mathbf{y}_m. \end{array}$$

Конструируемая линейная функция

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n$$



Параметры, которые совместны, в том или ином смысле, с данными измерений, образуют множество решений для интервальной системы уравнений.

Параметры, которые совместны, в том или ином смысле, с данными измерений, образуют множество решений для интервальной системы уравнений.

Объединённое множество решений,

$$\Xi_{uni}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \{ \beta \in \mathbb{R}^n \mid (\exists X \in \mathbf{X})(\exists y \in \mathbf{y})(X\beta = y) \},$$

соответствует «слабой совместности» между параметрами и данными.

Допусковое множество решений,

$$\Xi_{tol}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \{ \beta \in \mathbb{R}^n \mid (\forall X \in \mathbf{X})(\exists y \in \mathbf{y})(X\beta = y) \},$$

отвечает «сильной совместности» между параметрами и данными.

# Метод максимума совместности

Вводим специальную «меру совместности» вектора параметров с эмпирическими данными — *распознающий функционал*.

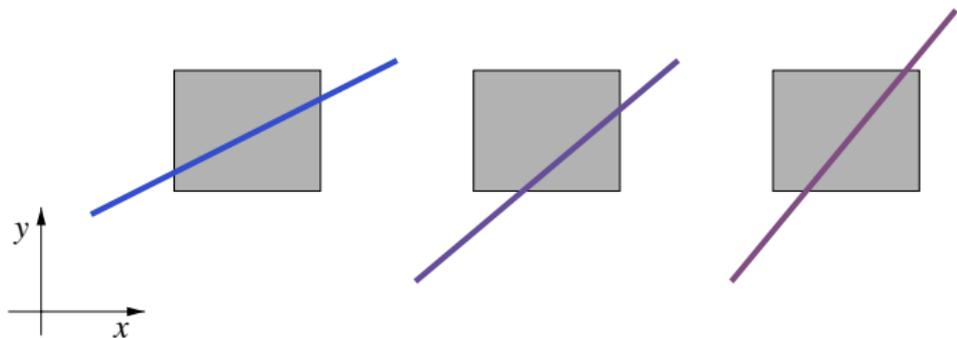
В качестве оценки параметров берём точку, в которой достигается максимум распознающего функционала.

Метод максимума совместности

имеет две версии,

«слабую» и «сильную».

Слабая и сильная совместность отражают две различные ситуации которые могут встретиться при обработке данных:

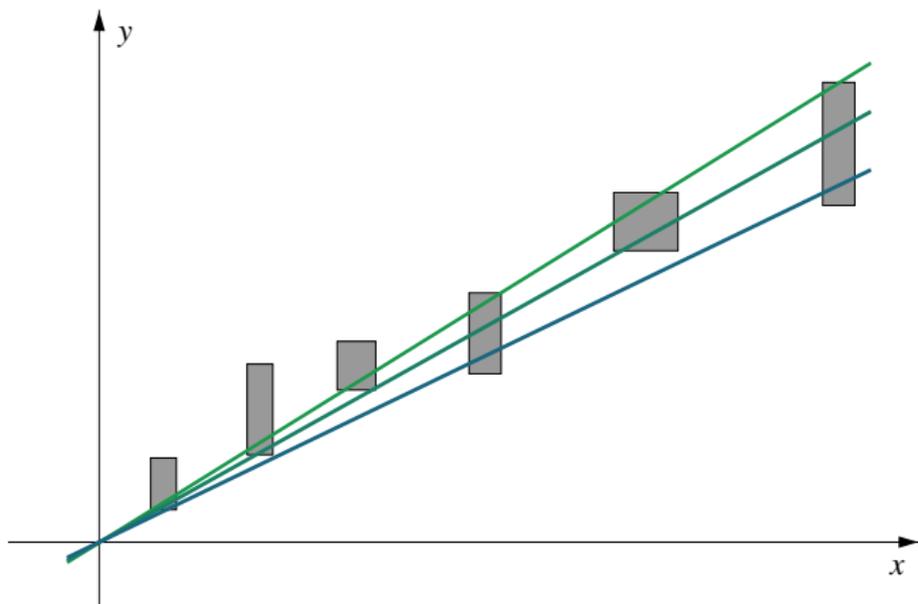


Слабая и сильная совместность отражают две различные ситуации которые могут встретиться при обработке данных:

- В слабой версии требуется, чтобы график конструируемой функции просто пересекал брусы неопределённости данных.
- В сильной версии требуется, чтобы график функции проходил через «коридоры», задаваемые интервалами  $y_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ , для *любого* значения независимых переменных  $x_1, x_2, \dots, x_n$  из интервалов  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in}$ , полученных в  $i$ -ом измерении.

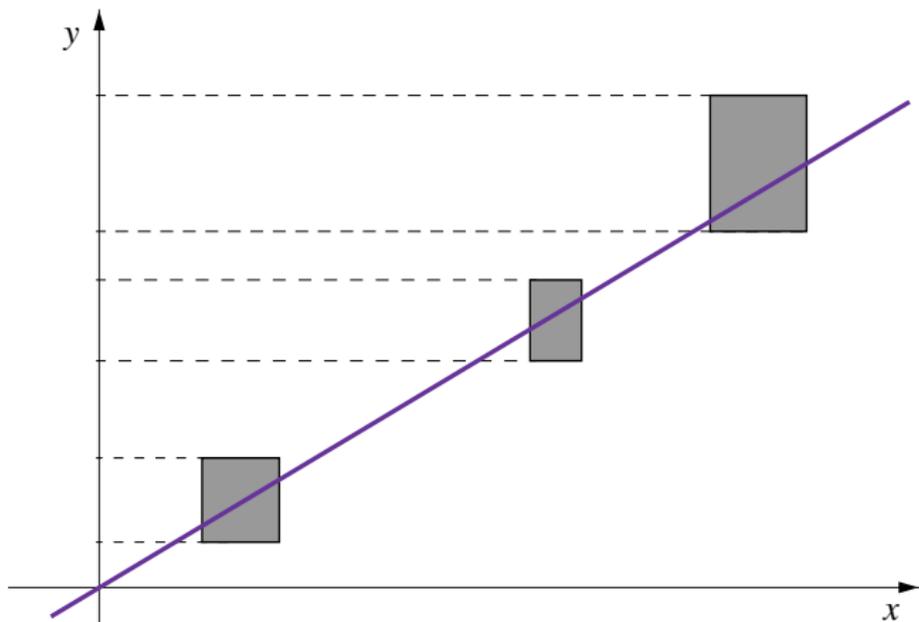
# Иллюстрация «слабой совместности»

между интервальными данными и линейной функцией



## Иллюстрация «сильной совместности»

между интервальными данными и линейной функцией



# Метод максимума совместности

«Сильная версия» метода максимума совместности имеет ряд преимуществ перед «слабой версией»:

- полиномиальная сложность,
- робастность оценок,
- конечная вариабельность оценок,
- сильная совместность частично преодолевает так называемый парадокс Демиденко, и т. .д.

Рассматриваем сильную версию метода максимума совместности, которая соответствует допусковому множеству решений  $\Xi_{tol}(\mathbf{X}, \mathbf{y})$ .

Полезный результат о допусковом множестве решений —

### Критерий ограниченности И.А. Шарой

Пусть для интервальной линейной системы  $X\beta = y$  допусковое множество решений непусто. Оно неограниченно тогда и только тогда, когда матрица  $X$  имеет линейно зависимые неинтервальные столбцы.

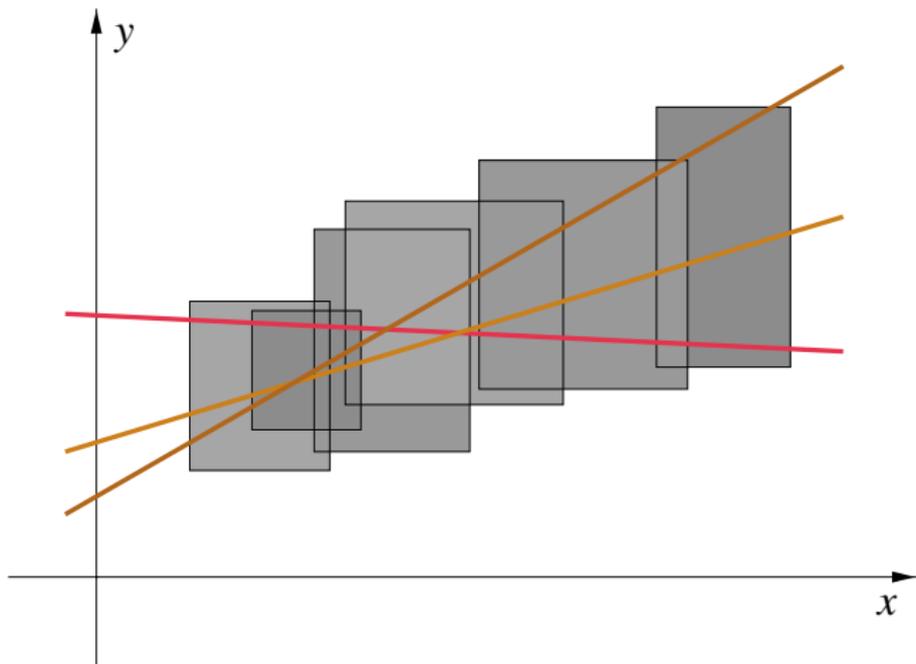
Полезный результат о допусковом множестве решений —

### Критерий ограниченности И.А. Шарой

Пусть для интервальной линейной системы  $X\beta = y$  допусковое множество решений непусто. Оно неограниченно тогда и только тогда, когда матрица  $X$  имеет линейно зависимые неинтервальные столбцы.

Допусковое множество решений ИСЛАУ почти всегда ограничено.

Поэтому оценки, полученные сильной версией метода максимума совместности, почти всегда имеют конечную вариабельность.



Распознающий функционал допускового множества решений,  
который даёт меру сильной совместности:

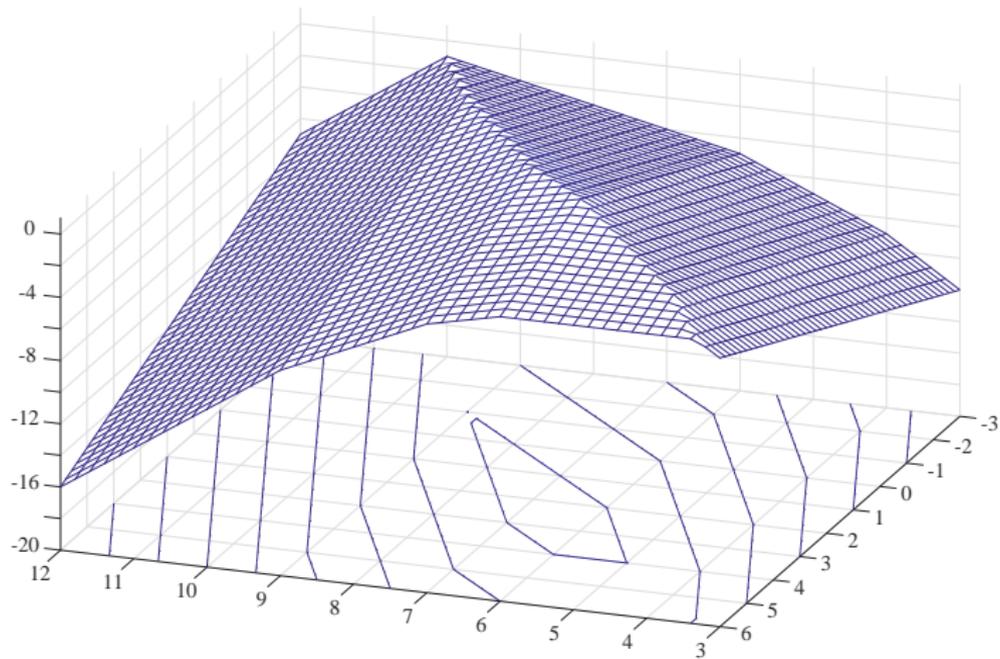
$$\text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \min_{1 \leq i \leq m} \left\{ \text{rad } \mathbf{y}_i - \left| \text{mid } \mathbf{y}_i - \sum_{j=1}^n \mathbf{x}_{ij} \beta_j \right| \right\},$$

где

$$\text{rad } \mathbf{y}_i = \frac{1}{2}(\overline{\mathbf{y}}_i - \underline{\mathbf{y}}_i), \quad \text{mid } \mathbf{y}_i = \frac{1}{2}(\overline{\mathbf{y}}_i + \underline{\mathbf{y}}_i),$$

$$|\mathbf{a}| = \max \{ |a| \mid a \in \mathbf{a} \} = \max \{ \underline{|\mathbf{a}|}, \overline{|\mathbf{a}|} \}.$$

## Типичный график распознающего функционала Tol



# Метод максимума совместности

Чтобы решить задачу восстановления линейной зависимости, необходимо найти безусловный максимум, по всем  $\beta \in \mathbb{R}^n$ , функционала Tol,

$$\text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y}) \rightarrow \max,$$

и вектор

$$\hat{\beta} = \arg \max_{\beta \in \mathbb{R}^n} \text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y})$$

даёт оценку параметров линейной функции.

Тогда  $\hat{\beta}$  называется *оценкой максимума совместности*.

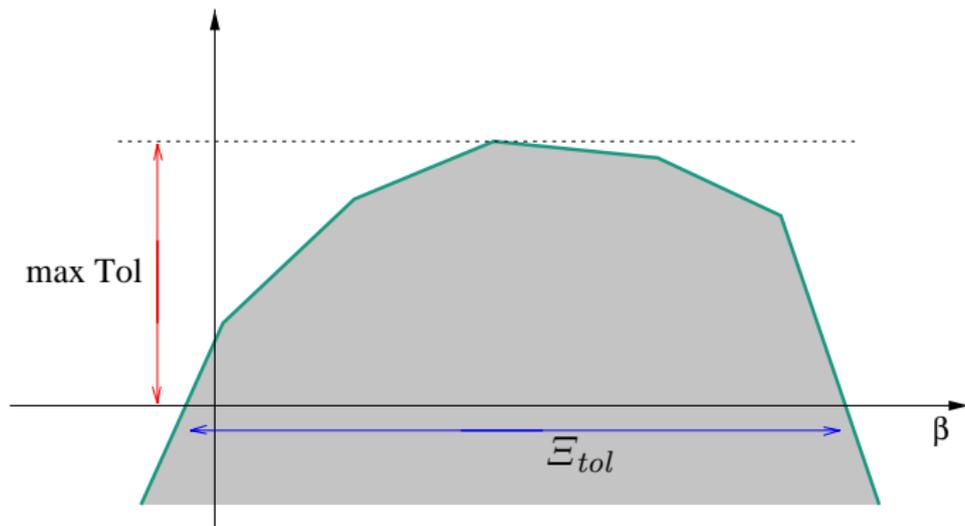
# Метод максимума совместности и допусковое множество решений

- Если  $\max \text{Tol} \geq 0$ , то множество решений  $\Xi_{\text{tol}}(\mathbf{X}, \mathbf{y})$ , т. е. множество параметров, сильно совместных с данными, непусто, и  $\hat{\beta} \in \Xi_{\text{tol}}(\mathbf{X}, \mathbf{y})$ .
- Если  $\max \text{Tol} < 0$ , то множество решений  $\Xi_{\text{tol}}(\mathbf{X}, \mathbf{y})$  пусто и не существует параметров, сильно совместных с данными.

Тем не менее, аргумент  $\hat{\beta}$  of  $\max \text{Tol}$  всё-таки обеспечивает наилучшую возможную совместность построенной функции с данными (наименьшую несовместность).

# Мера вариабельности

## Идея



Максимальное значение распознающего функционала даёт информацию о размерах допускового множества решений  $E_{tol}$ .

# Мера вариабельности

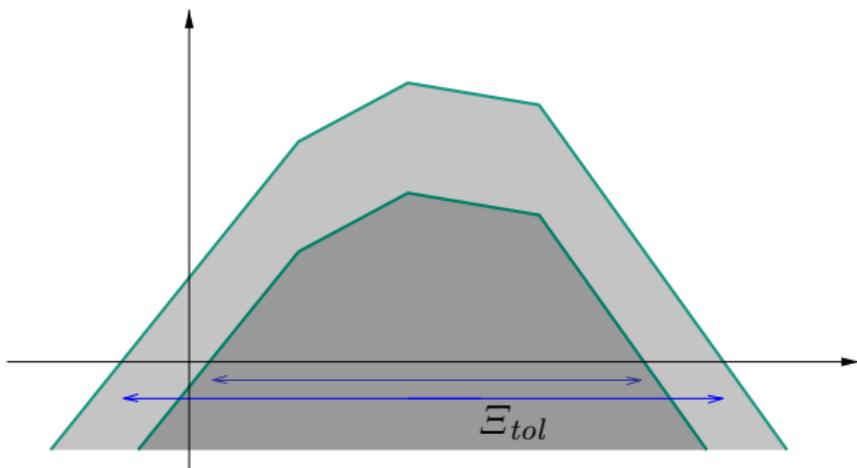
$$\Xi_{tol}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \{ \beta \in \mathbb{R}^n \mid \text{Tol}(\beta, \mathbf{X}, \mathbf{y}) \geq 0 \}$$

Величина  $\max \text{Tol}$  может, при прочих равных условиях, быть взята мерой того, насколько мало или велико множество решений  $\Xi_{tol}$ .

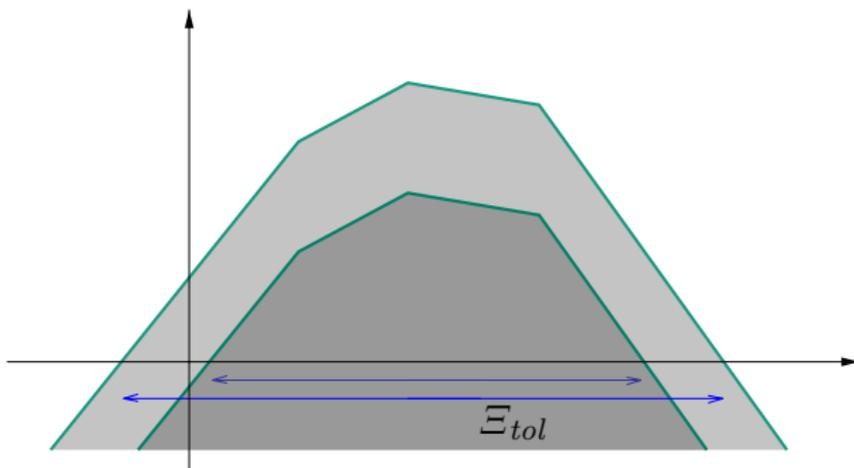
Чем больше  $\max \text{Tol}$ ,

тем больше размеры допускового множества решений,

и наоборот.

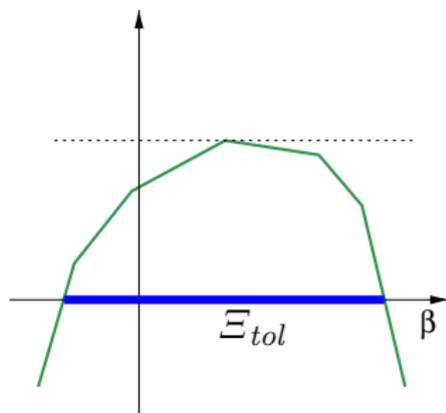
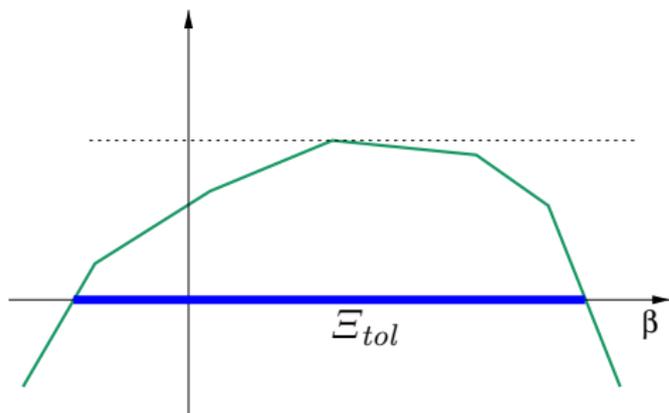


Размеры множества решений пропорциональны  $\max Tol$   
для достаточно больших  $\text{rad } \mathbf{y}$ ,



Размеры множества решений пропорциональны  $\max Tol$   
для достаточно больших  $\text{rad } y$ ,

$$\text{мера вариабельности} = K \cdot \max Tol$$



В дополнение к  $\max Tol$

размеры  $\Xi_{tol}$  также определяются

крутизной (наклоном) графика  $Tol$ .

# Мера вариабельности

В качестве характеристики вариабельности оценки параметров для линейной функции,  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_n)$ , получаемой с помощью метода максимума совместности, мы предлагаем

$$\text{IVE}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \sqrt{n} \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \cdot \left( \min_{X \in \text{vert } \mathbf{X}} \text{cond}_2 X \right) \cdot \frac{\| \arg \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \|_2}{\| \hat{\mathbf{y}} \|_2}$$

В выписанной формуле

$n$  — размерность вектора параметров функции;

$\|\cdot\|_2$  — евклидова норма (2-норма) векторов из  $\mathbb{R}^n$ ,

$$\|a\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n |a_i|^2 \right)^{1/2};$$

$\text{vert } X$  — множество «концевых матриц» для интервальной матрицы  $X$ , т.е. множество таких точечных матриц  $X = (x_{ij})$ , что  $x_{ij} \in \{\underline{x}_{ij}, \overline{x}_{ij}\}$ ;

$\text{cond}_2 X$  — спектральное число обусловленности матрицы,

$$\text{cond}_2 X = \sigma_{\max}(X) / \sigma_{\min}(X);$$

$\hat{\mathbf{y}}$  — «наиболее представительная» точка из интервального вектора  $\mathbf{y}$ , которая берётся как

$$\hat{\mathbf{y}} = \frac{1}{2}(|\text{mid } \mathbf{y} + \text{rad } \mathbf{y}| + |\text{mid } \mathbf{y} - \text{rad } \mathbf{y}|).$$

# Мера вариабельности

Наклон гиперплоскостей определяется коэффициентами уравнений, которые задают их, и они являются концами интервалов данных.

Этот наклон обобщённо выражается числом обусловленности точечных матриц из интервальной матрицы данных  $X$ .

Наконец, множитель

$$\frac{\|\arg \max \text{Tol}\|_2}{\|\hat{\mathbf{y}}\|_2} = \frac{\|\hat{\beta}\|_2}{\|\hat{\mathbf{y}}\|_2}$$

— это масштабирующий коэффициент, котрый обеспечивает соизмеримость окончательного значения с величиной решения и вектором правой части системы.

Таким образом, получаем формулу для IVE.

Возмущение  $\Delta x$  ненулевого решения  $x$

для системы линейных уравнений  $Ax = b$ :

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq \text{cond}_2 A \cdot \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}.$$

Это неравенство справедливо также для переопределённых систем.

Возмущение  $\Delta x$  ненулевого решения  $x$

для системы линейных уравнений  $Ax = b$ :

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq \text{cond}_2 A \cdot \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}.$$

Это неравенство справедливо также для переопределённых систем.

Тогда

$$\|\Delta x\|_2 \leq \|\Delta b\|_2 \cdot \text{cond}_2 A \cdot \frac{\|x\|_2}{\|b\|_2},$$

где  $\|\Delta b\|_2 = \sqrt{n} \max \text{Tol}$ .

# Вычисление IVE

$$\text{IVE}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \sqrt{n} \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \cdot \left( \min_{X \in \text{vert } \mathbf{X}} \text{cond}_2 X \right) \cdot \frac{\| \arg \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \|_2}{\| \hat{\mathbf{y}} \|_2}$$

основная трудность — в вычислении  $\min_{X \in \text{vert } \mathbf{X}} \text{cond}_2 X$

# Вычисление IVE

$$\text{IVE}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \sqrt{n} \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \cdot \left( \min_{X \in \text{vert } \mathbf{X}} \text{cond}_2 X \right) \cdot \frac{\| \arg \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \|_2}{\| \hat{\mathbf{y}} \|_2}$$

основная трудность — в вычислении  $\min_{X \in \text{vert } \mathbf{X}} \text{cond}_2 X$

Если  $\mathbf{X}$  — достаточно узкая, то

$$\min_{X \in \text{vert } \mathbf{X}} \text{cond}_2 X \approx \text{cond}_2(\text{mid } \mathbf{X}).$$

В общем случае можем использовать эволюционные алгоритмы оптимизации, такие как генетический алгоритм, симулированный отжиг, метод «роя частиц» и т. п.

# Мера вариабельности

В качестве характеристики вариабельности оценки параметров линейной функции,  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_n)$ , получаемой с помощью метода максимума совместности, мы предлагаем

$$\text{IDE}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \sqrt{n} \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \cdot \text{cond}_2 \mathcal{X} \cdot \frac{\|\arg \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol}\|_2}{\|\hat{\mathbf{y}}\|_2}.$$

В выписанной формуле

$n$  — размерность вектора параметров функции;

$\|\cdot\|_2$  — евклидова норма (2-норма) векторов в  $\mathbb{R}^n$ ;

$X$  — специальная матрица, называемая *матрицей поконцевых комбинаций* для  $X$ , имеющая размеры  $N \times n$  с  $N \leq m \cdot 2^n$ , составленная из комбинаций концов интервальных элементов вдоль каждой строки  $X$ ;

$\text{cond}_2 X$  — спектральное число обусловленности матрицы;

$\hat{\mathbf{y}}$  — «наиболее представительная» точка из  $\mathbf{y}$ ,

$$\hat{\mathbf{y}} = \frac{1}{2}(|\text{mid } \mathbf{y} + \text{rad } \mathbf{y}| + |\text{mid } \mathbf{y} - \text{rad } \mathbf{y}|).$$

# Вычисление IDE

$$\text{IDE}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \sqrt{n} \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \cdot \text{cond}_2 \mathcal{X} \cdot \frac{\|\arg \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol}\|_2}{\|\hat{\mathbf{y}}\|_2}.$$

- основная трудность заключается в конструировании матрицы поконцевых комбинаций  $\mathcal{X}$  с  $m \cdot 2^n$  строками.

# Вычисление IDE

$$\text{IDE}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) = \sqrt{n} \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol} \cdot \text{cond}_2 \mathcal{X} \cdot \frac{\|\arg \max_{\mathbb{R}^n} \text{Tol}\|_2}{\|\hat{\mathbf{y}}\|_2}.$$

— основная трудность заключается в конструировании матрицы поконцевых комбинаций  $\mathcal{X}$  с  $m \cdot 2^n$  строками.

Естественный выход из затруднения — использовать «редуцированную матрицу поконцевых комбинаций»  $\tilde{\mathcal{X}}$ .

$\tilde{\mathcal{X}}$  конструируется специальным образом и обычно имеет  $O(2m)$  строк, составленных из некоторых, не всех, комбинаций концов по строкам  $\mathbf{X}$

# Редуцированная матрица поконцевых комбинаций

$$\beta \in \Xi_{tol}(\mathbf{X}, \mathbf{y}) \iff \mathbf{X} \cdot \beta \subseteq \mathbf{y}$$

Если мы знаем знаки компонент  $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)^\top$ , то

$$(\mathbf{X} \cdot \beta)_i = \left[ \sum_{j=1}^n x'_{ij} \beta_j, \sum_{j=1}^n x''_{ij} \beta_j \right]$$

с некоторыми определёнными наборами концов  $x'_{ij}, x''_{ij} \in \{\underline{x}_{ij}, \bar{x}_{ij}\}$ .

Тогда можем уменьшить число неравенств

в системе, равносильной  $\mathbf{X} \cdot \beta \subseteq \mathbf{y}$ .

Спасибо за внимание