

## Об интервальном оценивании с высоким порядком минимума функции

Д. А. СКОРИК<sup>1</sup>, С. П. ШАРЫЙ<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Новосибирск, Россия

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

Поступила 17 марта 2022 г., доработана 11 мая 2022 г., принята в печать 24 мая 2022 г.

Предлагается интервальный численный метод для двустороннего оценивания минимума функции одной переменной, порядок точности которого может быть сделан сколь угодно большим нечетным числом  $N \geq 2$ . Обсуждаются вопросы реализации нового метода и его применение.

*Ключевые слова:* минимум функции, двусторонняя оценка, интервальный анализ, высокий порядок точности.

*Цитирование:* Скорик Д.А., Шарый С.П. Об интервальном оценивании с высоким порядком минимума функции. Вычислительные технологии. 2022; 27(4):77–83. DOI:10.25743/ICT.2022.27.4.006.

### Введение

В настоящей статье рассматривается применение методов интервального анализа для двустороннего оценивания экстремумов гладких функций одной переменной. Интервальные методы получили широкое распространение для решения этой задачи, но их порядок точности, как правило, не превышает трех для случая функций одной переменной и двух для случая многих переменных [1–4]. Предлагается метод для нахождения интервальной оценки минимума функции от одной переменной, порядок точности которого может быть, в принципе, сделан сколь угодно высоким, т.е. любым нечетным числом, большим 2. Новый метод может найти широкое применение в качестве составной части популярных интервальных алгоритмов глобальной оптимизации или глобального решения уравнений, основанных на адаптивном дроблении области определения исследуемой функции.

В статье используются обозначения, принятые в интервальном анализе согласно неформальному международному стандарту [5]. В частности, интервалы и интервальные величины выделяют жирным шрифтом. Подчеркивание и надчеркивание —  $\underline{x}$  и  $\bar{x}$  — обозначают нижнюю и верхнюю границы вещественного интервала  $\mathbf{x}$ , так что в целом  $\mathbf{x} = [\underline{x}, \bar{x}] \subset \mathbb{R}$ . Шириной интервала  $\mathbf{x}$  будем называть величину

$$\text{wid } \mathbf{x} = \bar{x} - \underline{x},$$

серединой интервала  $\mathbf{x}$  — величину

$$\text{mid } \mathbf{x} = \frac{1}{2}(\overline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{x}}).$$

Арифметические операции между интервалами понимаются как операции классической интервальной арифметики [1–4].

## 1. Теоретическая часть

Один из основных инструментов интервального анализа, применяемых в самых разнообразных ситуациях, — интервальные расширения функций. Напомним (см., например, [1]), что интервальная функция  $\mathbf{f}$  называется интервальным расширением вещественной функции  $f$ , если:

- (i)  $\mathbf{f}(x) = f(x)$  для любого  $x$  из области определения  $f$ ;
- (ii)  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  является монотонной по включению, т. е. для любых интервалов  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  справедливо  $\mathbf{x} \subseteq \mathbf{y} \Rightarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}) \subseteq \mathbf{f}(\mathbf{y})$ .

Нетрудно показать, что если  $\mathbf{f}$  — интервальное расширение функции  $f$ , то всегда

$$\{f(x) \mid x \in \mathbf{x}\} \subseteq \mathbf{f}(\mathbf{x}),$$

т. е. значение  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  — внешняя (с помощью объемлющего множества) оценка области значений  $f$  на интервале  $\mathbf{x} \subset \mathbb{R}$ . Построение интервальных расширений функций является одной из наиболее важных задач интервального анализа, а ее различные аспекты активно исследуются с 1960-х гг. вплоть до настоящего времени. Приведем один из первых результатов на эту тему.

**Основная теорема интервальной арифметики [1, 3].** Пусть  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — рациональная функция аргументов  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , т. е. такая, что выражение для  $f$  образовано из символов переменных, констант и четырех арифметических операций. Если для некоторого набора интервалов  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  определен результат  $\mathbf{f}_{\mathbb{I}}(\mathbf{x})$  подстановки  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  вместо аргументов  $f$  и дальнейшего выполнения операций интервальной арифметики, то

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

т. е.  $\mathbf{f}_{\mathbb{I}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$  содержит область значений функции  $f$  на  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ .

Интервальное расширение  $\mathbf{f}_{\mathbb{I}}$  рациональной функции  $f$ , конструкция которого описана в основной теореме интервальной арифметики, называют естественным интервальным расширением. Его значения легко могут быть вычислены с помощью распространенных языков программирования или библиотек, реализующих интервальные вычисления. Но использование естественного интервального расширения часто приводит к грубым оценкам областей значений функций. Как следствие, были предложены более развитые формы интервальных расширений, с более высокой точностью оценивания, хотя в той или иной мере они все опираются на естественное интервальное расширение.

Перейдем к решению нашей задачи минимума функции. Пусть задан некоторый интервал  $\mathbf{x} \subseteq \mathbb{R}$ , на котором требуется оценить минимальное значение гладкой функции  $f(x)$ , и пусть также  $\tilde{x} \in \mathbf{x}$  — некоторая точка, а  $N$  — четное положительное число. Будем предполагать, что  $f(x) \in C^N[\underline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{x}}]$ , т. е. что функция  $f(x)$  имеет непрерывные

производные вплоть до  $N$ -го порядка на  $\mathbf{x}$ . С помощью формулы Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа можно представить  $f(x)$  на интервале  $\mathbf{x}$  в виде

$$f(x) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{f^{(k)}(\tilde{x})}{k!} (x - \tilde{x})^k + \frac{f^{(N)}(\tilde{x} + \theta(x - \tilde{x}))}{N!} (x - \tilde{x})^N, \quad 0 < \theta < 1.$$

Заметим, что  $\underline{\mathbf{x}} < \tilde{x} + \theta(x - \tilde{x}) < \bar{\mathbf{x}}$ . Предполагая, что для  $f^{(N)}$ ,  $N$ -й производной функции  $f$ , имеется явное аналитическое выражение, возьмем его естественное интервальное расширение  $\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})$  на интервале  $\mathbf{x}$  и подставим в слагаемое, содержащее  $f^{(N)}$ . Получим включение

$$f(x) \in \sum_{k=0}^{N-1} \frac{f^{(k)}(\tilde{x})}{k!} (x - \tilde{x})^k + \frac{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})}{N!} (x - \tilde{x})^N.$$

Если взять в качестве  $\tilde{x} = \text{mid } \mathbf{x}$ , то

$$f(x) \in \sum_{k=0}^{N-1} \frac{f^{(k)}(\text{mid } \mathbf{x})}{k!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^k + \frac{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})}{N!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^N.$$

Отдельно отметим, что  $\text{wid } \mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x}) = O(\text{wid } \mathbf{x})$  при  $\text{wid } \mathbf{x} \rightarrow 0$  в силу свойств естественного интервального расширения [1, 3, 4].

Обозначим

$$\begin{aligned} \underline{f(x)} &= \sum_{k=0}^{N-1} \frac{f^{(k)}(\text{mid } \mathbf{x})}{k!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^k + \frac{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})}{N!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^N, \\ \overline{f(x)} &= \sum_{k=0}^{N-1} \frac{f^{(k)}(\text{mid } \mathbf{x})}{k!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^k + \frac{\overline{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})}}{N!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^N. \end{aligned}$$

Рассмотрим разность этих полиномов

$$\begin{aligned} \overline{f(x)} - \underline{f(x)} &= \frac{\overline{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})}}{N!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^N - \frac{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})}{N!} (x - \text{mid } \mathbf{x})^N = \\ &= \frac{1}{N!} \left( \overline{\mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x})} - \mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x}) \right) (x - \text{mid } \mathbf{x})^N = \\ &= \frac{1}{N!} \text{wid } \mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x}) (x - \text{mid } \mathbf{x})^N \geq 0 \end{aligned}$$

в силу четности  $N$ . То есть  $\overline{f(x)} \geq \underline{f(x)}$  для всех  $x \in \mathbb{R}$ .

Обозначим интервал  $[\underline{f(x)}, \overline{f(x)}]$  через  $\mathbf{F}(x, \mathbf{x})$ . Так как  $f(x) \in \mathbf{F}(x, \mathbf{x})$ , то при этом

$$\text{wid } \mathbf{F}(x, \mathbf{x}) = \frac{1}{N!} \text{wid } \mathbf{f}_{\natural}^{(N)}(\mathbf{x}) (x - \text{mid } \mathbf{x})^N = O((\text{wid } \mathbf{x})^{N+1}) \text{ при } \text{wid } \mathbf{x} \rightarrow 0.$$

Таким образом, для любого  $x$  из  $\mathbf{x}$  верно

$$\text{wid } \mathbf{F}(x, \mathbf{x}) = O((\text{wid } \mathbf{x})^{N+1}) \text{ при } \text{wid } \mathbf{x} \rightarrow 0. \quad (1)$$

## 2. Оценка минимума

Пусть минимум функции  $f(x)$  на интервале  $\mathbf{x}$  достигается в точке  $x^*$ . Очевидно, что

$$f(x^*) \in \left[ \min_{\mathbf{x}} \underline{F}(x, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{F}(x, \mathbf{x}) \right].$$

Предположим также, что минимум нижнего конца интервальной оценки  $\underline{F}(x, \mathbf{x})$ , т. е. функции  $\underline{F}(x, \mathbf{x})$ , достигается в  $\check{x}$ . Тогда имеет место

$$\left[ \min_{\mathbf{x}} \underline{F}(x, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{F}(x, \mathbf{x}) \right] \subseteq \left[ \underline{F}(\check{x}, \mathbf{x}), \overline{F}(\check{x}, \mathbf{x}) \right] = \underline{F}(\check{x}, \mathbf{x}). \quad (2)$$

Поскольку для любой точки  $x \in \mathbf{x}$  верна асимптотическая оценка (1), она верна и для точки  $\check{x}$ . Значит,  $\text{wid } \underline{F}(\check{x}, \mathbf{x}) = O((\text{wid } \mathbf{x})^{N+1})$  при  $\text{wid } \mathbf{x} \rightarrow 0$ .

Таким образом,

$$\text{wid } \left[ \min_{\mathbf{x}} \underline{F}(x, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{F}(x, \mathbf{x}) \right] = O((\text{wid } \mathbf{x})^{N+1}) \text{ при } \text{wid } \mathbf{x} \rightarrow 0.$$

В действительности, можно указать еще более узкий интервал оценки значения минимума  $f(x)$ , поскольку

$$f(x^*) \in \left[ \underline{F}(\check{x}, \mathbf{x}), \min \left\{ f(\check{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{F}(x, \mathbf{x}) \right\} \right] \subseteq \left[ \min_{\mathbf{x}} \underline{F}(x, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{F}(x, \mathbf{x}) \right]. \quad (3)$$

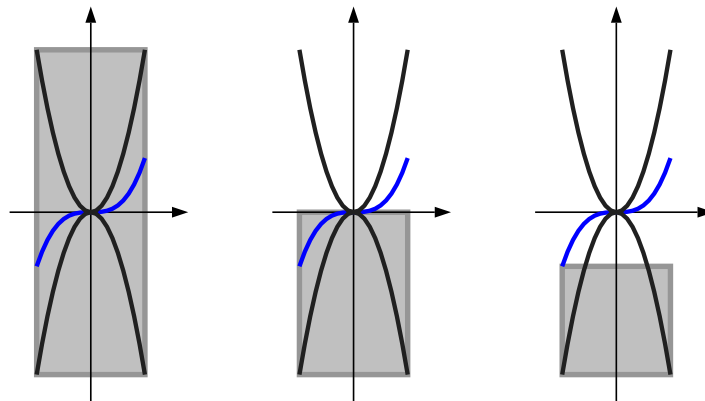
## 3. Пример

Рассмотрим функцию  $f(x) = x^3$  на последовательности интервалов вида  $\mathbf{x} = [-1/k, 1/k]$ , где  $k \in \mathbb{N}$ :

$$f''(x) = 6x,$$

$$\mathbf{f}''(\mathbf{x}) = \left[ -\frac{6}{k}, \frac{6}{k} \right],$$

$$\underline{F}(x, \mathbf{x}) = -\frac{3x^2}{k}, \quad \overline{F}(x, \mathbf{x}) = \frac{3x^2}{k}.$$



Различные приближения для интервальной оценки минимума функции  $f(x) = x^3$  при  $k = 1$   
 Various approximations for interval estimate of the minimum of the function  $f(x) = x^3$  with  $k = 1$

Функция  $\mathbf{F}(x, \mathbf{x})$ , как функция от  $x$ , имеет две точки минимума на  $\mathbf{x}$ . Выберем точку  $\check{x} = -1/k$ . Тогда (см. левый чертеж на рисунке)

$$\mathbf{F}(\check{x}, \mathbf{x}) = \left[ -\frac{3}{k^3}, \frac{3}{k^3} \right].$$

Используя включение (2), можно получить более узкий интервал оценки минимума  $f(x)$  (центральная часть рисунка):

$$\mathbf{F}(\check{x}, \mathbf{x}) \supseteq \left[ \min_{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{F}}(x, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{\mathbf{F}}(x, \mathbf{x}) \right] = \left[ -\frac{3}{k^3}, 0 \right].$$

И, наконец, можно использовать включение (3) (см. правый чертеж на рисунке):

$$\left[ \min_{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{F}}(x, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{\mathbf{F}}(x, \mathbf{x}) \right] \supseteq \left[ \underline{\mathbf{F}}(\check{x}, \mathbf{x}), \min \left\{ f(\check{x}), \min_{\mathbf{x}} \overline{\mathbf{F}}(x, \mathbf{x}) \right\} \right] = \left[ -\frac{3}{k^3}, -\frac{1}{k^3} \right].$$

В результате получаем, что при линейном уменьшении ширины интервала области определения происходит кубическое уменьшение ширины интервальной оценки значения минимума функции.

## Заключение

Применяя описанный выше метод на практике, имеет смысл, прежде всего, рассматривать случаи  $N = 2$  или  $N = 4$ , поскольку для оценки минимума функции на интервале с порядком  $N + 1$  необходимо находить точку минимума полиномов степени  $N$ . Чтобы найти ее с помощью стандартных средств дифференциального исчисления как точку зануления производной, в случае полинома четвертой степени можно применять известную формулу Кардано для корней кубического полинома. При повышении степени  $N$  более четырех в силу теоремы Абеля–Руффини удобных аналитических формул для корней полинома в общем случае не существует. Как следствие, нахождение нуля производной необходимо выполнять с помощью какого-нибудь численного метода для отыскания корней алгебраических уравнений.

Также стоит учитывать, имеется ли для минимизируемой функции явное выражение ее  $N$ -й производной или нет. При отсутствии такового можно численно оценить эту производную с помощью алгоритмического дифференцирования [2, 6] на рассматриваемом интервале  $\mathbf{x}$ . Однако нахождение интервальной оценки  $f^{(N)}(\mathbf{x})$  путем алгоритмического дифференцирования требует как минимум в  $N$  раз больше вычислительных операций, чем для вычисления интервальной оценки области значений функции.

При использовании интервальной арифметики и естественного интервального расширения ширина результирующего интервала сильно зависит от количества проделанных арифметических операций. Поэтому больший практический интерес имеет случай  $N = 2$ . Это совпадает по порядку точности (равному трем) с методами, представленными в работах [3, 4]. Но так как развиваемый нами подход использует разложение функции в окрестности точки, а не интерполяционное приближение, погрешности, вызванные приближенным характером вычислений на ЭВМ, для него меньше. Это вызвано тем, что построение интерполяционного приближения требует деления на ширину рассматриваемого интервала, которая стремится к нулю в интервальных алгоритмах,

использующих последовательное дробление исходного интервала. Таким образом, наш метод лучше приспособлен для встраивания в интервальные алгоритмы глобальной оптимизации и решения уравнений, основанные на адаптивном дроблении области определения функции (их описание можно найти, к примеру, в книгах [1, 2, 4]).

## Список литературы

- [1] Шарый С.П. Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: XYZ; 2022: 654. Адрес доступа: <http://www.nsc.ru/interval/Library/InteBooks/SharyBook.pdf>.
- [2] Хансен Э., Уолстер Дж.У. Глобальная оптимизация с помощью методов интервального анализа. М.; Ижевск: Издательство РХД; 2012: 516.
- [3] Neumaier A. Interval methods for systems of equations. Cambridge: Cambridge University Press; 1990: 255.
- [4] Ratschek H., Rokne J. Computer methods for the range of functions. Chichester: Ellis Horwood; N.Y.: Halsted Press; 1984: 168. ISBN:0853127034.
- [5] 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.
- [6] Griewank A., Walther A. Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation. Second edition. Cambridge: Cambridge University Press; 2008: 460. ISBN:9780898716597.

### On a high order interval estimation of the minimum of a function

SKORIK DMITRY A.<sup>1</sup>, SHARY SERGEY P.<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia

<sup>2</sup>Federal Research Center for Information and Computational Technologies, 630090, Novosibirsk, Russia

\*Corresponding author: Shary Sergey P., e-mail: [shary@ict.nsc.ru](mailto:shary@ict.nsc.ru)

Received March 17, 2022, revised May 11, 2022, accepted May 24, 2022.

#### Abstract

The article addresses the problem of two-sided estimation of the minimum of a function of one real variable using interval methods. These methods are widely used for finding the ranges of functions, but their order of accuracy often does not exceed 3 for the functions of one variable and 2 for the case of many variables. The paper proposes a method for finding an interval estimate for the minimum of a function of one variable with any odd order greater than 2.

The proposed technique uses so-called functional intervals, the boundaries of which are described by polynomials of even degrees obtained from the Taylor formula for the function under consideration. The article provides a derivation of interval estimates for the minimum, and also proves an estimate for the order of convergence of the width of the resulting interval with the decrease in the size of the domain of the function. An example is given in which estimating the minimum of a function reaches the theoretical order of convergence.

The approach developed in this paper allows, in principle, to achieve any odd accuracy order in the interval estimation of the minimum of a function. In practice, this method is convenient to use for the third order of accuracy, since, on the one hand, we need to find an interval estimate for derivatives of high degrees, and, on the other hand, we need to find roots of polynomials of even degrees.

The new approach is shown to be useful and practical, as it uses the local Taylor expansion and therefore behaves stably as the width of the function domain decreases. The new approach can be used to improve the performance of interval global optimization algorithms based on adaptive domain partitioning. An increase in the order of estimation accuracy entails the acceleration of these algorithms, as well as a decrease in the number of subintervals generated in the process of partitioning the domain.

*Keywords:* minimum of a function, two-sided estimate, interval analysis, high order of accuracy.

*Citation:* Skorik D.A., Shary S.P. On a high order interval estimation of the minimum of a function. Computational Technologies. 2022; 27(4):77–83. DOI:10.25743/ICT.2022.27.4.006. (In Russ.)

### References

1. **Shary S.P.** Konechnomernyy interval'nyy analiz [Finite-dimensional interval analysis]. Novosibirsk: XYZ; 2022: 653. (In Russ.) Available at: <http://www.nsc.ru/interval/Library/InteBooks/SharyBook.pdf>.
2. **Hansen E., Walster G.W.** Global optimization using interval analysis. Boca Raton: CRC Press; 2004: 728.
3. **Neumaier A.** Interval methods for systems of equations. Cambridge: Cambridge University Press; 1990: 255.
4. **Ratschek H., Rokne J.** Computer methods for the range of functions. Chichester: Ellis Horwood; N.Y.: Halsted Press; 1984: 168. ISBN:0853127034.
5. **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.
6. **Griewank A., Walther A.** Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation. Second edition. Cambridge: Cambridge University Press; 2008: 460. ISBN:9780898716597.