ИНТЕРВАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ДОКАЗАТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Решение систем линейных уравнений

С.П. Шарый

Институт вычислительных технологий СО РАН

г. Новосибирск

I. Постановка задачи и терминология

«Доказательные вычисления»

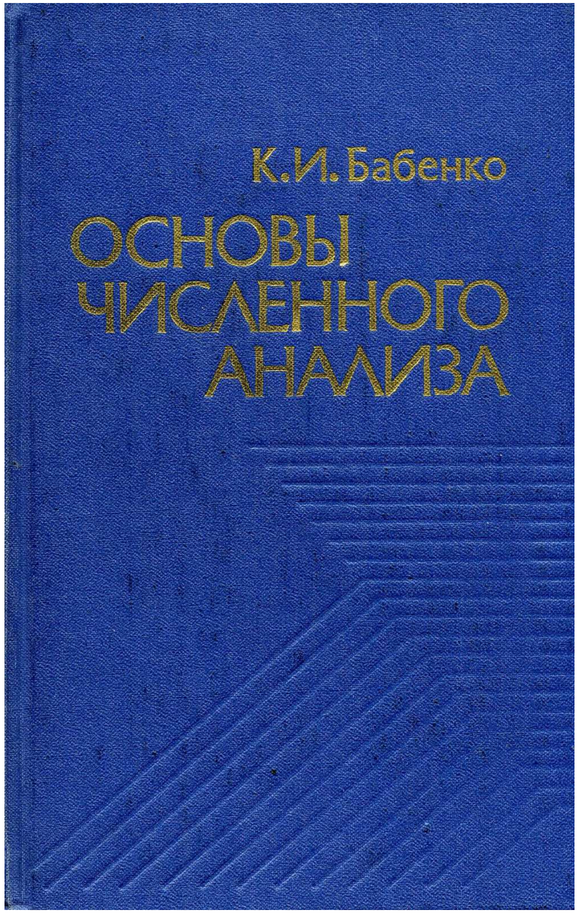
Константин Иванович Бабенко (1919–1987)

О доказательных вычислениях
и математическом эксперименте на ЭВМ
Успехи математических наук. – 1985.
– Т. 40, вып. 4 (244). – С. 137–138

О доказательных вычислениях в задаче
об устойчивости течения Пуазейля
ДАН СССР. – 1983. – Т. 273. – № 6.
– С. 1289–1294 (с М. М. Васильевым)

и другие работы

«Доказательные вычисления»



К. И. Бабенко
Основы численного анализа
Москва: Наука, 1986

в Главе 9 — параграф
«О доказательных вычислениях»

«Доказательные вычисления»

где $L_\alpha = d^2/dy^2 - \alpha^2$. Разработайте численный алгоритм решения этой спектральной задачи и постройте нейтральную кривую, т. е. зависимость критического числа Рейнольдса R_{cr} от волнового числа α.

7. При разработке дискретизации нужно принять во внимание, что при $\alpha = 0$ имеет место вырождение спектральной задачи.

§ 7. О доказательных вычислениях

1. Казалось бы, вопрос об оценках погрешности, с которой мы находим решение некоторой задачи, вполне будет решен, если теоретическим путем найдем неулучшаемую оценку погрешности. Однако при более внимательном рассмотрении мы увидим, что теоретические оценки погрешности вопроса до конца не решают. Рассмотрим конкретный пример спектральной задачи. Мы уже видели, что машинное представление матрицы может за собой повлечь изменение собственных значений (и в отдельных случаях очень сильное). Далее, сама процедура отыскания собственных значений является итерационной, и окончание итерационного цикла может быть не связано с достижением нужной точности. И наконец, не последнюю роль играют погрешности округления. Таким образом, теоретическая оценка погрешности должна быть подправлена с учетом всех перечисленных факторов, а это бывает сплошь и рядом практически невыполнимо. Поэтому возникает вопрос о том, как же следует поступать, если нужно получить ответ с некоторой гарантированной погрешностью? На конкретном примере довольно трудной задачи мы расскажем, как производится апостериорная оценка погрешности, а тем самым указывается и ее верхняя граница. Для того чтобы получить апостериорную оценку погрешности, требуется выполнить предварительные аналитические изыскания и проделать дополнительные вычисления. Реализация этой программы бывает непростой и кроме затрат машинного времени требует большого мастерства.

Затронутый вопрос самым тесным образом связан с так называемыми доказательными вычислениями в анализе. Под *доказательными вычислениями* в анализе мы понимаем такие целенаправленные вычисления на ЭВМ, комбинируемые с аналитическими исследованиями, которые приводят к строгому установлению новых фактов (теорем). Идея использования ЭВМ для решения не чисто вычислительных задач не нова. Уже довольно давно стали приспосабливать ЭВМ к получению утверждений в формализованных теориях теоретической математики, например для вывода теорем элементарной геометрии и т. п. Известно, что в настоящее время ЭВМ широко используются для выполнения аналитических преобразований, в прикладной комбинаторике, в теории игр и в вопросах принятия решений, для редактирования текстов и перевода с одного языка на другой. Область неарифметического использования ЭВМ все расширяется, и трудно переоценить роль ЭВМ в таком важнейшем вопросе научного творчества, как формулировка гипотез и их последующая проверка (с помощью ЭВМ).

Особенно продуктивно использование ЭВМ в теории чисел, где очень часто объект исследования дискретен — целое число. Послед-

стр. 595 книги

«Основы численного анализа»

Линейные системы уравнений

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad \vdots \qquad\qquad \ddots \qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases}$$

или, кратко,

$$Ax = b$$

с $n \times n$-матрицей $A = (\, a_{ij})$ и n-вектором $b = (\, b_i)$.

Задача доказательного решения системы линейных уравнений

Найти решение системы уравнений $Ax = b$

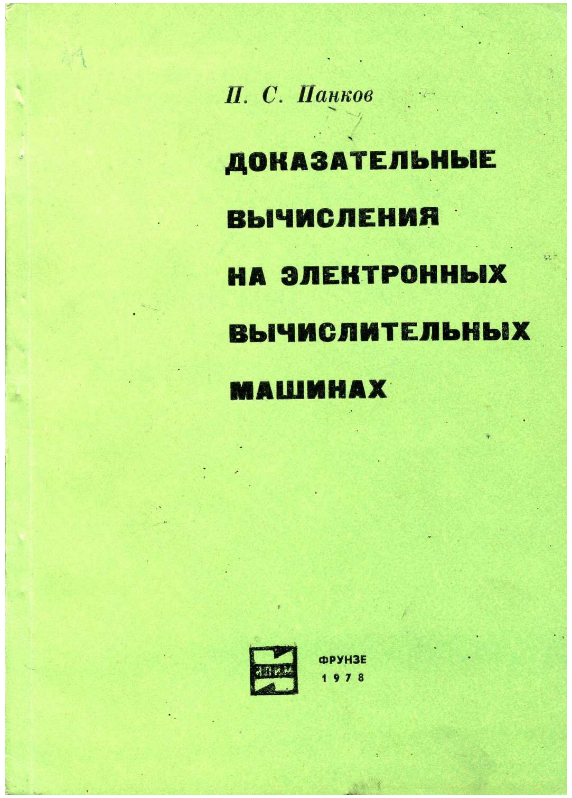
и определить его оценку погрешности

или

Найти решение системы уравнений $Ax = b$, указав

для него двусторонние гарантированные оценки

«Доказательные вычисления»



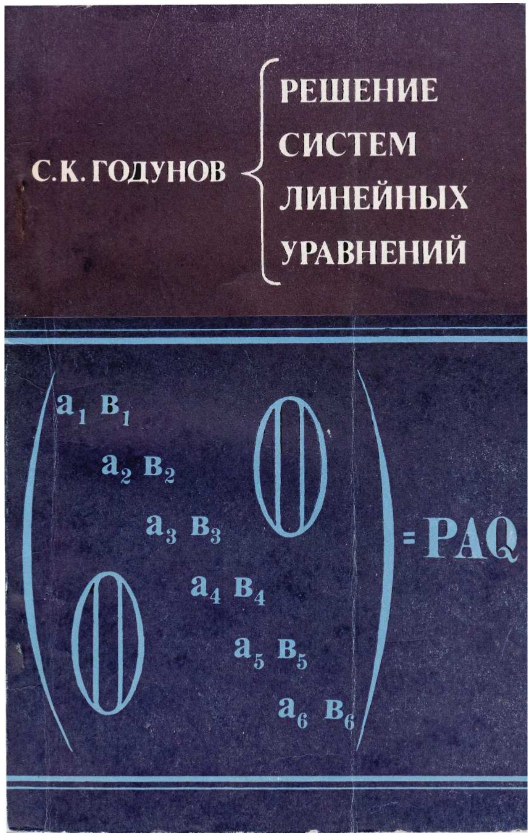
П. С. Панков
Доказательные вычисления
на электронных вычислительных машинах
– Фрунзе: Илим, 1978

«Алгоритмы с гарантированной точностью в задачах линейной алгебры»

Сергей Константинович Годунов
(род. 1929)

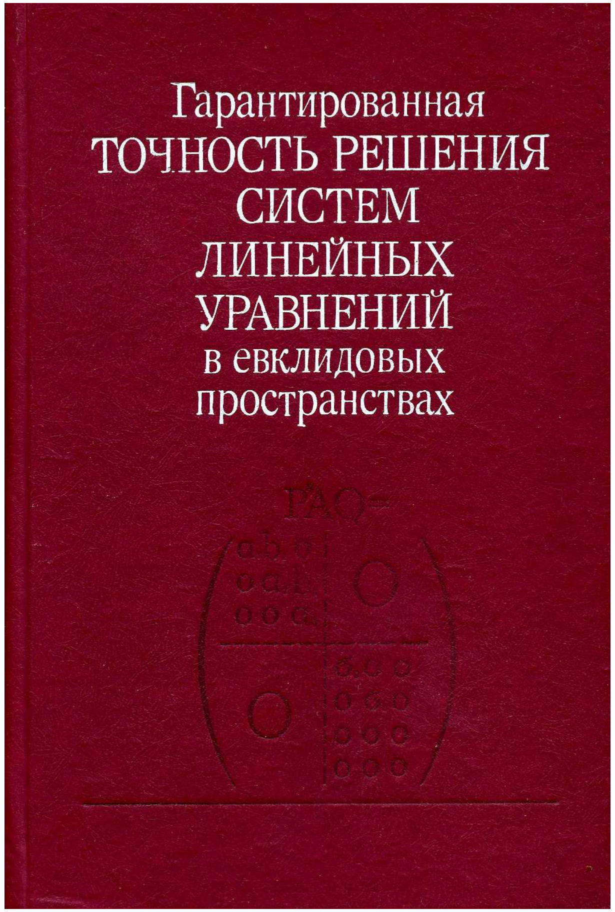
Институт математики СО РАН,
г. Новосибирск

«Алгоритмы с гарантированной точностью»: подход С.К. Годунова



С.К.Годунов
Решение систем линейных уравнений.
– Новосибирск: Наука, 1980

«Алгоритмы с гарантированной точностью»: подход С.К. Годунова



С. К. Годунов и др.
Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах.
– Новосибирск: Наука, 1988 и 1992

«Алгоритмы с гарантированной точностью»: подход С.К. Годунова

— ещё публикации по теме:

Малышев А.Н. *Введение в вычислительную линейную алгебру.* – Новосибирск: Наука, 1991,

Годунов С.К. *Современные аспекты линейной алгебры.* – Новосибирск: Научная книга, 1997 и 2002,

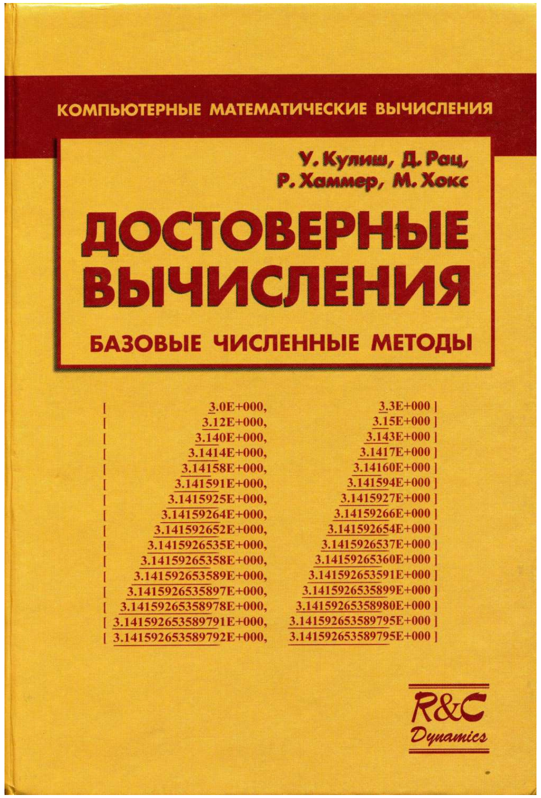
Бибердорф Э.А., Попова Н.И. *Гарантированная точность современных алгоритмов линейной алгебры.* – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006,

Бибердорф Э.А. *Гарантированная точность в прикладных задачах линейной алгебры. Учебное пособие*. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 2008,

+ несколько десятков статей ...

«Доказательные» или «достоверные» вычисления?

— попытка создания новой терминологии



У. Кулиш и др.
Достоверные вычисления.
Базовые численные методы
– Ижевск-Москва: «РХД», 2005

«Доказательные» или «достоверные» вычисления?

НЕдоказательные $=$ нестрогие

НЕдостоверные $=$ ложные

$\Downarrow$

«доказательные вычисления» лучше . . .

Доказательные вычисления

— хороший русский эквивалент англоязычным терминам

verified computations,

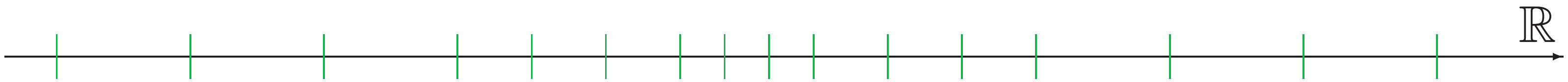
validated numerics,

reliable computing

и пр.,

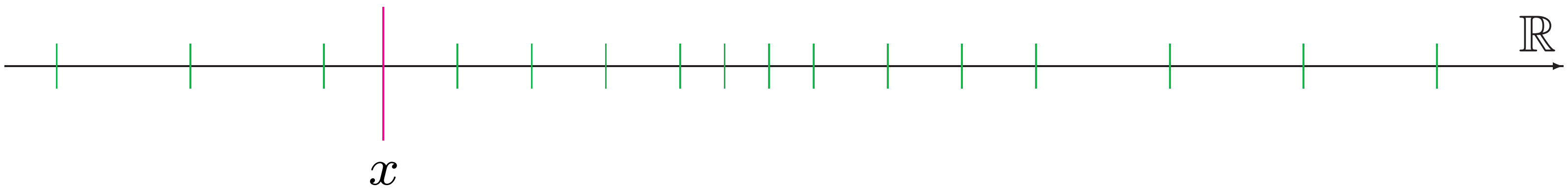
которые появились примерно в то же время

Трудности доказательных вычислений



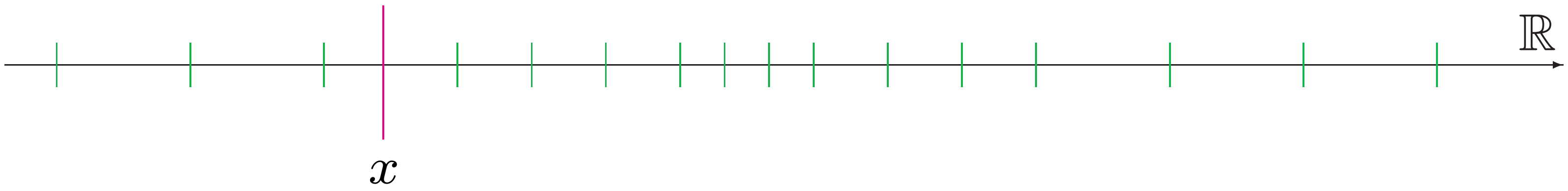
— *машинно-представимые в ЭВМ числа образуют «редкое» подмножество вещественной оси* $\mathbb{R}$ *в модели чисел «с плавающей точкой»*

Трудности доказательных вычислений



— *машинно-представимые в ЭВМ числа образуют «редкое» подмножество вещественной оси* $\mathbb{R}$ *в модели чисел «с плавающей точкой»*

Трудности доказательных вычислений



— *машинно-представимые в ЭВМ числа образуют «редкое» подмножество вещественной оси* $\mathbb{R}$ *в модели чисел «с плавающей точкой»*

Ввод данных в ЭВМ и арифметические операции с ними неизбежно сопровождаются ошибками

II. Основы интервальной техники

Интервалы

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

— замкнутые, ограниченные и связные подмножества $\mathbb{R}$

Интервалы

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

— замкнутые, ограниченные и связные подмножества $\mathbb{R}$

$\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$, ..., $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{z}$ — жирным шрифтом

Интервалы

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

$$\big(\,[1,2],\ [1000,1003]\,\big)$$

$$\begin{pmatrix} [1,2] \\ [1000,1003] \end{pmatrix}$$

Интервалы

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

$$\big(\,[1,2],\ [1000,1003]\,\big)$$

$$\begin{pmatrix}[1,2]\\ [1000,1003]\end{pmatrix}$$

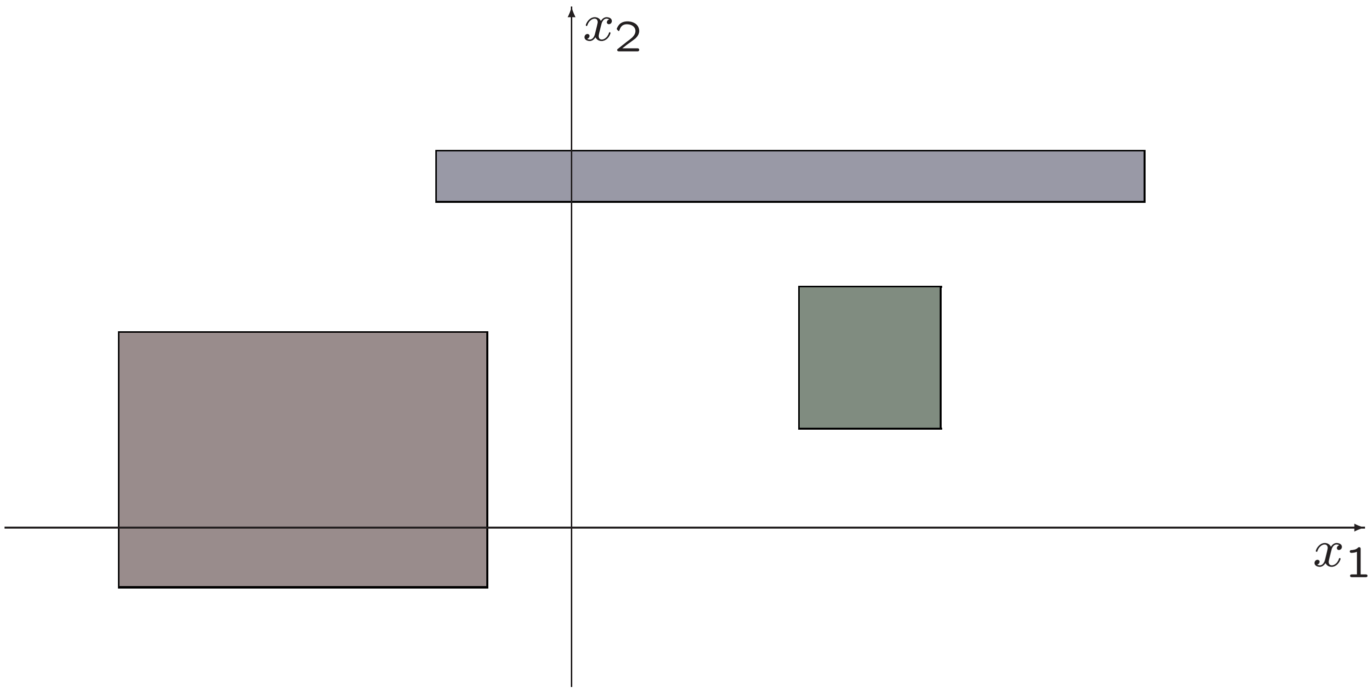
интервальные векторы — это прямые произведения одномерных интервалов

Интервалы

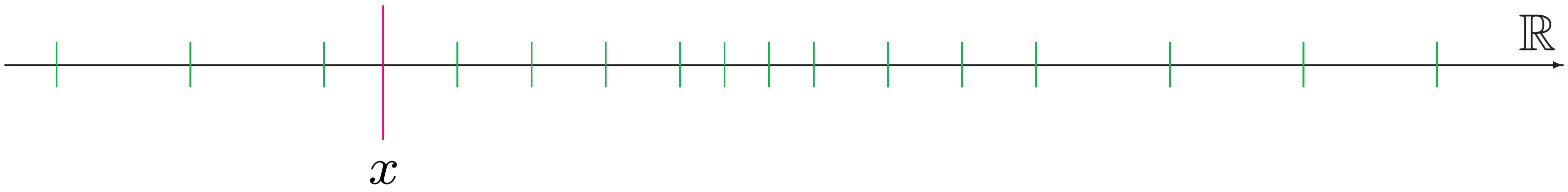
$$[1, 2], \qquad [1000, 1003], \qquad \ldots$$

$$\Big([1, 2],\ [1000, 1003] \Big)$$

$$\begin{pmatrix} [1, 2] \\ [1000, 1003] \end{pmatrix}$$

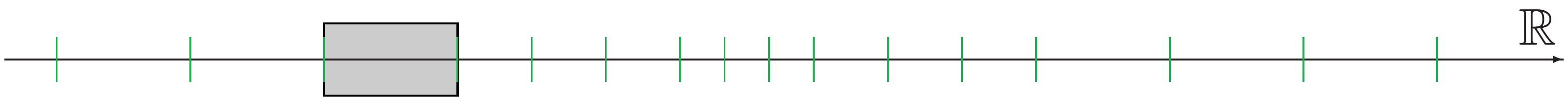


Трудности доказательных вычислений



— машинно-представимые в ЭВМ числа образуют «редкое» подмножество вещественной оси $\mathbb{R}$

Трудности доказательных вычислений



$\boldsymbol{X}$

$x \in \boldsymbol{X}$

— *интервальное решение проблемы представления* $\mathbb{R}$ *в ЭЦВМ*

Характеристики интервалов

$$
\begin{array}{rcll}
\underline{\boldsymbol{x}}, & & \overline{\boldsymbol{x}} & \text{— нижний и верхний концы} \\
\operatorname{mid} \boldsymbol{x} & = & \frac{1}{2}(\,\overline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{x}}\,) & \text{— середина} \\
\operatorname{wid} \boldsymbol{x} & = & \overline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}} & \text{— ширина} \\
\operatorname{rad} \boldsymbol{x} & = & \frac{1}{2}(\,\overline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}\,) & \text{— радиус} \\
|\boldsymbol{x}| & = & \max\{\,|\underline{\boldsymbol{x}}|, |\overline{\boldsymbol{x}}|\,\} & \text{— абсолютное значение (модуль)}
\end{array}
$$

Расстояние между интервалами

$$
\operatorname{dist}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \;=\; \max\Bigl\{\,|\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{y}}|,\; |\overline{\boldsymbol{x}} - \overline{\boldsymbol{y}}|\,\Bigr\}
$$

Интервалы как средство работы с областями значений

$$x \in [1,2] \qquad\qquad y \in [3,7]$$

$$x + y \in \; ?$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \in [1, 2] \qquad\qquad y \in [3, 7]$$

$$x + y \in \ ?$$

$$1 \le x \le 2 \qquad\qquad 3 \le y \le 7$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \ \in \ [1, 2] \qquad\qquad y \ \in \ [3, 7]$$

$$x + y \ \in \ [4, 9] = [1 + 3, 2 + 7]$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \in [1,2] \qquad\qquad y \in [3,7]$$

$$x+y \in [4,9] = [1+3, 2+7]$$

Аналогично и с другими арифметическими операциями ...

Классическая интервальная арифметика $\mathbb{IR}$

— алгебраическая система, образованная интервалами $\boldsymbol{x} = [\underline{\boldsymbol{x}}, \overline{\boldsymbol{x}}] \subset \mathbb{R}$ так, что

$$\boldsymbol{x} \star \boldsymbol{y} = \left\{ x \star y \mid x \in \boldsymbol{x}, y \in \boldsymbol{y} \right\} \qquad \text{для} \qquad \star \in \{+, -, \cdot, /\}$$

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

Можно ли использовать

результаты такого вычисления

далее в цепочках вычислений?...

Итервальные векторно-матричные операции

Сумма (разность) двух интервальных матриц одного размера — это матрица из поэлементных сумм (разностей) операндов.

Произведение $\boldsymbol{XY} = \boldsymbol{Z} = (\,\boldsymbol{z}_{ij})$ матриц $\boldsymbol{X} = (\,\boldsymbol{x}_{ij})$ и $\boldsymbol{Y} = (\,\boldsymbol{y}_{ij})$ таково, что

$$\boldsymbol{z}_{ij} = \sum_k \boldsymbol{x}_{ik}\boldsymbol{y}_{kj}.$$

Теперь

$$\boldsymbol{X} \star \boldsymbol{Y} \;=\; \text{интервальная оболочка} \left\{\, X \star Y \;\mid\; X \in \boldsymbol{X}, Y \in \boldsymbol{Y} \,\right\}$$

$$\text{для любой операции} \;\; \star \in \{\,+\,, -\,, \cdot\,\}$$

Основная теорема интервальной арифметики

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — рациональная функция
от аргументов x_1, x_2, . . . , x_n.

Если для некоторого бруса $\boldsymbol{x} = (\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ определён результат $\boldsymbol{f}_\natural(\boldsymbol{x})$ подстановки вместо аргументов функции $f(x)$ интервалов $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ и выполнения всех действий над ними по правилам интервальной арифметики, то

$$\{\, f(\,x_1, \ldots, x_n) \mid x_1 \in \boldsymbol{x}_1, \ldots, x_n \in \boldsymbol{x}_n \,\} \;\subseteq\; \boldsymbol{f}_\natural(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n),$$

т. е. результат интервального оценивания $\boldsymbol{f}_\natural(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ содержит множество значений функции $f(\,x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n)$ на $(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$.

— *естественное интервальное расширение*

Монотонность по включению

$$\boldsymbol{x} \subseteq \boldsymbol{x}', \quad \boldsymbol{y} \subseteq \boldsymbol{y}' \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{x} \star \boldsymbol{y} \subseteq \boldsymbol{x}' \star \boldsymbol{y}'$$

для любой операции $\star \in \{ +, -, \cdot, / \}$

Доказательство Основной теоремы интервальной арифметики

Для любого $x \in \boldsymbol{x}$ по построению $\boldsymbol{f}_\natural$

$$\downarrow$$

$$f(x) \;=\; \boldsymbol{f}_\natural(x) \;\in\; \boldsymbol{f}_\natural(\boldsymbol{x})$$

$$\uparrow$$

в силу монотонности по включению

Пример

$$f(x) = \frac{x}{x+y} \qquad \text{для } x \in [1,2],\ y \in [3,4]$$

$$\frac{[1,2]}{[1,2]+[3,4]} \;=\; \frac{[1,2]}{[4,6]} \;=\; \left[\frac{1}{6},\frac{2}{4}\right] \;=\; [0.166\ldots,0.5]$$

$$g(x) = \frac{1}{1+y/x} \qquad \text{для } x \in [1,2],\ y \in [3,4]$$

$$\frac{1}{1+\frac{[3,4]}{[1,2]}} \;=\; \frac{1}{1+\left[\frac{3}{2},4\right]} \;=\; \frac{1}{\left[\frac{5}{2},5\right]} \;=\; \left[\frac{1}{5},\frac{2}{5}\right] \;=\; [0.2,0.4]$$

Точность интервального оценивания

— существенно зависит от вида выражения,

которое задаёт функцию

Основная теорема интервальной арифметики

(продолжение)

Если рациональное выражение для $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ содержит не более чем по одному вхождению каждой переменной в первой степени, то имеет место точное равенство

$$\{\, f(x_1, \ldots, x_n) \mid x_1 \in \boldsymbol{x}_1, \ldots, x_n \in \boldsymbol{x}_n \,\} \;=\; \boldsymbol{f}_{\natural}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n),$$

т. е. результат интервального оценивания $\boldsymbol{f}_{\natural}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ совпадает с множеством значений функции $f(x_1,\, x_2,\, \ldots,\, x_n)$ на $(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$.

Интервальные методы как средство решения задач оптимизации

С помощью интервальной техники можем оценивать области значений функций

$$\mathrm{ran}\,(f, \boldsymbol{X}) := \{\, f(x) \mid x \in \boldsymbol{X} \,\}$$

Для непрерывной функции $f : \mathbb{R}^n \supseteq \boldsymbol{X} \to \mathbb{R}^1$

$$\mathrm{ran}\,(f, \boldsymbol{X}) \;=\; \Big[\, \min_{x\in\boldsymbol{X}} f(x),\; \max_{x\in\boldsymbol{X}} f(x) \,\Big].$$

...другая переформулировка задач оптимизации

и математического программирования

Точность интервального оценивания

— критическим образом зависит также от ширины бруса оценивания

Для естественного интервального расширения

$$\mathrm{dist}\Big(\,\boldsymbol{f}_{\natural}(\boldsymbol{x}), \mathrm{ran}\,(f, \boldsymbol{x})\,\Big) \;\leq\; C\,\|\mathrm{wid}\,\boldsymbol{x}\|$$

Для других способов интервального оценивания

— более высокий порядок точности,

но в целом ситуация аналогична

Сложна сама задача оценивания области значений!

Задача оценивания области значений функций NP-трудна

= *труднорешаемая*,

т.е. для её решения требуются не менее чем экспоненциальные в зависимости от размера задачи трудозатраты

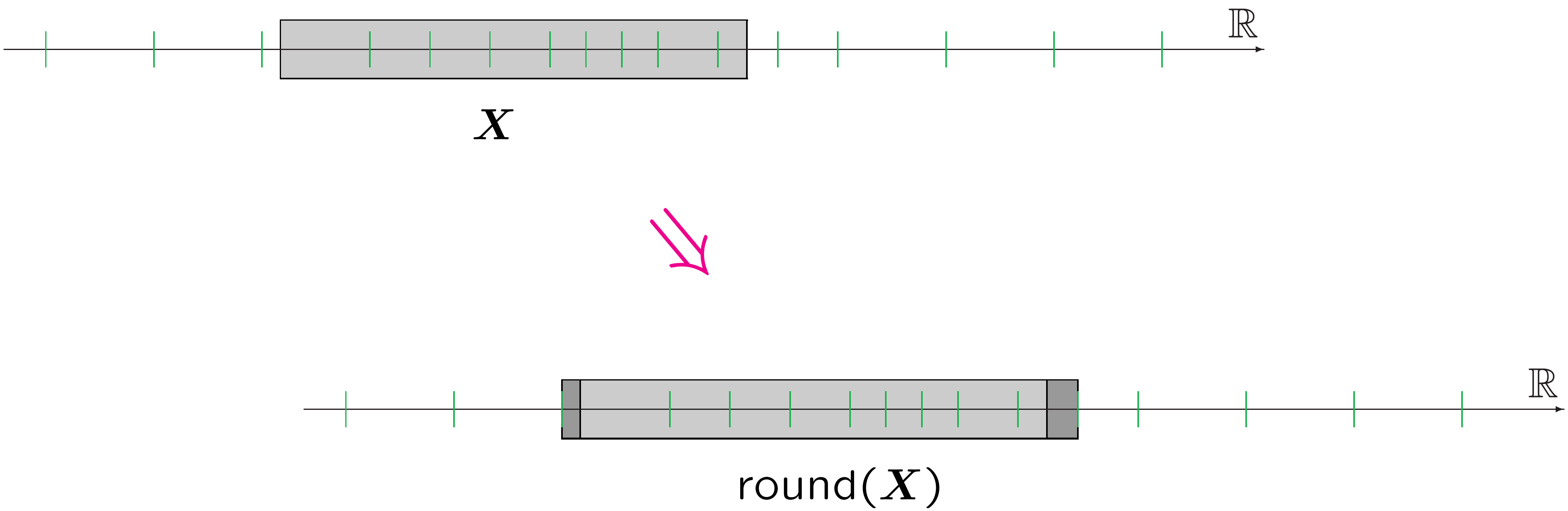
Гаганов А. А.
О сложности вычисления интервала значений полинома от многих переменных // *Кибернетика*. – 1985. – № 4. – С. 6–8.

Kreinovich V., Kearfott R.B.
Beyond convex? Global optimization is feasible only for convex objective functions: a theorem // Journal of Global Optimization. – 2005. – Vol. 33, No. 4. – P. 617–624.

Машинная интервальная арифметика

— классическая интервальная арифметика

+ внешнее направленное округление



— инструмент доказательных интервальных вычислений

II. Доказательное решение систем линейных алгебраических уравнений

Линейные системы уравнений

$$\left\{\begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad \vdots \qquad\qquad\quad \ddots \qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n, \end{array}\right.$$

или, кратко,

$$Ax = b$$

с $n \times n$-матрицей $A = (\,a_{ij})$ и n-вектором $b = (\,b_i)$.

Задача доказательного решения систем линейных уравнений

Найти решение системы уравнений $Ax = b$

и определить его оценку погрешности

или

Найти решение системы уравнений $Ax = b$, указав

для него двусторонние гарантированные оценки

— задача доказательного решения
систем линейных алгебраических уравнений

Интервальные линейные системы уравнений

$$\left\{ \begin{array}{ccccc} \boldsymbol{a}_{11}x_1 + \boldsymbol{a}_{12}x_2 + & \ldots & + \boldsymbol{a}_{1n}x_n & = & \boldsymbol{b}_1, \\ \boldsymbol{a}_{21}x_1 + \boldsymbol{a}_{22}x_2 + & \ldots & + \boldsymbol{a}_{2n}x_n & = & \boldsymbol{b}_2, \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ \boldsymbol{a}_{n1}x_1 + \boldsymbol{a}_{n2}x_2 + & \ldots & + \boldsymbol{a}_{nn}x_n & = & \boldsymbol{b}_n, \end{array} \right.$$

или, кратко,

$$\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$$

с интервальными $n \times n$-матрицей $\boldsymbol{A} = (\,\boldsymbol{a}_{ij})$ и n-вектором $\boldsymbol{b} = (\,\boldsymbol{b}_i)$.

Интервальные линейные системы уравнений

$$\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$$

— семейство точечных линейных систем $Ax = b$ с $A \in \boldsymbol{A}$ и $b \in \boldsymbol{b}$.

Множество решений

интервальной линейной системы уравнений —

$$\Xi(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}) \;=\; \Bigl\{\, x \in \mathbb{R}^n \mid (\exists\, A \in \boldsymbol{A})(\exists\, b \in \boldsymbol{b})(\, Ax = b\,)\,\Bigr\}$$

Также *объединённое множество решений* ...

Интервальные линейные системы уравнений

Зачем интервальные линейные системы уравнений? . . .

Интервальные линейные системы уравнений

Зачем интервальные линейные системы уравнений? . . .

Преобразования, которые выполняем с системой уравнений
в процессе её решения, должны сохранять доказательность

$$\Downarrow$$

выполняем преобразования в машинной интервальной арифметике

$$\Downarrow$$

вместо точечной СЛАУ получаем интервальную СЛАУ

Пошаговый подход к оцениванию погрешностей

— 1) разбиваем алгоритм решения на «элементарные шаги»,

2) оцениваем погрешности на каждом шаге вычислений.

Полная погрешность = сумма погрешностей отдельных шагов

«Элементарные шаги»?

Пошаговый подход к оцениванию погрешностей

— 1) разбиваем алгоритм решения на «элементарные шаги»,

2) оцениваем погрешности на каждом шаге вычислений.

Полная погрешность = сумма погрешностей отдельных шагов

«Элементарные шаги»

— от отдельных арифметических операций до крупных блоков

... неявно привязываемся к конкретному алгоритму решения

Пошаговый подход к оцениванию погрешностей

— реальные результаты не очень хороши,
оценки погрешностей оказываются завышенными на порядки

Особенно неудовлетворительные результаты —
при разбиении алгоритма на отдельные арифметические операции
и применении интервальной арифметики ...

ПОЧЕМУ? ...

Классическая интервальная арифметика $\mathbb{IR}$

— алгебраическая система, образованная интервалами $\boldsymbol{x} = [\underline{\boldsymbol{x}}, \overline{\boldsymbol{x}}] \subset \mathbb{R}$ так, что

$$\boldsymbol{x} \star \boldsymbol{y} \;=\; \bigl\{\, x \star y \;\mid\; x \in \boldsymbol{x},\, y \in \boldsymbol{y} \,\bigr\} \qquad \text{для} \qquad \star \in \{\,+\,,-\,,\cdot\,,/\,\}$$

$$\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \;=\; \bigl[\, \underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{y}},\; \overline{\boldsymbol{x}} + \overline{\boldsymbol{y}} \,\bigr]$$

$$\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} \;=\; \bigl[\, \underline{\boldsymbol{x}} - \overline{\boldsymbol{y}},\; \overline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{y}} \,\bigr]$$

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y} \;=\; \bigl[\, \min\{\underline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \underline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}\},\; \max\{\underline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \underline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}\} \,\bigr]$$

$$\boldsymbol{x} / \boldsymbol{y} \;=\; \boldsymbol{x} \cdot \bigl[\, 1/\overline{\boldsymbol{y}},\; 1/\underline{\boldsymbol{y}} \,\bigr] \qquad \text{для} \quad \boldsymbol{y} \not\ni 0$$

Независимые и связанные интервальные величины

Если заданы переменная x и интервал её изменения $\boldsymbol{X}$, то будем говорить, что определена *интервальная величина* $\lfloor x, \boldsymbol{X} \rceil$.

Можно также писать $x \in \boldsymbol{X}$

Интервальные величины $x_1 \in \boldsymbol{X}_1$, $x_2 \in \boldsymbol{X}_2$, . . . , $x_n \in \boldsymbol{X}_n$ — *независимые*, если кортеж из соответствующих переменных $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ принимает любые значения из бруса

$$\boldsymbol{X}_1 \times \boldsymbol{X}_2 \times \ldots \times \boldsymbol{X}_n.$$

Иначе интервальные величины называются *связанными* или *зависимыми*.

Диаграммы связанности

— чертежи, изображающие множества всевозможных значений кортежа $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ на фоне бруса $\boldsymbol{X}_1 \times \boldsymbol{X}_2 \times \ldots \times \boldsymbol{X}_n$.

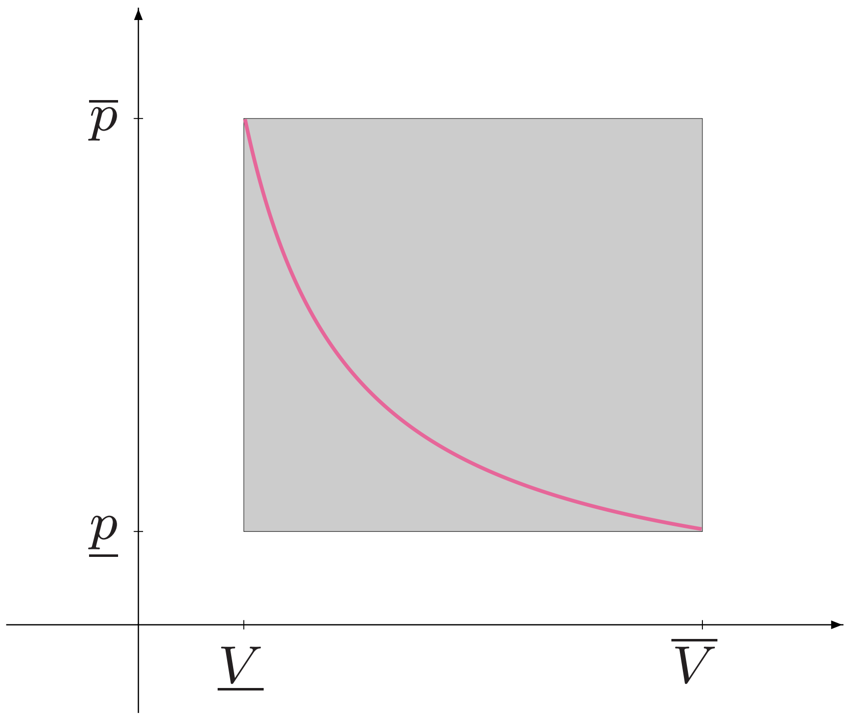


Диаграмма связанности интервальных величин $p \in [\underline{p}, \overline{p}]$ и $V \in [\underline{V}, \overline{V}]$, подчиняющихся закону Бойля-Мариотта $pV = \mathrm{const}$

Независимые и связанные интервальные величины

Важнейший источник возникновения связанности

— общее происхождение интервальных величин

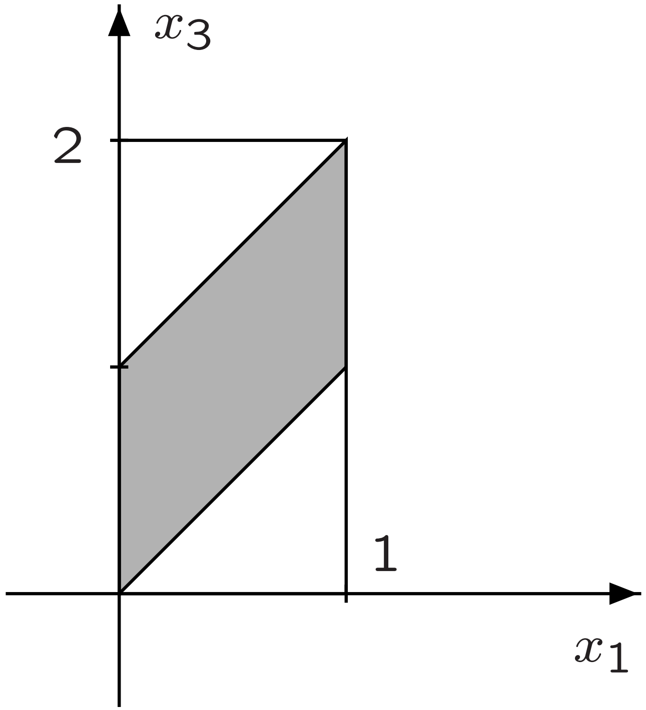
Пример

Пусть $x_1 \in [0, 1]$ и $x_2 \in [0, 1]$ — независимые интервальные величины, а $x_3 = x_1 + x_2$.

Тогда интервальная величина $x_3 \in [0, 2]$

является связанной как с x_1, так и с x_2.

Независимые и связанные интервальные величины



Хотя x_3 может принимать любые значения из $[0, 2]$,
совместная область значений переменных x_1 и x_3
не заполняет всего бруса $[0, 1] \times [0, 2]$.

Независимые и связанные интервальные величины

Если вычтем $\lfloor x_2, [0,1] \rceil$ из $\lfloor x_3, [0,2] \rceil$, то что получим?

Вообще говоря,

$$x_3 - x_2 = (x_1 + x_2) - x_2 = x_1.$$

Но по правилам классической интервальной арифметики имеем

$$[0,2] - [0,1] = [-1,2],$$

что не равно исходному интервалу $[0,1] \ni x_1$

Эффект связанности (зависимости) интервальных величин

Возникновение связанности промежуточных интервальных величин при интервальном оценивании выражений, получающееся как следствие их общего присхождения от исходных переменных, называют *эффектом связанности (зависимости)*.

Он является одной из главных причин огрубления интервальных оценок, так как интервальная арифметика предназначена для работы с <u>независимыми</u> интервальными величинами.

Причина неудачности пошагового подхода

— *быстрое приобретение связанности переменных,*

участвующих в вычислениях

Общий факт, верный для пошагового подхода вообще

Качество оценок, получаемых с помощью пошагового подхода, существенно зависит от алгоритма, и «хороший» в обычном смысле алгоритм не обязательно хорош при оценивании погрешностей.

Апостериорное оценивание погрешности

— альтернативный подход, при котором оцениваем погрешность окончательного результата уже после его получения

Более точно, разделяем

- получение приближённого решения,
- получение двусторонней оценки решения,
- установление доказательности оценки решения.

Апостериорное оценивание погрешности

- Каким образом можно получать двустороннюю оценку решения?

- Как можно устанавливать доказательность двусторонних оценок?

Апостериорное оценивание погрешности

- Каким образом можно получать двусторонную оценку решения?

  — из известного приближённого решения

- Как можно устанавливать доказательность двусторонних оценок?

  — с помощью некоторых результатов Анализа

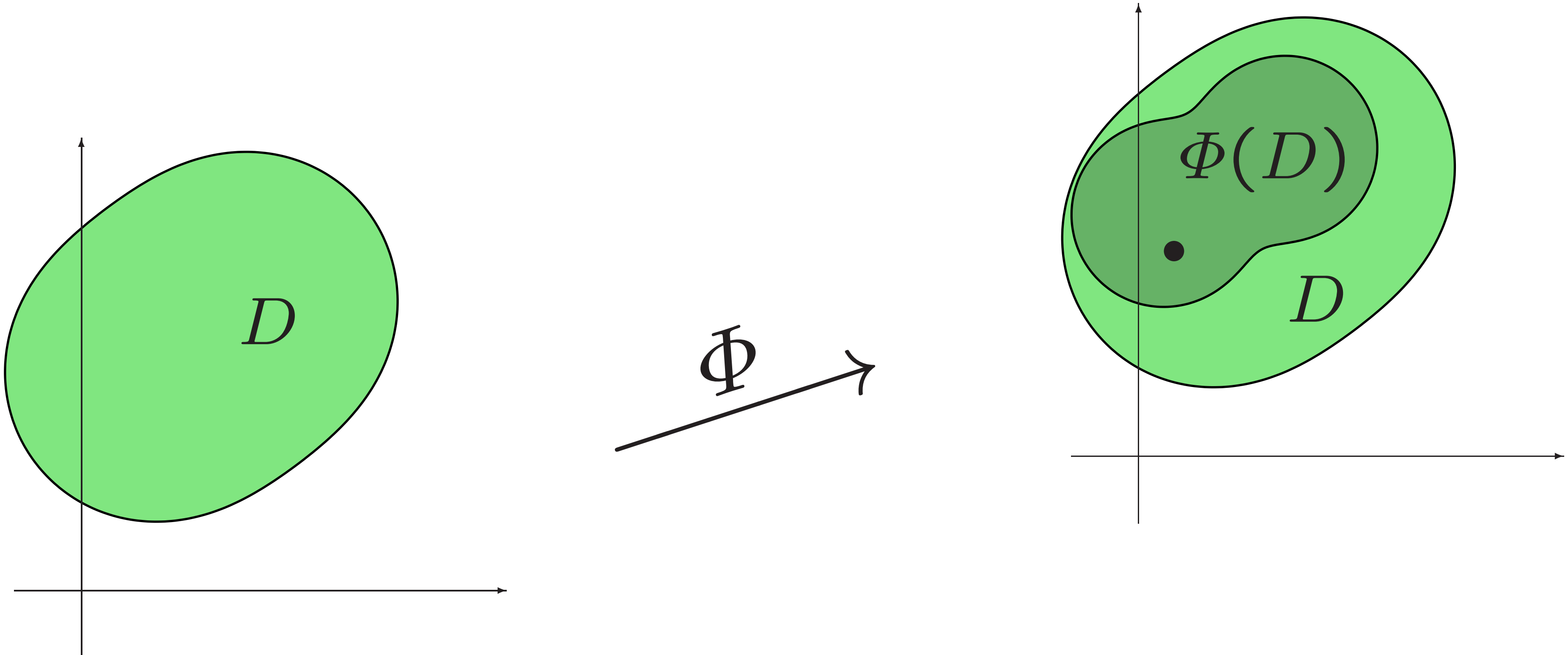
Теорема Брауэра о неподвижной точке

Пусть D — выпуклый компакт в $\mathbb{R}^n$. Если непрерывное отображение $\Phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ переводит D в себя, т.е.

$$\Phi(D) \ \subseteq \ D,$$

то оно имеет на D неподвижную точку $x^\star$, такую что

$$x^\star \ = \ \Phi(\, x^\star).$$



Теорема Брауэра о неподвижной точке

Трёхмерный случай — П. Боль в 1904 году

Общий случай — Ж. Адамар и Л. Э. Я. Брауэр в 1910–1912 годах

Лёйтзен Эгберт Ян Брауэр (1881–1966)
— голландский математик

Связь теоремы Брауэра и решения уравнений

Система уравнений

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \\ F_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \\ \vdots \quad \ddots \quad \vdots & & \vdots \\ F_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \end{cases}$$

или, кратко,

$$F(x) = 0,$$

где $F(x) = \Big(F_1(x), F_2(x), \ldots, F_n(x)\Big)^\top$, $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$, всегда может быть переписана в рекуррентной форме

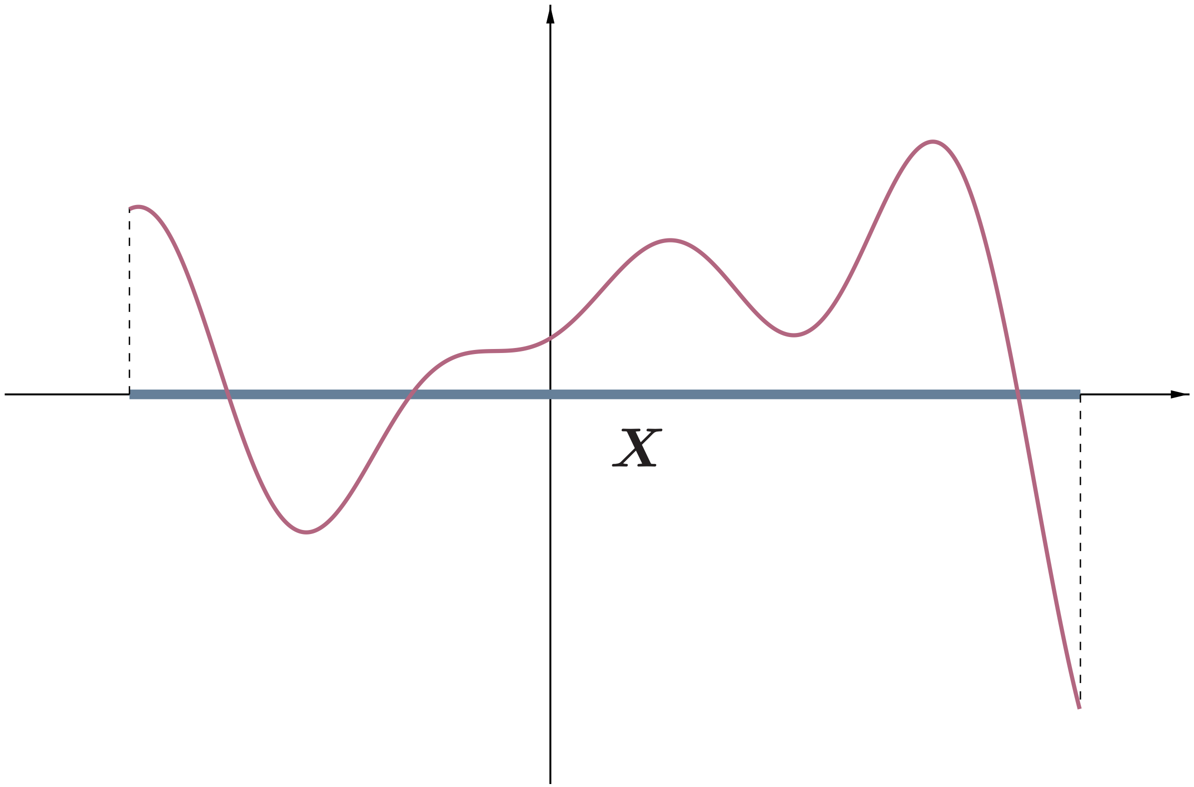
$$x = G(x),$$

где $G(x) = I - \Lambda F(x)$, Λ — неособенная $n \times n$-матрица.

Теорема Больцано-Коши

Пусть функция $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ непрерывна на интервале $\boldsymbol{X} \subset \mathbb{R}$ и на его концах принимает значения разных знаков.

Тогда внутри интервала существует нуль функции F, т.е. точка $\tilde{x}$, в которой $F(\tilde{x}) = 0$.



Теорема Миранды

— обобщение теоремы Больцано-Коши

C. Miranda
Un' osservatione su un teorema di Brouwer
– Bollet. Unione Mat. Ital. Serie II.
1940 год, том 3, стр. 5–7.

Карло Миранда (1912–1982) — итальянский математик

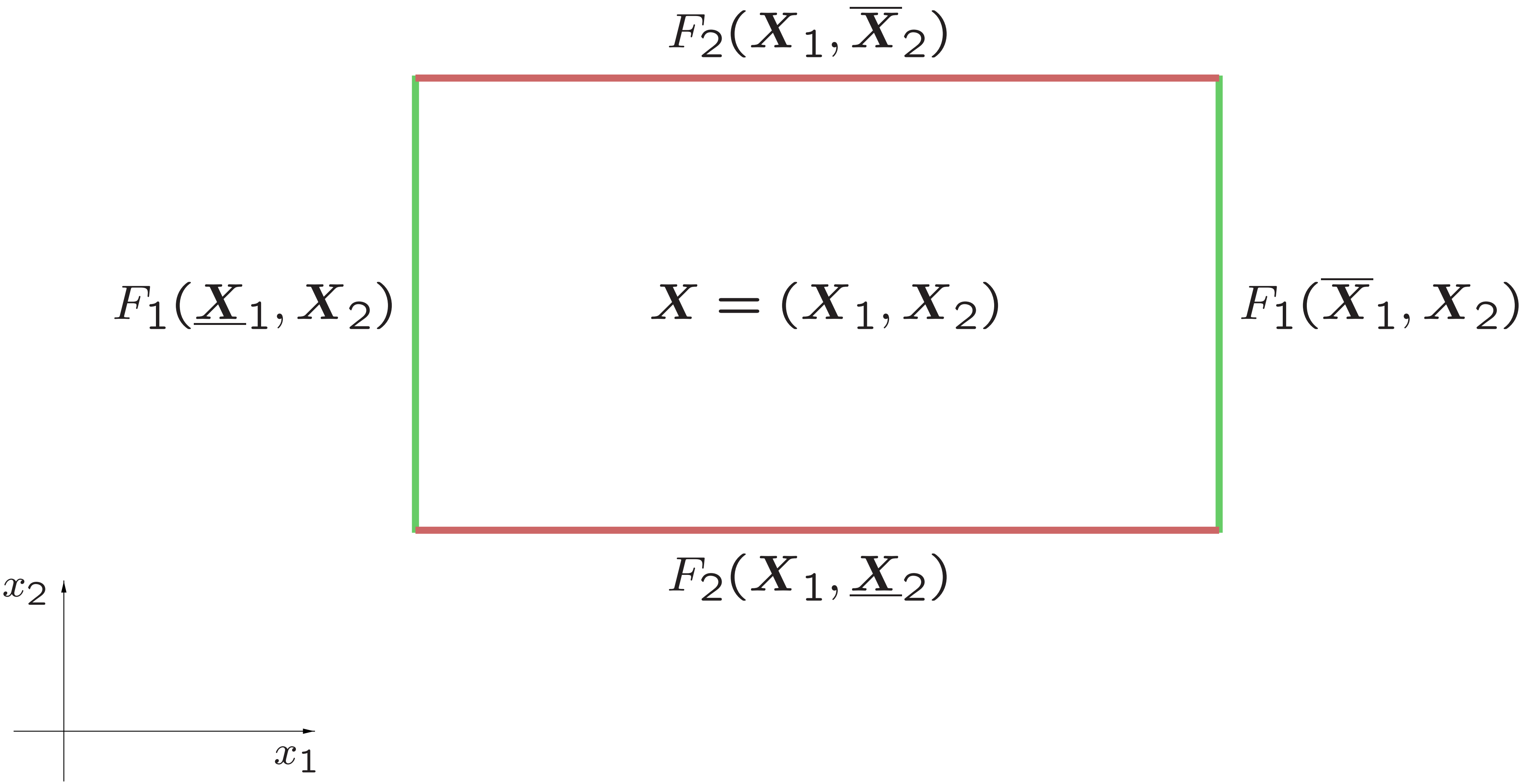
Теорема Миранды

Пусть $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $F(x) = \Big(F_1(x), F_2(x), \ldots, F_n(x)\Big)^\top$ — функция, непрерывная на брусе $\boldsymbol{X} \subset \mathbb{R}^n$ со сторонами, параллельными координатным осям, и для каждого $i = 1, 2, \ldots, n$ области значений компонент F_i на i-ых противоположных гранях бруса $\boldsymbol{X}$, имеют разные знаки:

$$F_i(\boldsymbol{X}_1, \ldots, \boldsymbol{X}_{i-1}, \underline{\boldsymbol{X}}_i, \boldsymbol{X}_{i+1}, \ldots, \boldsymbol{X}_n) \cdot F_i(\boldsymbol{X}_1, \ldots, \boldsymbol{X}_{i-1}, \overline{\boldsymbol{X}}_i, \boldsymbol{X}_{i+1}, \ldots, \boldsymbol{X}_n) \ < \ 0.$$

Тогда на брусе $\boldsymbol{X}$ существует нуль функции F, т. е. точка $\tilde{x}$, в которой $F(\tilde{x}) = 0$.

Теорема Миранды



Теорема Миранды

Особенности применения —

- специальная форма множества, на котором исследуется существование решения — брус в $\mathbb{R}^n$ с рёбрами, параллельными координатным осям, т. е. интервальный вектор,

- необходимость оценивать область значений функции на брусах в $\mathbb{R}^{n-1}$.

Апостериорное оценивание погрешности

Для построенного некоторым образом бруса $\boldsymbol{X}$

1) приводим исходную СЛАУ к рекуррентному виду

$$Ax = b \qquad \Rightarrow \qquad x = (I - \Lambda A)\,x + \Lambda\, b,$$

где Λ — предобуславливающая $n \times n$-матрица,

2) проверяем выполнение условия

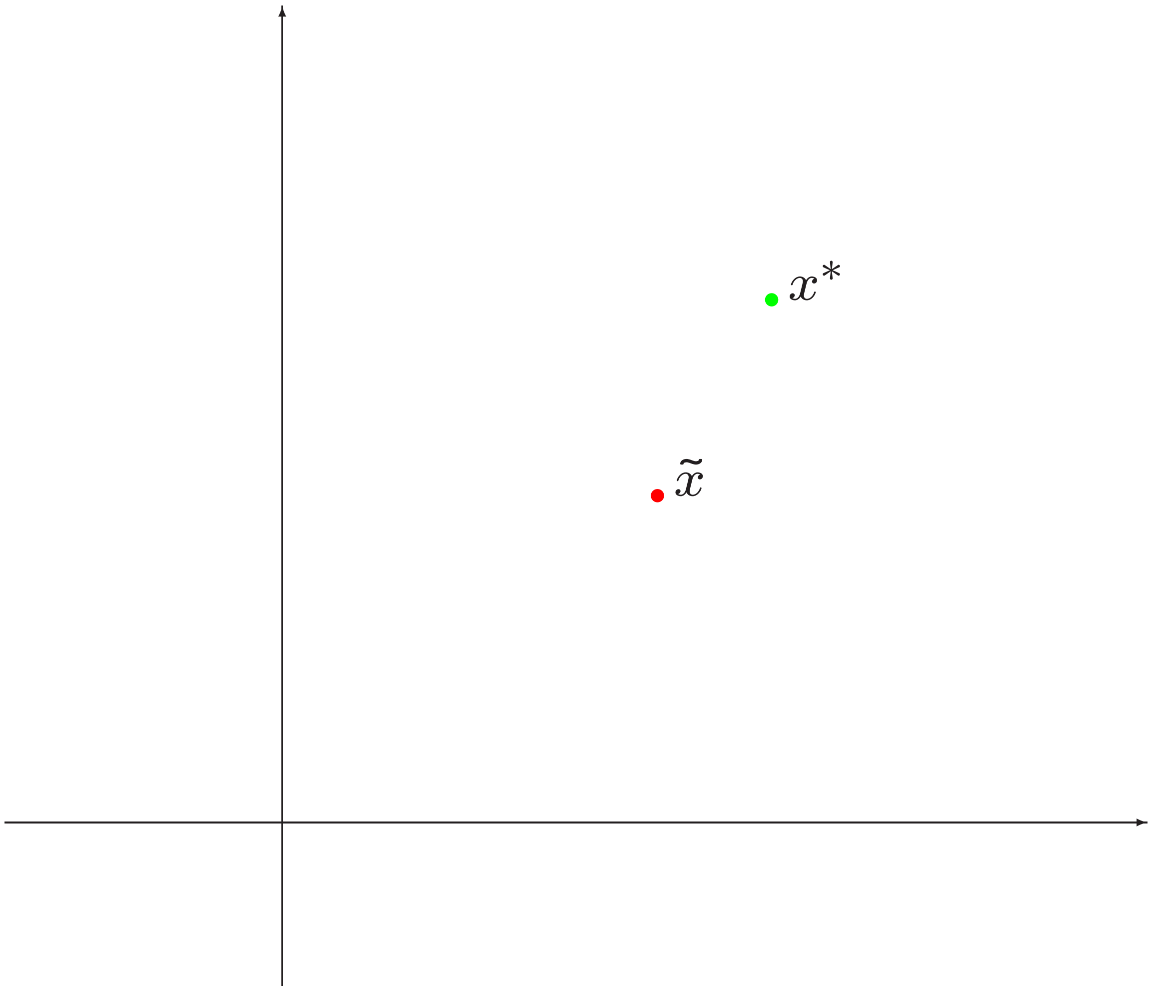
$$(I - \Lambda A)\,\boldsymbol{X} + \Lambda\, b \;\subseteq\; \boldsymbol{X}.$$

Если включение выполнено, то по теореме Брауэра $\boldsymbol{X}$ содержит решение СЛАУ.

Р. Кравчик (1969), Р.Е. Мур (1977), . . .

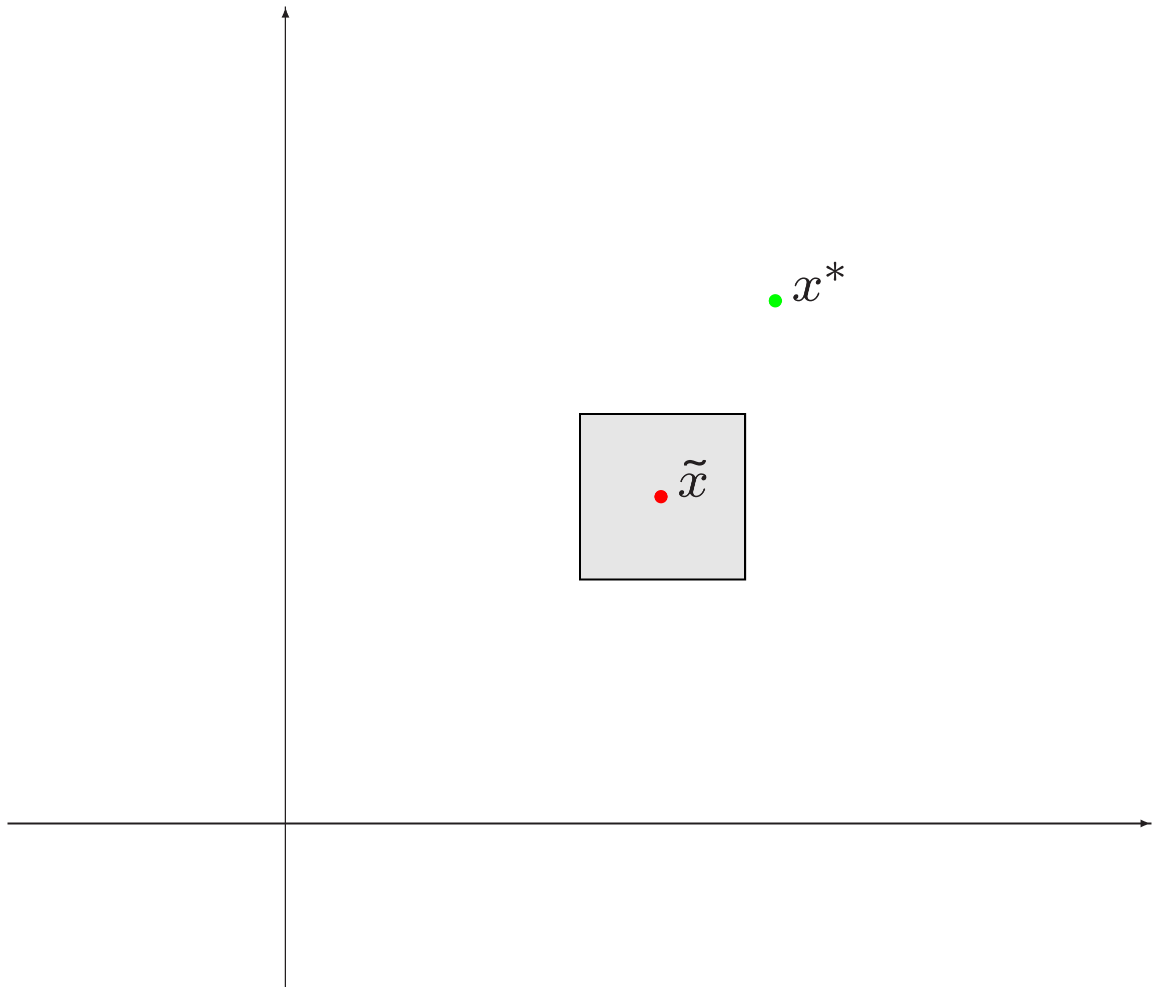
Как строить брус интервальной оценки?

Если известно приближение $\tilde{x}$ к решению x^*, то можно раздуть $\tilde{x}$ до бруса



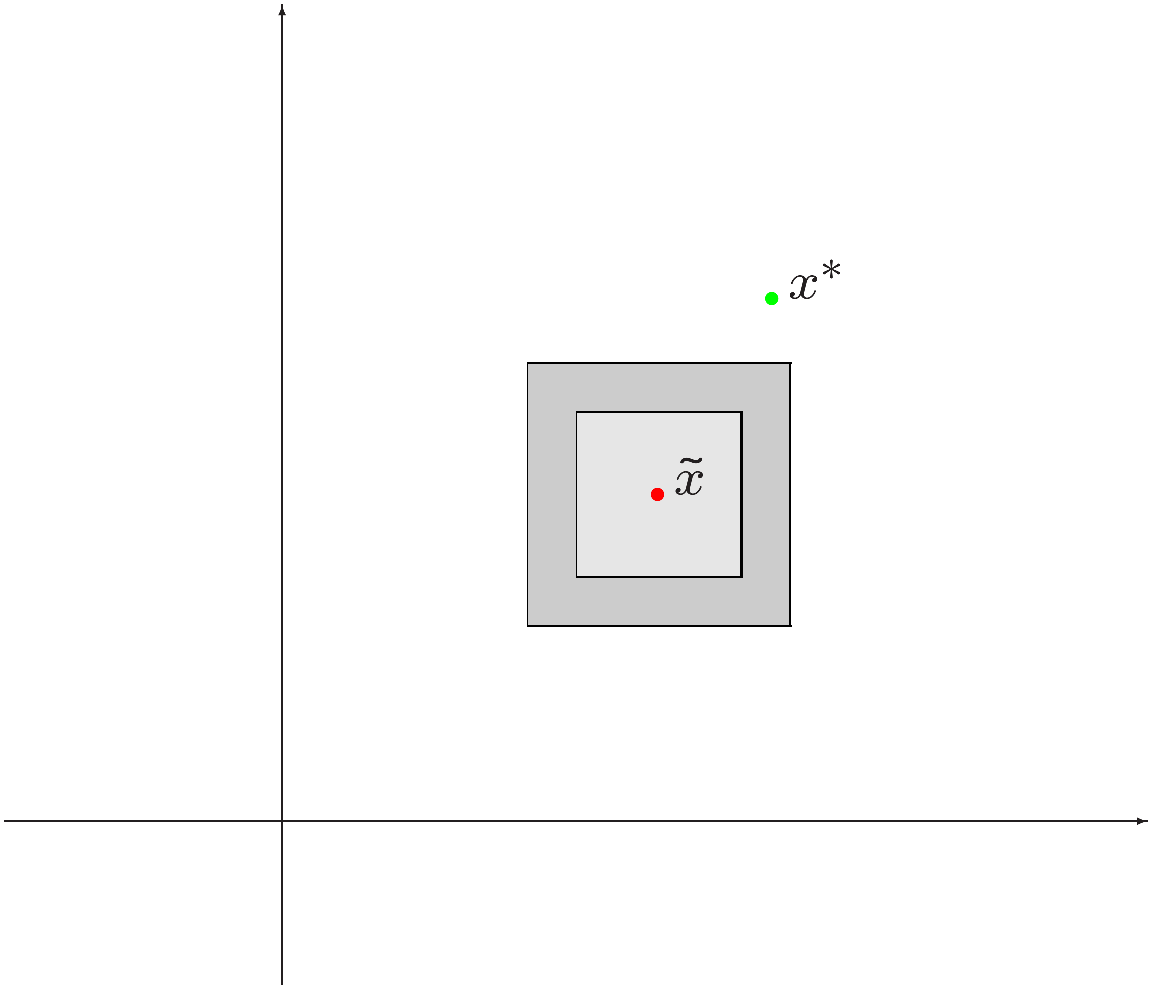
Как строить брус интервальной оценки?

Если известно приближение $\tilde{x}$ к решению x^*, то можно раздуть $\tilde{x}$ до бруса



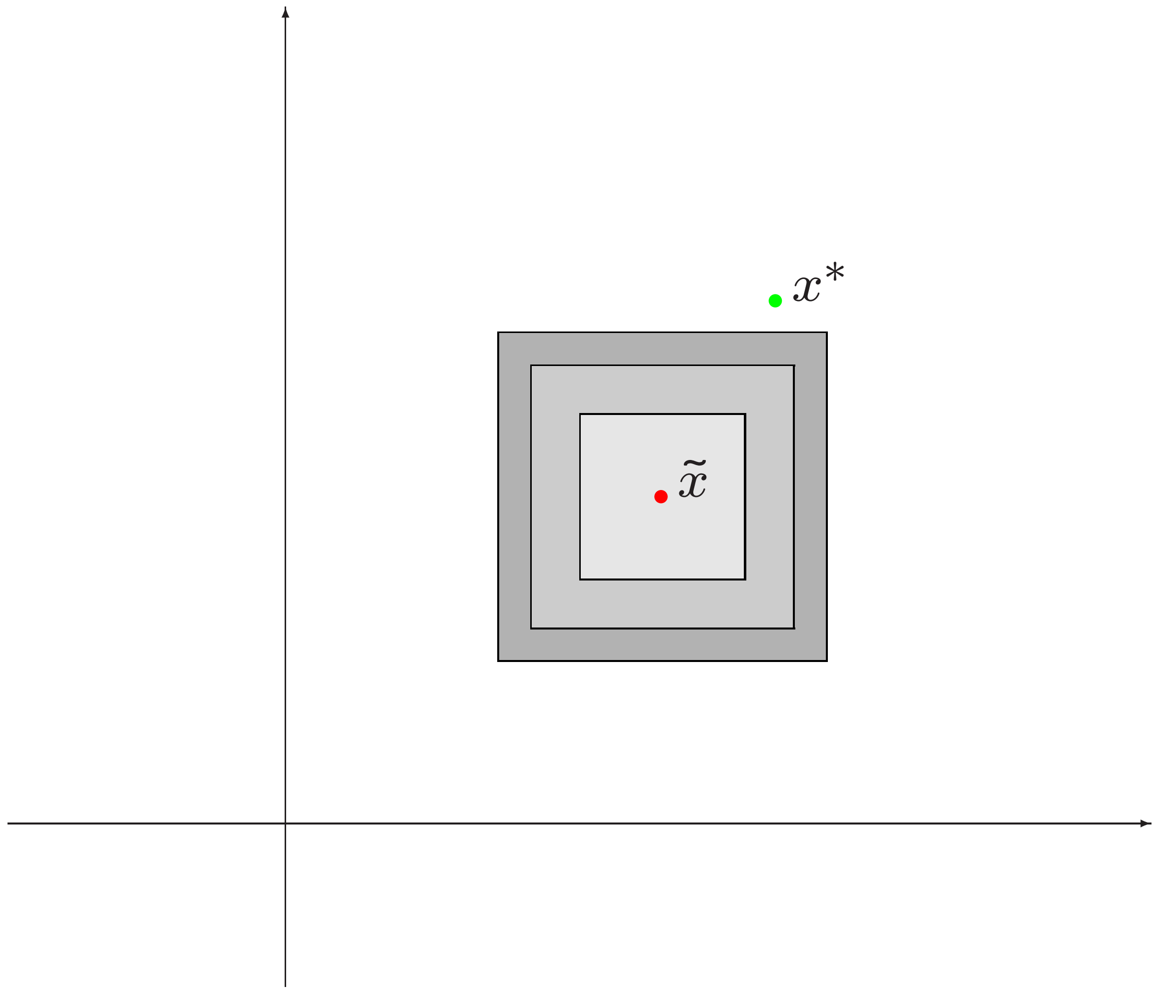
Как строить брус интервальной оценки?

Если известно приближение $\tilde{x}$ к решению x^*, то можно раздуть $\tilde{x}$ до бруса



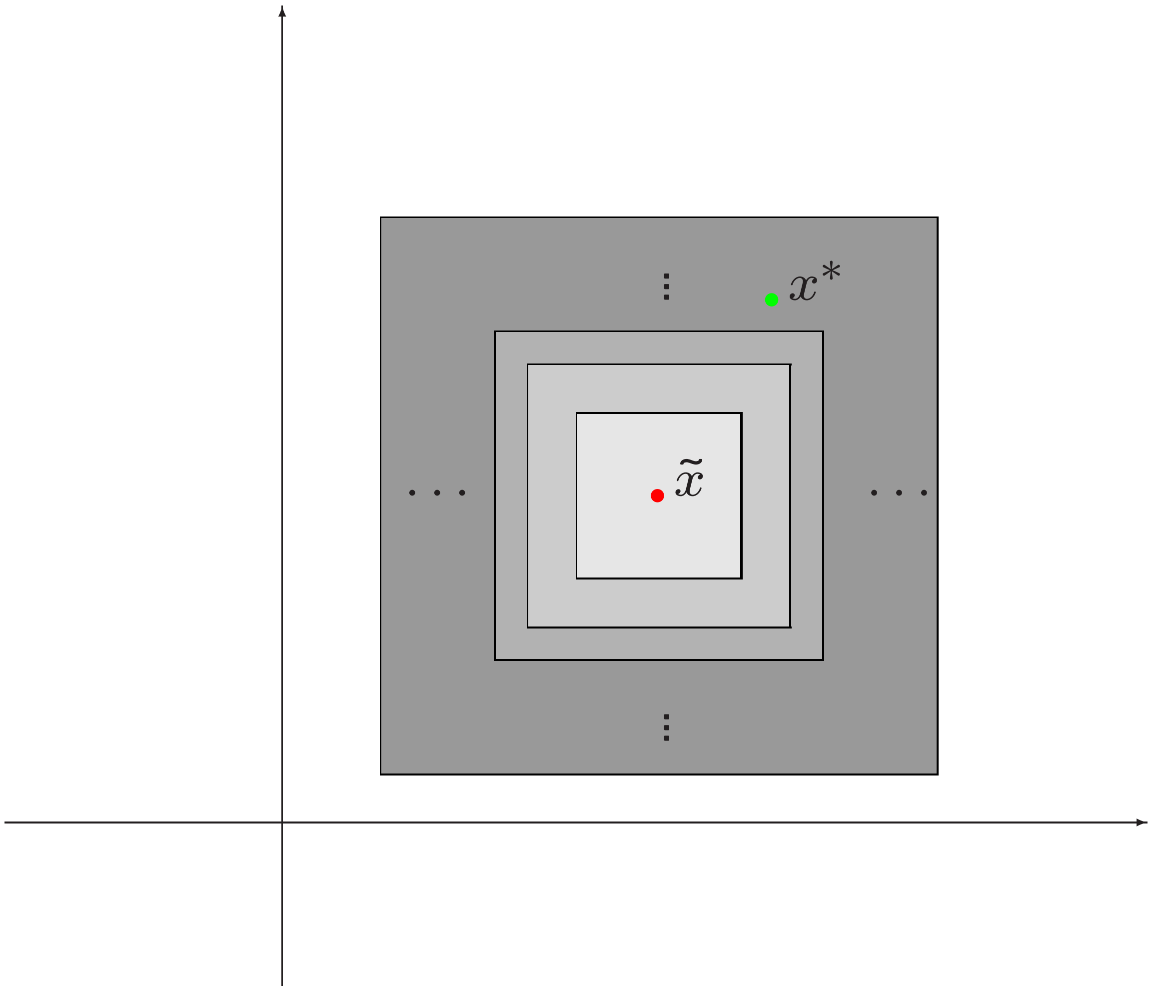
Как строить брус интервальной оценки?

Если известно приближение $\tilde{x}$ к решению x^*, то можно раздуть $\tilde{x}$ до бруса



Как строить брус интервальной оценки?

Если известно приближение $\tilde{x}$ к решению x^*, то можно раздуть $\tilde{x}$ до бруса



Апостериорное оценивание: алгоритм Румпа

Представленные выше идеи +

1) Предобуславливающая матрица $\Lambda \approx A^{-1}$, чтобы сделать как можно меньшей норму $(I - \Lambda A)$.

2) Для построения нужного бруса используется

$$\varepsilon\text{-раздутие}\,(\boldsymbol{X}) \;=\; \boldsymbol{X}\cdot[1-\varepsilon, 1+\varepsilon] + [-\delta, \delta]\,,$$

где эмпирически подобрано $\varepsilon = 0.1$, $\delta = 10^{-20}$.

3) Если известно приближение к решению, то ищем его поправку — решение линейной системы $Ax = b - A\tilde{x}$.

Verified solution of linear systems

Зигфрид Румп
(род. 1955)

Siegfried M. Rump
Institute of Reliable Computing
Hamburg University of Technology
Hamburg, Germany

Апостериорное оценивание: алгоритм Румпа

$\boldsymbol{z} \leftarrow \Lambda(b - A\tilde{x})$;   *Успех* $\leftarrow$ `ложь` ;

`цикл по` $k = 1$ `до` *КоличествоПопыток*

  $\boldsymbol{Y} \leftarrow \varepsilon$-раздутие $(\boldsymbol{X})$;

  $\boldsymbol{X} \leftarrow \boldsymbol{z} + (I - \Lambda A)\,\boldsymbol{Y}$;

  `если` ($\boldsymbol{X} \subset \operatorname{int} \boldsymbol{Y}$)

    Успех $\leftarrow$ `истина` ;

    `выход из цикла`

  `конец если`

`конец цикла`

`если` *Успех*

  брус $(\tilde{x} + \boldsymbol{X})$ содержит решение СЛАУ

`иначе`

  доказательных оценок найти не удалось

`конец если`

Апостериорное оценивание

Пакет INTLAB — «интервальное расширение» Matlab'a

Создан и развивается З. Румпом (Университет Гамбурга, Германия):

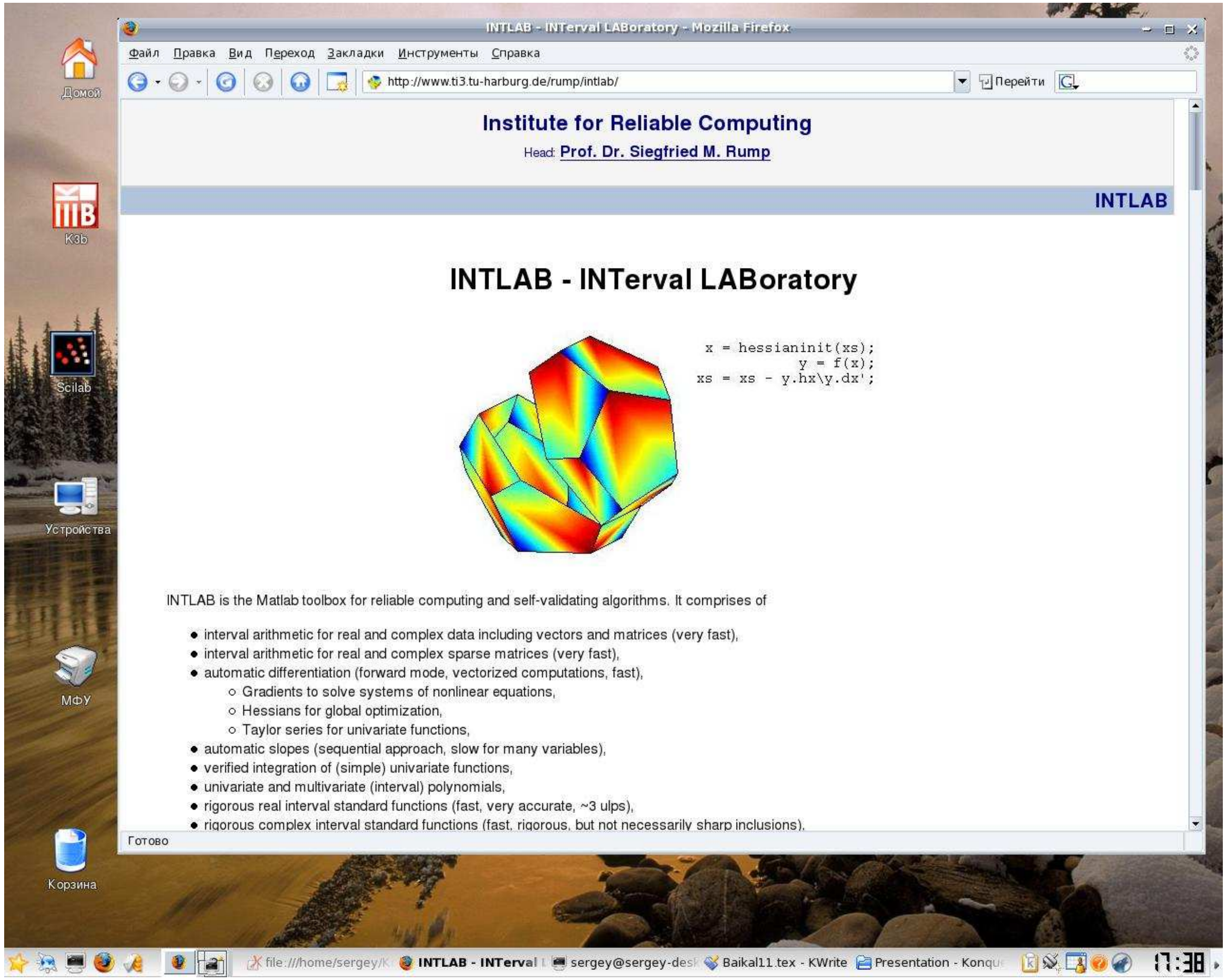
в 1998 году — версия 1.0
сегодня — версия 7.1

Фактически — среда программирования и набор инструментов для создания интервальных алгоритмов решения разнообразных задач.

Процедура `verifylss` — высокоточное доказательное решение СЛАУ с помощью метода Румпа

Пакет INTLAB

http://www.ti3.tu-harburg.de/rump/intlab



Гильбертовы матрицы

$$H_n = (h_{ij}), \qquad h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \qquad i,j = 1,2,\ldots,n$$

— естественный пример очень плохо обусловленной матрицы

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \cdots & \frac{1}{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{cond}_2(H_n) \approx 10^{1.35n}$$

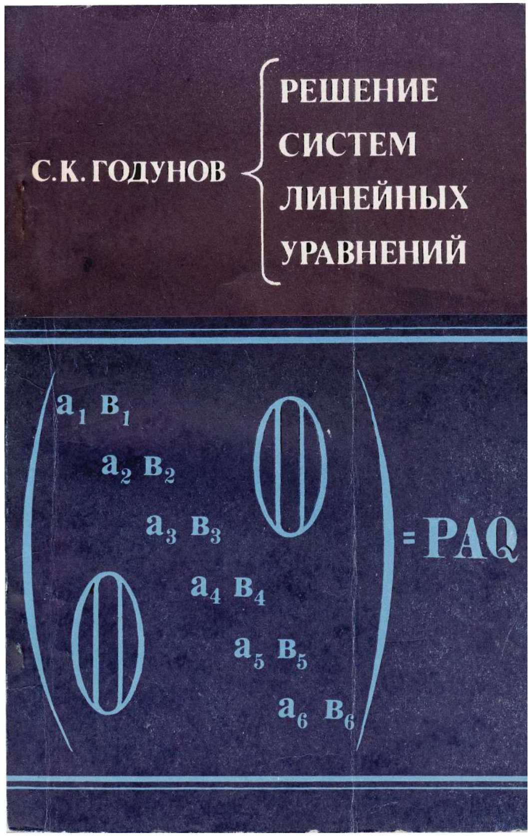
Решение СЛАУ с гильбертовой матрицей в INTLAB'е

```
>> for i=1:10, for j=1:10, H(i,j) = intval(1./(i+j-1)); end, end
>> b = [ 1; -2; 3; -4; 5; -6; 7; -8; 9; -10];
>> cond(mid(H))
ans =
    1.602467527403655e+013
>> verifylss(H,b)
intval ans =
  1.0e+013 *
   0.0000239_______
  -0.002079________
   0.0445__________
  -0.407___________
   1.947___________
  -5.37____________
   8.83____________
  -8.56____________
   4.50____________
  -0.992___________
>>
```

Решение СЛАУ с гильбертовой матрицей в INTLAB'е

```
>> for i=1:12, for j=1:12, H(i,j) = intval(1./(i+j-1)); end, end
>> b = [ 1, -2, 3, -4, 5, -6, 7, -8, 9, -10, 11, -12]; b = b';
>> verifylss(H,b)
intval ans =
  1.0e+017 *
[  -0.00627841374272,   0.00627862413417]
[  -0.01041164980544,   0.01038466102290]
[   0.00030184748115,   0.00055493647459]
[  -0.00766103372656,  -0.00410092654501]
[   0.03079250792112,   0.05596490506793]
[  -0.24456367534290,  -0.13860252723661]
[   0.38717115199470,   0.68495145769342]
[  -1.25614714285441,  -0.69199279860096]
[   0.82552501425942,   1.46539177630887]
[  -1.07916417963333,  -0.60313989796688]
[   0.24886898912012,   0.45215832828011]
[  -0.08189774283253,  -0.04466098798645]
>> cond(mid(H))
ans =
    1.699489972232897e+016
>>
```

Подход С.К. Годунова



1) двухдиагонализация СЛАУ ортогональными преобразованиями

   оценка ошибок
   на каждом шаге приведения

2) обратный ход

   оценка ошибок
   через число обусловленности

Подход С.К. Годунова

Этапы анализа погрешностей:

Машинная арифметика, погрешности бинарных операций.

Машинный квадратный корень, его погрешность.

Точность скалярного произведения. Умножение матрицы на вектор.

Оператор отражения Хаусхолдера, погрешность его вычисления.

Погрешность последовательного применения преобразований отражения.

Алгоритм двухдиагонализации матрицы и его точность.

...

при этом существенно используется ряд условий на СЛАУ,
машинную арифметику ЭВМ,
ограничение на обусловленность

Подход С.К. Годунова

Диагноз:

Предельно развитый вариант

общего пошагового подхода к оценке погрешностей

со всеми вытекающими . . .

. . . хотя «элементарными шагами», для которых выполняется аккуратное оценивание погрешностей, являются крупные блоки алгоритма, в отличие от «наивного» интервального подхода.

Можно ли улучшить Румпа?. . .

1) экономим на приведении СЛАУ к рекуррентному виду требуемому тестом Кравчика-Мура

    — меньше интервальных операций и округлений

2) вместо всего бруса исследуем лишь его границу

    — основываемся на теореме Миранды, а не Брауэра

3) вводим в алгоритм «обратную связь»

    — алгоритм Румпа пассивен

Итоги и выводы

- Интервальные методы — средство для корректного учёта различных ошибок при вычислениях на цифровых ЭВМ.

  Их целесообразно применять в комбинации с другими инструментами.

- Весьма перспективными являются интервальные методы апостериорного оценивания решений уравненний, в частности, метод Румпа (реализованный в INTLAB'е) и методы на основе теоремы Миранды.

Спасибо за внимание