

Сравнение методов интервального анализа и стандартных статистических методов в задаче оценивания экспериментальных данных с неопределённостью

С. И. Кумков^{1,2}, Л. Жолен³

¹Институт математики и механики им. Н. Н. Красовского, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия, e-mail: kumkov@imm.uran.ru

³Высшая национальная школа передовых технологий, Брест, Бретань, Франция, e-mail: luc.jaulin@ensta-bretagne.fr

Применены процедуры интервального анализа для оценивания параметров экспериментального химического процесса в условиях зашумления и неопределённости вероятностных характеристик погрешностей измерений для короткой выборки результатов измерений. Использование интервального анализа позволяет точно описать множество допустимых значений оцениваемых параметров, что необходимо для правильной организации технологического процесса путём корректного выбора его параметров. Рассчитаны приближённые оценки параметров на основе формального применения статистического подхода и показано, что в рассматриваемом случае стандартный статистический подход даёт практически бессмысленные оценки параметров исследуемого процесса.

Ключевые слова: интервальный анализ, статистические методы, зашумлённая информация, условия неопределённости, параметры процесса, оценивание.

В ряде случаев применение стандартных методов математической статистики затруднено и невозможно точно определять доверительные интервалы измеряемых параметров исследуемого процесса. В таких условиях именно методы интервального анализа позволяют получать более надёжные результаты и точно описывать множество допустимых значений оцениваемых параметров. Знание такого множества весьма актуально для правильной организации технологического процесса. В настоящей работе процедуры интервального анализа использованы для обработки данных конкретного экспериментального химического процесса.

Описание эксперимента. Рассмотрим обработку экспериментальных данных – выборки результатов измерений концентрации некоторого реагента в каталитическом химическом процессе [1]:

$$\{t_i, s_i\}, i=1, \dots, 4: (0; 1), (18; 0,964), (40; 0,974), (60; 0,972), \quad (1)$$

где t_i – момент измерения, мин; s_i – результат измерения текущего значения концентрации окисленного реагента, мг/мл.

По теоретической информации о динамике изменения концентрации $S(t)$ окисленного реагента и затрат катализатора известно следующее описание модели процесса [1]:

$$S(t, A, \alpha, B) = A \exp(\alpha t) + B, \quad t \in [0; T_{\text{наб}}], \quad (2)$$

где t – независимый аргумент (время); $[0; T_{\text{наб}}]$ – интервал наблюдения процесса; $A > 0$ – начальное значение концентрации реагента; $\alpha < 0$ – коэффициент убывания концентрации реагента; $B > 0$ – фоновая составляющая процесса.

Выборка результатов фатально короткая: $i=1, \dots, 4$. Моменты t_i измерений полагают известными точно, но резуль-

таты измерений s_i – зашумлены погрешностями измерений. Суммарная погрешность измерения неизвестного истинного значения $S(t_i)$ концентрации содержит как малую приборную погрешность, так и возможную (хаотическую) составляющую. Вероятностные характеристики погрешностей полностью неизвестны. Экспериментатор может указать только приближённое ограничение e_{max} максимального (по модулю) значения суммарной погрешности e_i в каждом измерении. При этом зашумлённый результат измерения имеет вид суммы

$$s_i = S(t_i) + e_i; |e_i| \leq e_{\text{max}}, i=1, \dots, 4, \quad (3)$$

где $S(t_i)$ – неизвестная истинная величина; e_i – погрешность i -го результата измерения; e_{max} – ограничение на максимальное значение погрешности измерения.

При модели зашумления (3) экспериментальные данные представляют в форме набора интервалов неопределённости результатов измерений

$$s_i = [-s_i^-, s_i^+], i=1, \dots, 4: -s_i^- = s_i - e_{\text{max}}; s_i^+ = s_i + e_{\text{max}}, \quad (4)$$

где $-s_i^-, s_i^+$ – соответственно левая и правая границы интервала неопределённости. (Здесь и далее по тексту использованы обозначения, рекомендованные в стандарте [2].)

Значение (A, α, B) вектора параметров называют допустимым, если оно удовлетворяет системе интервальных неравенств:

$$(A, \alpha, B): A \exp(\alpha t_i) + B \in s_i, \forall i=1, \dots, 4. \quad (5)$$

Зависимость, удовлетворяющую системе (5), также называют допустимой, а совокупность всех допустимых зависимостей – трубкой процесса. Множество $I(e_{\text{max}}, A, \alpha, B)$ всех

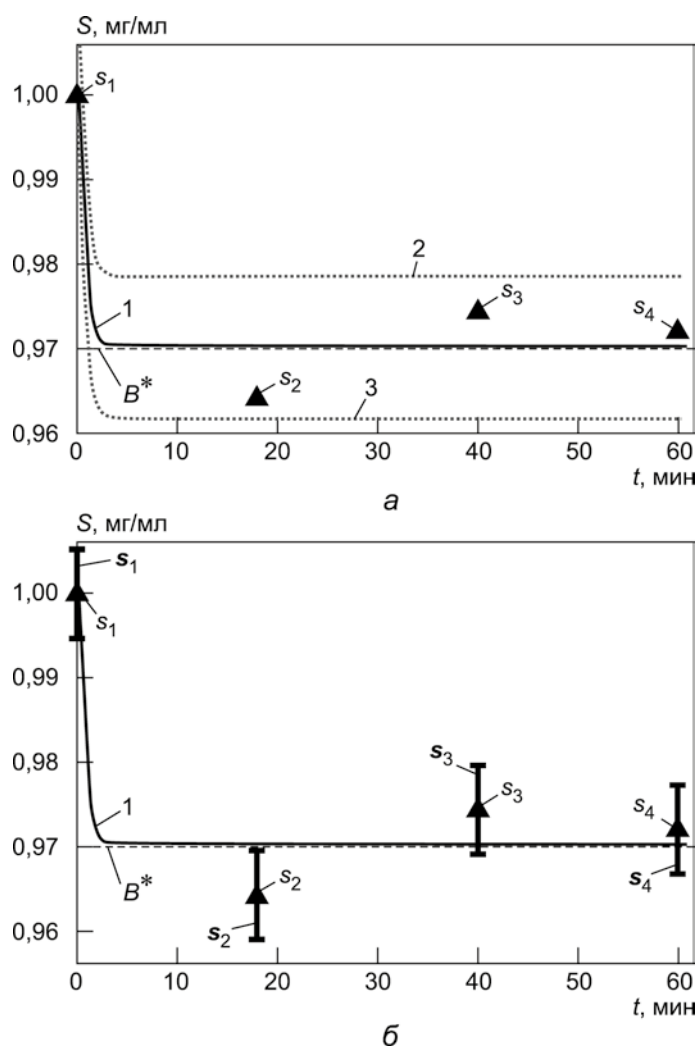


Рис. 1. Входная выборка результатов измерений $s_1, \dots, s_4$ (треугольники), обработанных с использованием МНК до (а) и после (б) введения ограничения $e_{\max}$: 1 – аппроксимирующая зависимость; 2, 3 – соответственно верхняя $+2\sigma$ и нижняя -2σ границы грубой трубки; вертикальные отрезки $s_1, \dots, s_4$ – интервалы неопределённости соответствующих результатов измерений

допустимых значений вектора параметров называют информационным. По сути оно является множеством допусковых решений [3] системы (5) двухсторонних неравенств при заданном ограничении $e_{\max}$ на максимальное значение погрешности измерений.

Постановка задачи. На основе входных данных (1)–(4) и заданного ограничения $e_{\max}$ требуется построить информационное множество $I(e_{\max}, A, \alpha, B)$ и трубку допустимых зависимостей процесса.

Результаты обработки экспериментальных данных. Формальное применение стандартного статистического подхода. В настоящее время широко применяют стандартный (регрессионный) подход на основе метода наименьших квадратов (МНК) [4]. В рассматриваемой

практической задаче этот подход может быть использован только формально, поскольку выборка слишком коротка и полностью неизвестны вероятностные характеристики погрешностей измерений. Получены следующие значения вектора параметров:

$$\left. \begin{aligned} A^* &= 0,0298 \text{ мг/мл}; \alpha^* = -1,824 \text{ мин}^{-1}; \\ B^* &= 0,9701 \text{ мг/мл}; s = 0,00472 \text{ мг/мл}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

В связи с отсутствием вероятностных характеристик погрешности измерений невозможно указать какие-либо разумные стандартные доверительные интервалы оценки (6). Входная выборка результатов измерений, обработанных с применением МНК, представлена на рис. 1. В расчёте учтено заданное ограничение $e_{\max} = 0,0052 \text{ мг/мл}$.

Однако оценки МНК являются неудовлетворительными по следующим причинам:

невозможно рассчитать разумные доверительные интервалы параметров;

формально найденная оценка параметра $\alpha^* = -1,824 \text{ мин}^{-1}$ противоречит результатам подобных экспериментов с рассматриваемой каталитической реакцией. Ожидаемое значение α^* находится в интервале $-0,4 \dots -0,1 \text{ мин}^{-1}$;

стандартный подход МНК не учитывает заданное ограничение $e_{\max}$ погрешности измерений.

При введении ограничения $e_{\max}$ строят интервалы s_i неопределённости результатов измерений (см. рис. 1, б, вертикальные отрезки). Оценка A^* , α^* , B^* и аппроксимирующая кривая МНК в интервальном смысле являются недопустимыми, поскольку аппроксимирующая зависимость не проходит через интервал неопределённости s_2 результата измерений s_2 .

Оценивание на основе интервального подхода. Идеи и методы теории интервального анализа возникли из фундаментальной пионерской работы Л. В. Канторовича [5]. В настоящее время эффективное развитие теоретических и вычислительных методов интервального анализа выполнено многими исследователями [3, 6, 7]. Разработаны специальные интервальные алгоритмы оценивания параметров экспериментальных процессов [8, 9]. В рассматриваемой задаче процедуры интервального анализа используются для оценивания (идентификации) параметров процесса с интервальным ограничением погрешности измерений при полном отсутствии информации о вероятностных характеристиках погрешностей. Результаты оценивания представляют в виде информационного множества допустимых значений параметров и соответствующей трубки допустимых зависимостей процесса [8, 9].

Информационное множество $I(e_{\max}, A, \alpha, B)$ параметров строят на основе специальной гибридной сеточно-аналитической процедуры размерностью три вектора параметров. Зависимость (2) нелинейная относительно параметров A, α , но её можно привести к линейному виду путём замены переменных. Вводят некоторый разумный интервал $[B_{\min}; B_{\max}]$ возможных значений параметра B с соответствующей сеткой $\{B_j\}$, $j=1, M$. Значение B_j переносят в правую часть интервальных выражений (5) и логарифмируют обе части (5) [11].

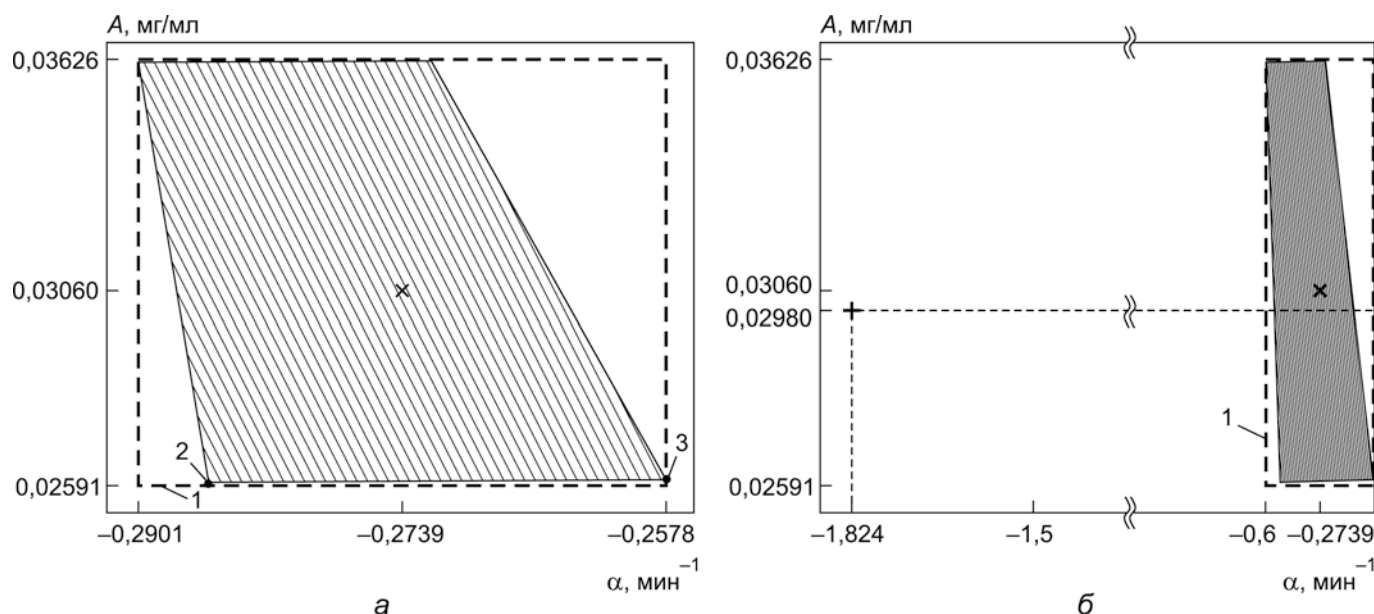


Рис. 2. Информационное множество $I(e_{\max}, A, \alpha, \{B_j\})$:

а – набор сечений по узлам сетки $\{B_j\}$ интервала $B_{\min}=0,968848$ мг/мл, $B_{\max}=0,968995$ мг/мл, шаг сетки по параметру 10^{-6} мг/мл; $\times$ – центральная точка информационного множества с координатами $A_c=0,030644$ мг/мл, $\alpha_c=-0,27395$ мин $^{-1}$, $B_c=0,968921$ мг/мл; пунктиром выделен прямоугольник размером $A=[0,025906; 0,036250]$ мг/мл, $\alpha=[-0,29009; -0,25780]$ мин $^{-1}$, $B=[0,968848; 0,968995]$ мг/мл; 1 – минимальная внешняя оценка информационного множества; 2, 3 – сечения при $B_{\max}$ и $B_{\min}$ соответственно;

б – сравнение информационного множества с МНК-оценкой $B^*=0,9701$ мг/мл; + – МНК-оценка с координатами $A^*=0,0298$ мг/мл, $\alpha^*=-1,824$ мин $^{-1}$

В результате получают систему двусторонних неравенств, линейных относительно параметров α , $\ln A$.

$$t_j \alpha + \ln A \in \ln(s_j - B_j), \quad \forall i=1, \dots, 4, \quad j=1, \dots, M. \quad (7)$$

Интервальная система (7) быстро решается численно. Её решение для каждого значения узла B_j является информационным множеством $I(e_{\max}, \ln A, B_j)$. Данное множество имеет форму выпуклого неправильного многоугольника с аналитически точно описываемыми линейными границами (в логарифмической шкале параметра A). При этом всё информационное множество $I(e_{\max}, \ln A, B)$ представляют набором его сечений-многоугольников по узлам $\{B_j\}$ данного параметра:

$$I(e_{\max}, \ln A, \alpha, B) = \{I(e_{\max}, \ln A, \alpha, B_j)\}, \quad j=1, \dots, M. \quad (8)$$

Для нахождения достаточно точных границ допустимого интервала $[B_{\min}; B_{\max}]$ значений параметра B , в процессе решения выполняется необходимая подстройка положения и шага сетки $\{B_j\}$. Точные минимальные границы этого интервала могут также эффективно определяться с помощью специальных функционалов [3]. Интервальное множество $I(e_{\max}, A, \alpha, \{B_j\})$ показано на рис. 2, а. Для удобства выполнен переход от логарифмической шкалы параметра A к его естественной шкале.

Замечание. В рассматриваемой задаче с трёхмерным вектором параметров разработанный гибридный сеточно-аналити-

ческий метод (вместе с указанной линеаризацией) построения информационного множества оказывается более быстрым и точным по сравнению с широко используемым подходом на основе параллелотопов [6, 7]. Подобные результаты оценивания можно получить преобразованием нелинейных неравенств (5) к линейным относительно параметров A, B при сеточном представлении параметра α . Для этого аналогичным образом вводят некоторый разумный интервал $[\alpha_{\min}; \alpha_{\max}]$ этого параметра. При этом множество $I(e_{\max}, A, \{\alpha_j\}, B)$ представляют совокупностью его сечений по набору узлов $\{\alpha_j\}$.

Реализованы программы по обоим способам линеаризации. Но предпочтительным является первый вариант (7) линеаризации, поскольку отсутствует сеточный поиск границ интервала параметра α и границы каждого сечения $I(e_{\max}, A, \alpha, B_j)$ находятся точно.

Интервальный подход к оцениванию даёт следующие результаты (см. рис. 2, а): $B_{\min}=0,968848$ мг/мл; $B_{\max}=0,968995$ мг/мл; шаг сетки по параметру 10^{-6} мг/мл. Минимальная внешняя box-оценка информационного множества имеет вид прямоугольника размером: $A=[0,025906; 0,036250]$ мг/мл; $\alpha=[-0,29009; -0,25780]$ мин $^{-1}$; $B=[0,968848; 0,968995]$ мг/мл. Центральная точка информационного множества (обозначена крестиком) имеет координаты $A_c=0,030644$ мг/мл; $\alpha_c=-0,27395$ мин $^{-1}$; $B_c=0,968921$ мг/мл. Эти значения экспериментатор использует в дальнейшем.

Сравнение МНК-оценки A^*, α^*, B^* с информационным множеством $I(e_{\max}, A, \alpha, \{B_j\})$ (в мелком масштабе) показано на рис. 2, б. Указанная оценка A^*, α^*, B^* (обозначена символом «плюс») недопустима, так как лежит вне информационного множества.

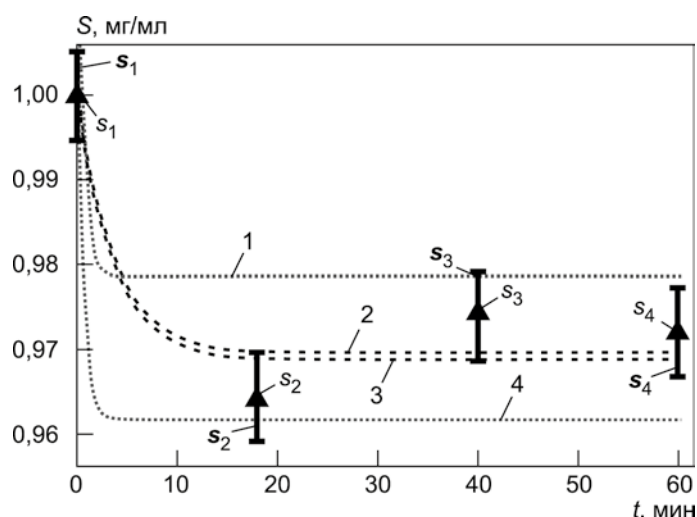


Рис. 3. Грубая $\pm 2\sigma$ МНК-трубка и трубка $Tb(t)$ допустимых зависимостей процесса:
верхние $+2\sigma$, $+Tb(t)$ и нижние -2σ , $-Tb(t)$ границы трубок – кривые соответственно 1, 2 и 3, 4

Как следствие, сама кривая также недопустима, так как не проходит через интервал неопределённости s_2 для второго результата измерений (см. рис. 1). Более того, оценка (7) $B^*=0.9701$ мг/мл также не входит в интервал $B=[0.968848; 0.968995]$ мг/мл.

Отметим главные аспекты интервального подхода, являющиеся важными с методической точки зрения. Во-первых, в стандартном статистическом подходе [4] обычно постулируется гауссовый закон распределения измерительных погрешностей, и вводятся понятия доверительной вероятности и доверительных интервалов параметров. Но в рассматриваемом случае статистический подход может применяться лишь формально. Во-вторых, в этом случае именно ограничение $e_{\max}$ максимального значения погрешности выступает в роли доверительного параметра, а допустимые значения параметров гарантировано описываются информационным множеством $I(e_{\max}, A, \alpha, B)$. При этом величина $e_{\max}$ приобретает смысл возможной оценки фактического уровня суммарной погрешности результатов измерений обрабатываемой выборки. Если задать значение $e_{\max}$ меньше фактического уровня погрешностей, то информационное множество становится пустым. Таким образом, интервальный подход позволяет оценивать снизу предельное значение фактической погрешности измерений. Для нахождения предельного ограничения $e_{\max}$ разработана специальная процедура [8, 9].

На практике экспериментатор хочет иметь трубку допустимых зависимостей исследуемого процесса. На основе информационного множества $I(e_{\max}, A, \alpha, B)$ параметров нижнюю $-Tb(t)$ и верхнюю $+Tb(t)$ границы трубки $Tb(t)$ рассчитывают как

$$\left. \begin{aligned} Tb(t) &= [-Tb(t); +Tb(t)], \quad t \in [0; T_{\text{наб}}]; \\ -Tb(t) &= \min_{(A, \alpha, B) \in I(e_{\max}, A, \alpha, B)} \{A \exp(\alpha t) + B\}; \\ +Tb(t) &= \max_{(A, \alpha, B) \in I(e_{\max}, A, \alpha, B)} \{A \exp(\alpha t) + B\}. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Трубка (9) допустимых зависимостей исследуемого процесса принципиально уже грубой (с границами $\pm 2\sigma$ МНК-трубки (рис. 3), т. е. эта (важная для экспериментатора) информация вычисляется более точно.

Специальное исследование [10] подтвердило, что в указанных условиях интервальный подход может давать существенно более точные гарантированные результаты.

Заключение. В рассмотренном примере обработки зашумлённой выборки результатов измерений концентраций веществ интервальный подход позволяет успешно найти множество (область) допустимых значений параметров и улучшенную (более узкую) трубку допустимых зависимостей процесса по сравнению со статистическим методом. Разработанные сеточно-аналитические процедуры построения информационного множества оказываются более быстрыми, чем широко используемый подход на основе параллелотопов. Таким образом, методы интервального анализа дополняют стандартные статистические методы на случай отсутствия вероятностных характеристик погрешностей измерений, короткой выборки и возможного присутствия хаотических составляющих в результатах измерений.

Работа выполнена при поддержке УрО РАН (Программа 18-1-1-10).

Литература

1. Вакарин С. В., Меляева А. А., Семерикова О. Л., Кондратьев В. С., Панкратов А. А., Плаксин С. В., Поротникова Н. М., Зауков Ю. П., Петров Д. А., Микушина Ю. В., Шишмаков А. Б., Чупахин О. Н. Каталитическая активность оксида наноразмерных вольфрамовых бронз, получаемых электролизом расплавленных солей // Известия РАН. Сер. Химическая. 2011. № 10. С. 1051–1054.
2. Kearfott R. B., Nakao M. T., Neumaier A., Rump S. M., Shary S. P., van Hentenryck P. Standardized notation in interval analysis // Вычислительные технологии. 2010. Т. 15. № 1. С. 7–13.
3. Шарый С. П. Конечномерный интервальный анализ. [Электрон. книга] URL: <http://www.nsc.ru/interval/Library/InteBooks> (дата обращения 10.10.2018).
4. ГОСТ Р 40.2.028–2003. ГСИ. Рекомендации построения калибровочных характеристик. Оценивание погрешностей (неопределенностей) линейных калибровочных характеристик на основе метода наименьших квадратов.
5. Канторович Л. В. О новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений // Сибирский математический журнал. 1962. Т. III. № 5. С. 701–709.
6. Jaulin L., Kieffer M., Didrit O., Walter E. Applied interval analysis. London: Springer-Verlag, 2001.
7. Hansen E., Walster G. W. Global optimization using interval analysis. New York, USA: Marcel Dekker Inc., 2004.
8. Kumkov S. I., Mikushina Yu. V. Interval approach to identification of catalytic process parameters // Reliable Computing. 2013. V. 19. Iss. 2. P. 197–214.

9. Кумков С. И. Обработка экспериментальных данных ионной проводимости расплавленного электролита методами интервального анализа // Расплавы. 2010. № 3. С. 86–96.

10. Kumkov S. I., Kreinovich V., Pownuk A. In System Identification, Interval (and Fuzzy). Estimates Can Lead to

Much Better Accuracy than the Traditional Statistical Ones: General Algorithm and Case Study // IEEE Intern. Conf. Systems, Man, and Cybernetics (SMC), October 5–8, 2017, Canada, Banff, Banff Center.

Дата принятия: 11.12.2018.

Comparison of interval analysis methods and standard statistical ones in a problem of estimating experimental data with uncertainties

S. I. Kumkov^{1,2}, L. Jaulin³

¹ N. N. Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

² Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia, e-mail: kumkov@imm.uran.ru

³ ENSTA-Bretagne, Brest, France, e-mail: luc.jaulin@ensta-bretagne.fr

The paper considers application of the interval analysis procedures to estimation of parameters of an experimental chemical process under conditions of corruption, uncertainty of errors probability characteristics, and short sample of measurements. For these reasons, application of the standard statistical approach is hampered; especially, it becomes impossible to determine accurately the confidential intervals for parameters of the process. Under such conditions, namely methods of the interval analysis can work reliably giving exact set of the admissible values of the parameters to be estimated. Such a set is very necessary for researches for proper organization of corresponding technological processes by correct choice of the parameters. In the investigation, existing interval analysis procedures were advanced and arranged for processing a concrete experimental data. As a comparison, approximate estimations of parameters have been calculated by the standard statistical approach. It is shown that the standard approach gives practically senseless estimations of the process parameters.

Key words: interval analysis, statistical methods, noised data, uncertainty conditions, estimation, parameters.