

Расширение твинной арифметики и её применение в методах и алгоритмах двустороннего интервального оценивания

03.03.2025

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Яворук Татьяна
Университет ИТМО

План

1. Введение

- Интервальный анализ
- Твины

2. Приложение твинов

- Интервалы в изотопном анализе
- Классификация аминокислот
- Задача линейной регрессии
- Обработка LIDAR данных

3. Заключение

Интервальный анализ

- Классическая интервальная арифметика:

$$\mathbb{IR} = \{\mathbf{x} = [\underline{x}, \bar{x}] : \underline{x} < \bar{x}, \quad \underline{x}, \bar{x} \in \mathbb{R}\}.$$

Результатом любой арифметической операции $\star \in \{+, -, \cdot, /\}$ является интервал, такой что

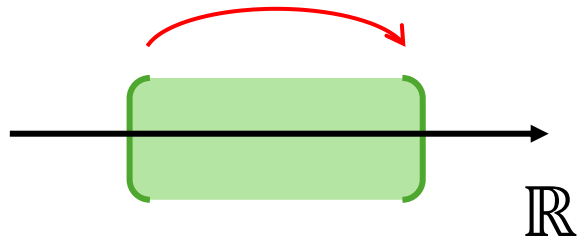
$$\mathbf{x} \star \mathbf{y} = \{x \star y \mid x \in \mathbf{x}, y \in \mathbf{y}\}, \quad x, y \in \mathbb{R}.$$

- Полная интервальная арифметика или арифметика Каухера:

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

Появились неправильные интервалы!

Операции с интервалами



$$\mathbf{a} = [\underline{\mathbf{a}}, \overline{\mathbf{a}}], \quad \mathbf{b} = [\underline{\mathbf{b}}, \overline{\mathbf{b}}]$$

$$\text{dual}(\mathbf{a}) = [\overline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{a}}]$$

$$\text{wid}(\mathbf{a}) = \overline{\mathbf{a}} - \underline{\mathbf{a}}$$

Для неправильных интервалов ширина отрицательна

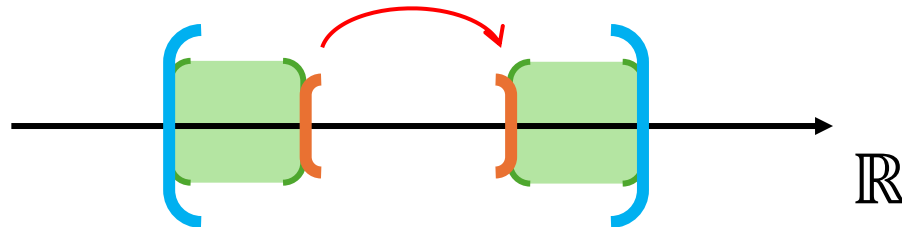
Операции с интервалами

Взятие максимума и минимума по включению

$$\wedge(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = [\max(\underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}}), \min(\overline{\mathbf{a}}, \overline{\mathbf{b}})]$$

$$\vee(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = [\min(\underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}}), \max(\overline{\mathbf{a}}, \overline{\mathbf{b}})]$$

Для непересекающихся интервалов имеем неправильный минимум по включению



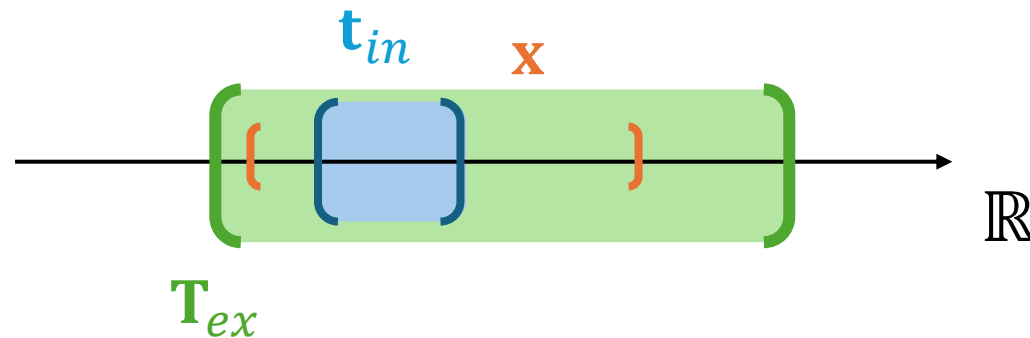
ТВИН

Определение

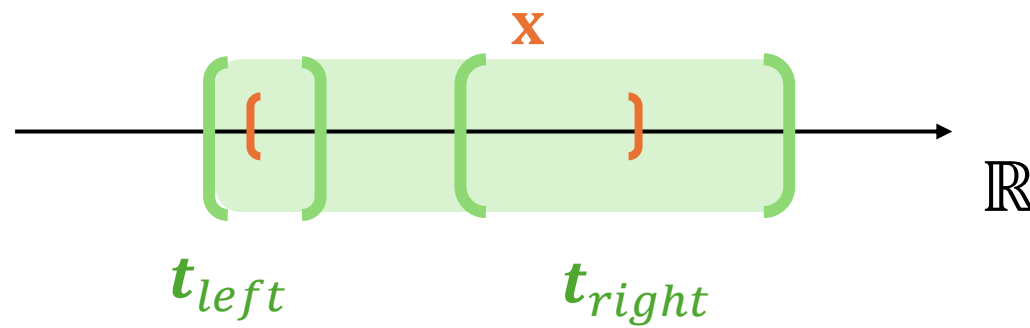
Твином по свойству вложенности ($\subseteq$) называется следующий объект

$$\mathbb{T} = [\mathbf{t}_{in}, \mathbf{T}_{ex}] = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R} \mid \mathbf{t}_{in} \subseteq \mathbf{x} \subseteq \mathbf{T}_{ex}\},$$

где $\mathbf{t}_{in}$, $\mathbf{T}_{ex}$ будем называть внутренней и внешней оценками.



Альтернатива:
определение по
свойству $\leq$:



Арифметика твинов

$$\mathbb{T}_k = \left[[\underline{\mathbf{t}}_k, \overline{\mathbf{t}}_k], [\underline{\mathbf{T}}_k, \overline{\mathbf{T}}_k] \right], k \in \{1, 2\}$$

$$\mathbb{T}_1 \star \mathbb{T}_2 = [\mathbf{t}_{\text{in}}, \mathbf{T}_{\text{ex}}], \quad \star \in \{+, -, \cdot, /\}$$

$$\mathbf{T}_{\text{ex}} = [\underline{\mathbf{T}}_1, \overline{\mathbf{T}}_1] \star [\underline{\mathbf{T}}_2, \overline{\mathbf{T}}_2]$$

Твины Sainz et al.:

$$\mathbf{t}_{\text{in}} = [\underline{\mathbf{t}}_1, \overline{\mathbf{t}}_1] \star [\underline{\mathbf{t}}_2, \overline{\mathbf{t}}_2]$$

Арифметика твинов. Твины Нестерова

$$T_1 = ([a^-, a^+], [A^-, A^+]) \quad T_2 = ([b^-, b^+], [B^-, B^+])$$

Define the numbers p and q as follows:

- if $[a^-, a^+] \neq \emptyset$ and $[b^-, b^+] \neq \emptyset$ $p = \min (a^- + B^+, b^- + A^+)$
 $q = \max (a^+ + B^-, b^+ + A^-)$
- if $[a^-, a^+] = \emptyset$ and $[b^-, b^+] \neq \emptyset$ $p = b^- + A^+$ $q = b^+ + A^-$
- if $[a^-, a^+] \neq \emptyset$ and $[b^-, b^+] = \emptyset$ $p = a^- + B^+$ $q = a^+ + B^-$
- if $[a^-, a^+] = \emptyset$ and $[b^-, b^+] = \emptyset$ p, q is undefined

Define the functions φ and ψ as follows:

Z is empty set or it have one element, $I_1, I_2 \in \mathbb{IR}$.

- if $I_1 \cap I_2 = Z$: $\varphi(I_1, I_2) = \min_{\subseteq} ((c^-, c^+) \mid (c^- \in I_1 \text{ and } c^+ \in I_2) \vee (c^- \in I_2 \text{ and } c^+ \in I_1))$
- else $\varphi(I_1, I_2) = \emptyset$

$$\psi(I_1, I_2) = \max_{\subseteq} ((c^-, c^+) \mid c^-, c^+ \in I_1 \cup I_2)$$

Sum

Let's define inner length of twin as $|T|_l = |X_l|$ and outer length as $|T| = |X|$. If $I \sqsubseteq (\emptyset, X)$ than $|T|_l = -1$. It means that only outer estimation exists. Than

- if $|T_1| \leq |T_2|_l \vee |T_2| \leq |T_1|_l$ $T_1 + T_2 = ((p, q), (A^- + B^-, A^+ + B^+))$
- else $T_1 + T_2 = ((\emptyset), (A^- + B^-, A^+ + B^+))$

Multiplication

Multiplication of two twins T_1, T_2

- if $|T_1|_l \neq -1$ and $|T_2|_l \neq -1$, then
 $T_1 \cdot T_2 = (\psi(\varphi(a^-(B^-, B^+), a^+(B^-, B^+)), \varphi(b^-(A^-, A^+), b^+(A^-, A^+))), (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$
- if $|T_1|_l = -1$ and $|T_2|_l \neq -1$, then
 $T_1 \cdot T_2 = (\varphi(b^-(A^-, A^+), b^+(A^-, A^+)), (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$
- if $|T_1|_l \neq -1$ and $|T_2|_l = -1$, then
 $T_1 \cdot T_2 = (\varphi(a^-(B^-, B^+), a^+(B^-, B^+)), (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$
- if $|T_1|_l = -1$ and $|T_2|_l = -1$, then $T_1 \cdot T_2 = (\emptyset, (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$

Арифметика твинов. Твины Нестерова

Арифметика Нестерова определяется через специальные функции φ , ψ , и некоторые величины p , q .

В случае неправильных интервалов внутренняя оценка превращается в пустое множество

Арифметика твинов. Твины Нестерова

$$T_1 = ([a^-, a^+], [A^-, A^+]) \quad T_2 = ([b^-, b^+], [B^-, B^+])$$

Define the numbers p and q as follows:

- if $[a^-, a^+] \neq \emptyset$ and $[b^-, b^+] \neq \emptyset$ $p = \min(a^- + B^+, b^- + A^+)$
 $q = \max(a^+ + B^-, b^+ + A^-)$
- if $[a^-, a^+] = \emptyset$ and $[b^-, b^+] \neq \emptyset$ $p = b^- + A^+$ $q = b^+ + A^-$
- if $[a^-, a^+] \neq \emptyset$ and $[b^-, b^+] = \emptyset$ $p = a^- + B^+$ $q = a^+ + B^-$
- if $[a^-, a^+] = \emptyset$ and $[b^-, b^+] = \emptyset$ p, q is undefined

Define the functions φ and ψ as follows:

Z is empty set or it have one element, $I_1, I_2 \in \mathbb{IR}$.

- if $I_1 \cap I_2 = Z$: $\varphi(I_1, I_2) = \min_{\subseteq} ((c^-, c^+) \mid (c^- \in I_1 \text{ and } c^+ \in I_2) \vee (c^- \in I_2 \text{ and } c^+ \in I_1))$
 else $\varphi(I_1, I_2) = \emptyset$

$$\psi(I_1, I_2) = \max_{\subseteq} ((c^-, c^+) \mid c^-, c^+ \in I_1 \cup I_2)$$

Sum

Let's define inner length of twin as $|T|_l = |X_l|$ and outer length as $|T| = |X|$. If $I \sqsubseteq (\emptyset, X)$ then $|T|_l = -1$. It means that only outer estimation exists. Than

- if $|T_1| \leq |T_2|_l \vee |T_2| \leq |T_1|_l$ $T_1 + T_2 = ((p, q), (A^- + B^-, A^+ + B^+))$
- else $T_1 + T_2 = ((\emptyset), (A^- + B^-, A^+ + B^+))$

Multiplication

Multiplication of two twins T_1, T_2

- if $|T_1|_l \neq -1$ and $|T_2|_l \neq -1$, then
 $T_1 \cdot T_2 = (\psi(\varphi(a^-(B^-, B^+), a^+(B^-, B^+)), \varphi(b^-(A^-, A^+), b^+(A^-, A^+))), (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$
- if $|T_1|_l = -1$ and $|T_2|_l \neq -1$, then
 $T_1 \cdot T_2 = (\varphi(b^-(A^-, A^+), b^+(A^-, A^+)), (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$
- if $|T_1|_l \neq -1$ and $|T_2|_l = -1$ then
 $T_1 \cdot T_2 = (\varphi(a^-(B^-, B^+), a^+(B^-, B^+)), (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$
- if $|T_1|_l = -1$ and $|T_2|_l = -1$ then $T_1 \cdot T_2 = (\emptyset, (A^-, A^+) \cdot (B^-, B^+))$

Арифметика твинов. Твины Нестерова

Новое определение в современной нотации с использованием минимума максимума по включению и дуализации:

$$\mathbf{t}_{\text{in}} = V \left(\text{dual} \left(\wedge \left(\underline{\mathbf{t}}_1 \star [\underline{\mathbf{T}}_2, \overline{\mathbf{T}}_2], \overline{\mathbf{t}}_1 \star [\underline{\mathbf{T}}_2, \overline{\mathbf{T}}_2] \right) \right), \quad \text{dual} \left(\wedge \left(\underline{\mathbf{t}}_2 \star [\underline{\mathbf{T}}_1, \overline{\mathbf{T}}_1], \overline{\mathbf{t}}_2 \star [\underline{\mathbf{T}}_1, \overline{\mathbf{T}}_1] \right) \right) \right)$$

$$\mathbf{t}_{\text{in}} = V(t_1 \star \text{dual } T_2, t_2 \star \text{dual } T_1)$$

Появились неправильные интервалы во внутренней оценке 😊

Некоторые операции с твинами

- Умножение на скаляр

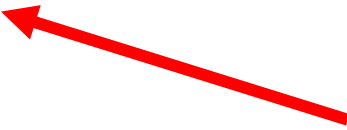
$$\lambda \mathbb{T} = [\lambda \mathbf{t}_{\text{in}}, \lambda \mathbf{T}_{\text{ex}}]$$

- Индекс (мера, коэффициент) Жаккара – мера сходства двух

множеств $\left(J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} \right)$:

$$Ji(\mathbb{T}) = \frac{\text{wid}(\mathbf{t}_{\text{in}})}{\text{wid}(\mathbf{T}_{\text{ex}})}.$$

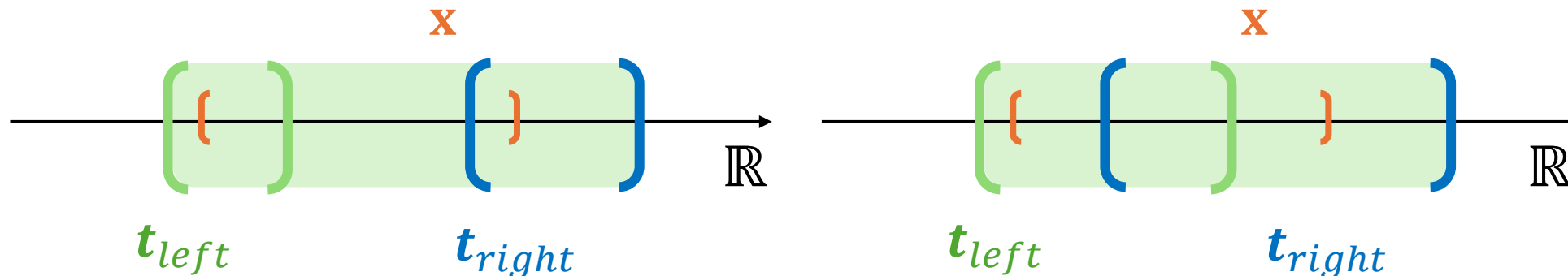
$Ji(\mathbb{T}) < 0$
(Может быть!)



Возникновение неправильных интервалов внутренних оценок

Оценка экспериментальных данных с не одной причиной
неопределённости

Пример: измерение температуры (неопределенность явления
сопоставима с неопределённостью измерения)

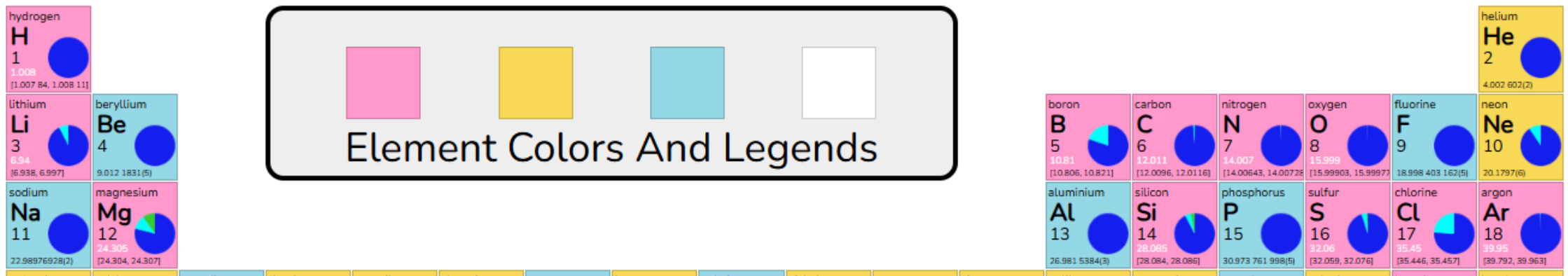


IUPAC Periodic Table of Elements and Isotopes

Интервальные значения масс почти всех элементов, образующих органические соединения.

Важнейшие: водород и углерод

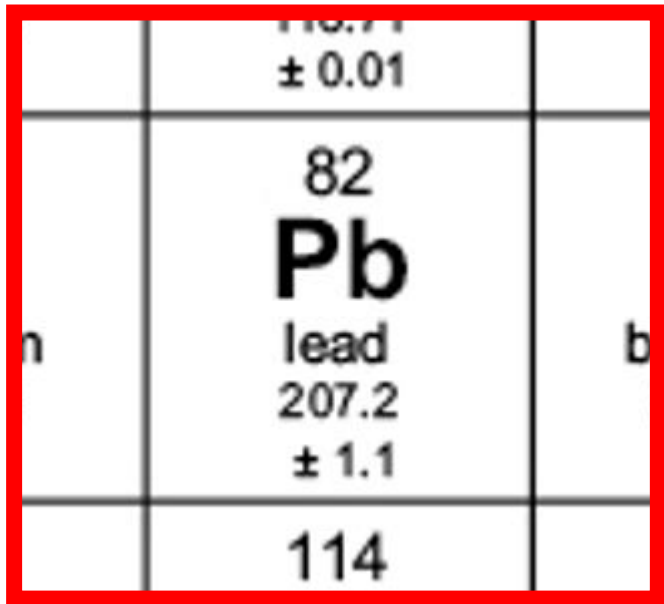
<https://applets.kcvs.ca/IPTEI/IPTEI.html>



IUPAC Periodic Table of Elements

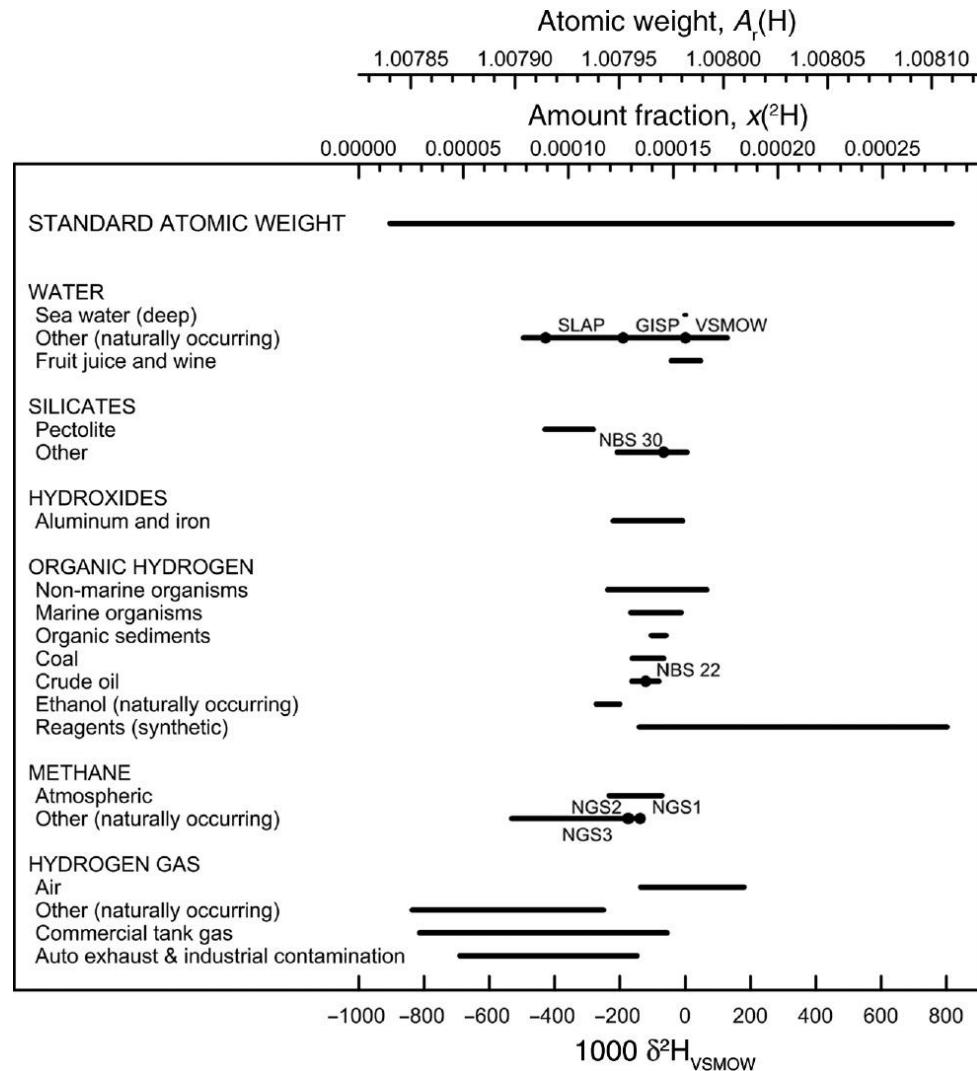
IUPAC Periodic Table of the Elements

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--



Неопределенность атомной массы
свинца превышает единицу
атомной массы!

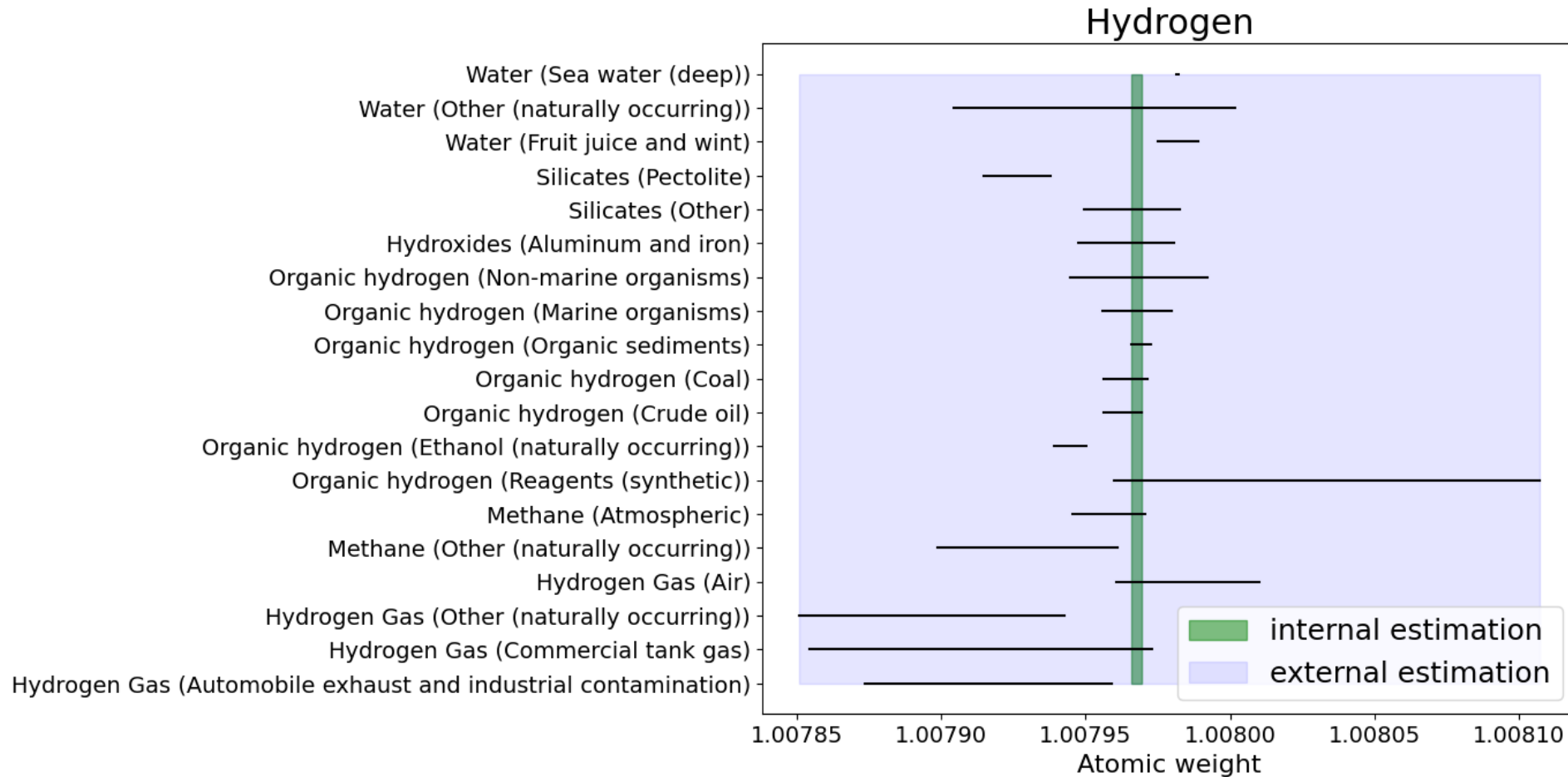
Изотопная информация водорода



Изотопная информация используется в различных науках и промышленности:

- космологии,
- климатологии,
- биологии,
- науках о земле,
- криминалистике,
- палеонтологии
- и других.

Атомный вес водорода



Сумма твинов

Tyrosine - $C_9H_{11}NO_3$

Phenylalanine - $C_9H_{11}NO_2$

Tryptophan - $C_{11}H_{12}N_2O_2$

Условие правильности внутренней оценки у Нестерова

Sum

Let's define inner length of twin as $|T|_I = |X_I|$ and outer length as $|T| = |X|$. If $I \sqsubseteq (\emptyset, X)$ then $|T|_I = -1$. It means that only outer estimation exists. Than

- if $|T_1| \leq |T_2|_I \vee |T_2| \leq |T_1|_I$ $T_1 + T_2 = ((p, q), (A - + B^-, A^+ + B^+))$
- else $T_1 + T_2 = ((\emptyset), (A - + B^-, A^+ + B^+))$

Результаты

Индексы Жаккара

$$Ji(\mathbb{T}) = \frac{wid(\mathbf{t}_{in})}{wid(\mathbf{T}_{ex})}$$

для аминокислот с разным
ТИПОМ ТВИНОВ.

В фенилаланине

прослеживается тип

фотосинтеза.

Acid	Type of twin	Jaccard index
Tyrosine	Nesterov	-0.01497
Phenylalanine	Nesterov	0.0183
Tryptophan	Nesterov	-0.0079
Tyrosine	Sainz et. al.	0.00999
Phenylalanine	Sainz et. al.	0.0095
Tryptophan	Sainz et. al.	0.00913

Tyrosine — $C_9H_{11}NO_3$
Phenylalanine — $C_9H_{11}NO_2$
Tryptophan — $C_{11}H_{12}N_2O_2$

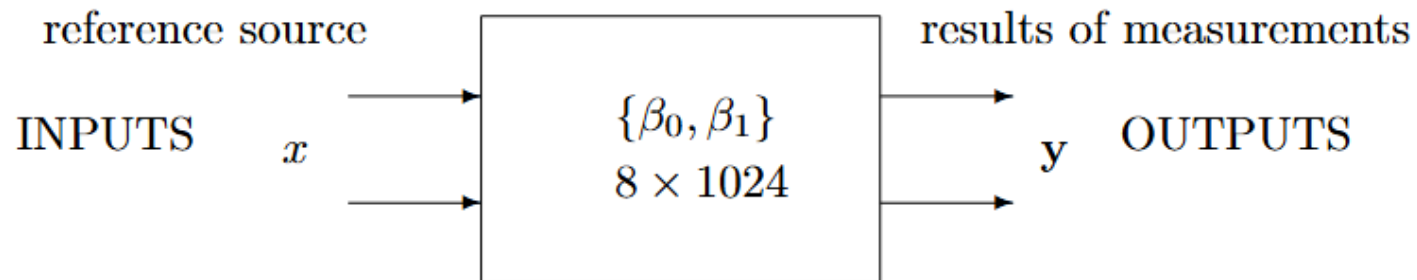
Открытые вопросы

- Как построить твин по данным?
- Другие приложения?

Задача линейной регрессии. Частный случай

$$Ax = b.$$

$$Y = \beta_0 + \beta_1 \cdot X$$



Множества решений ИСЛАУ

$$\Xi_{uni} = \{x \in R^m | (\exists A \in A)(\exists B \in B)(Ax = b)\},$$

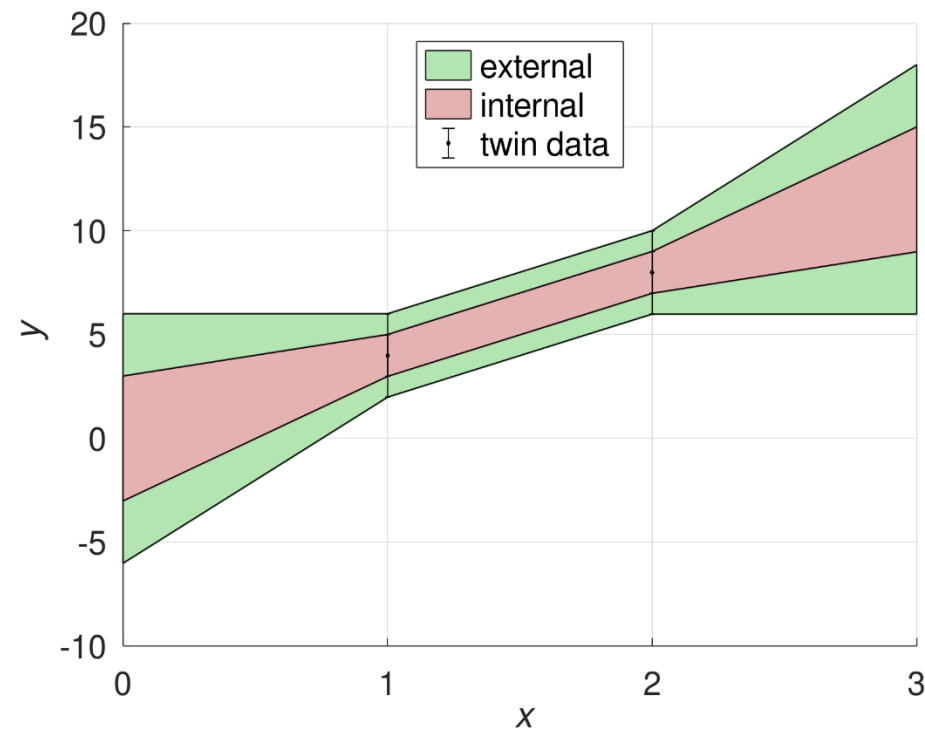
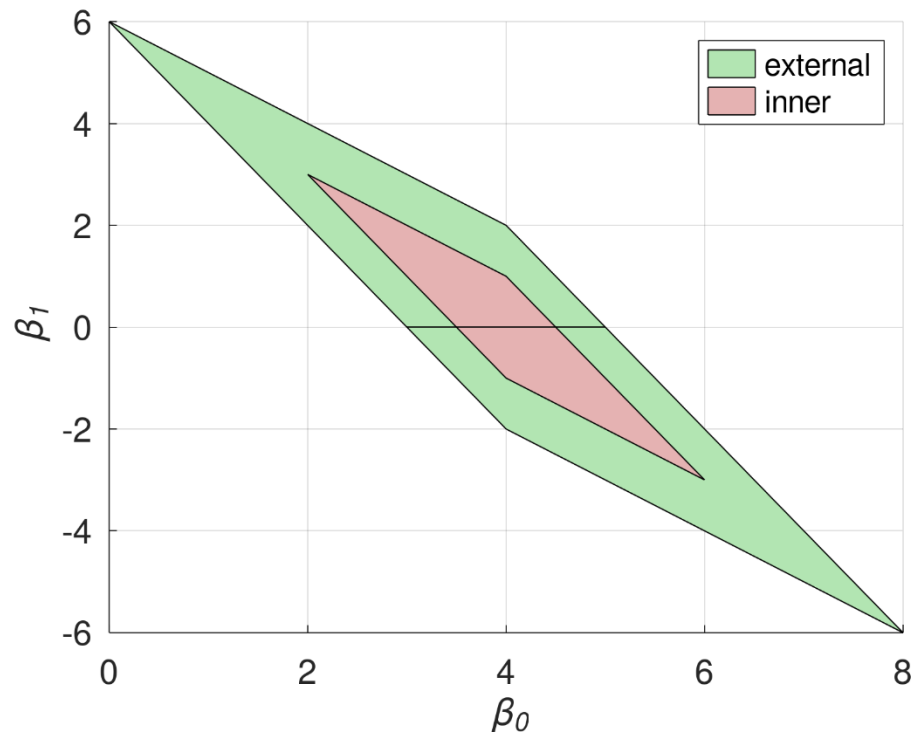
$$\Xi_{tol} = \{x \in R^m | \{x \in R^m | (\forall A \in A)(\exists B \in B)(Ax = b)\}\}.$$

Распознающий функционал

$$Tol(\beta, X, y) = \min_{1 \leq i \leq n} \{rad\ y_i - |mid\ y_i - \sum_{j=\overline{1,m}} x_{ij}\beta_j|\}$$

$$Tol_i(\beta, X, y) = rad\ y_i - |mid\ y_i - \sum_{j=\overline{1,m}} x_{ij}\beta_j| < 0 \longrightarrow i$$

Задача линейной регрессии



А что если система с внутренними оценками имеет пустое множество решений?

Метод I

1. Посчитать

$$Tol_i(\beta, X, y) = rad\ y_i - |mid\ y_i - \sum_{j=\overline{1,m}} x_{ij}\beta_j|$$

2. Найти индексы отрицательных Tol_i .

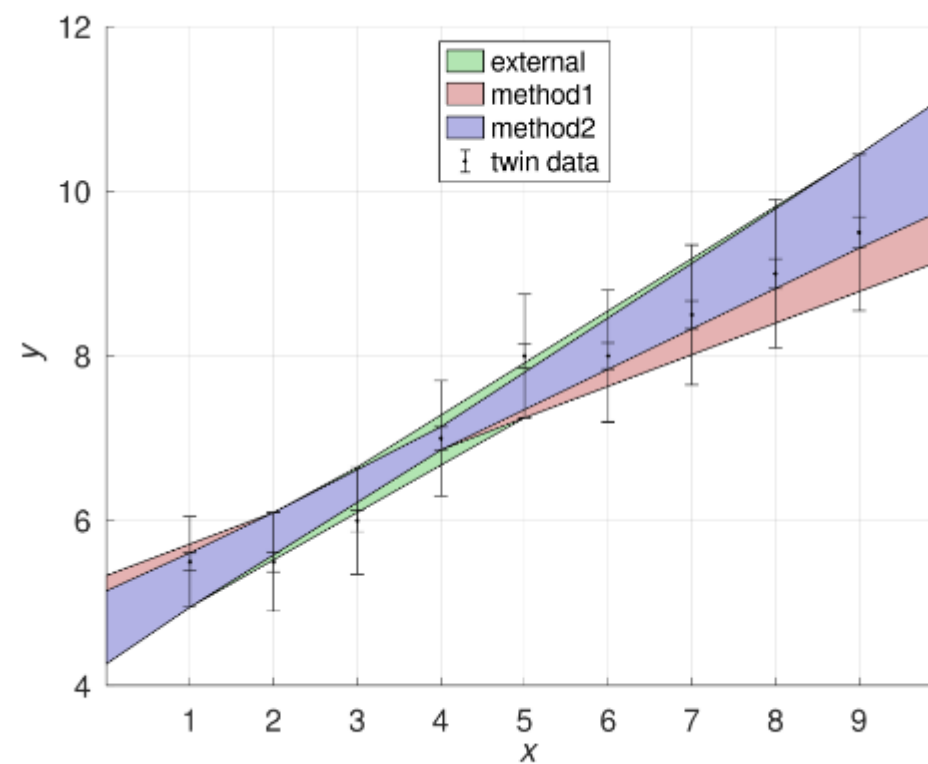
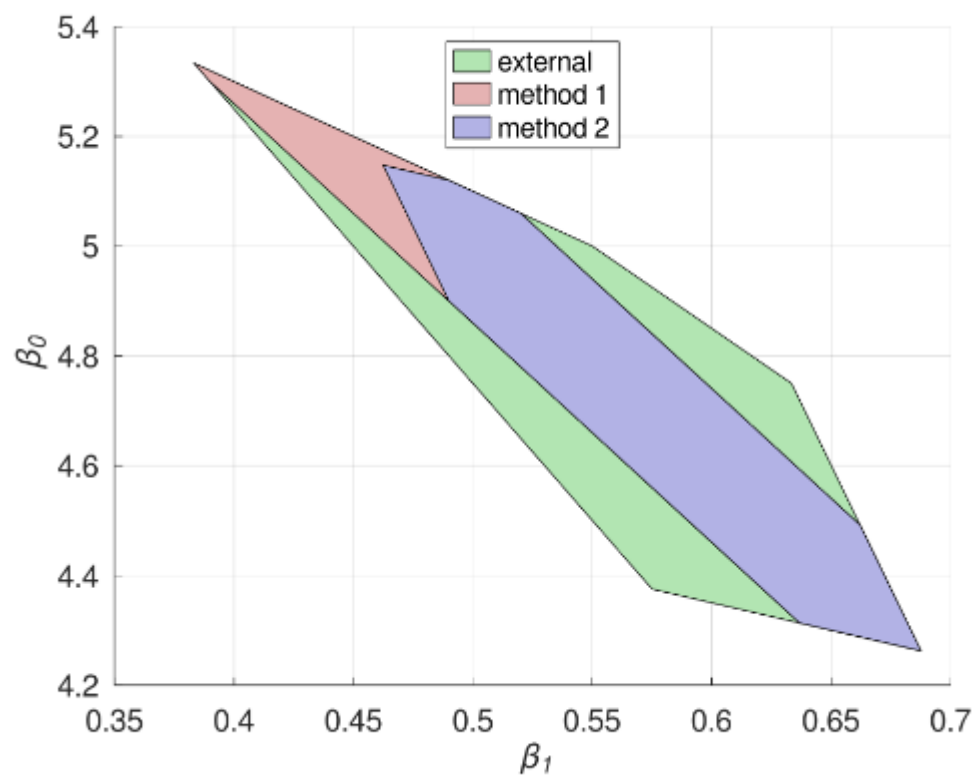
3. Взять внешние интервалы для найденных индексов.

Метод II

Добавить в систему новые уравнения, соответствующие другим правым частям:

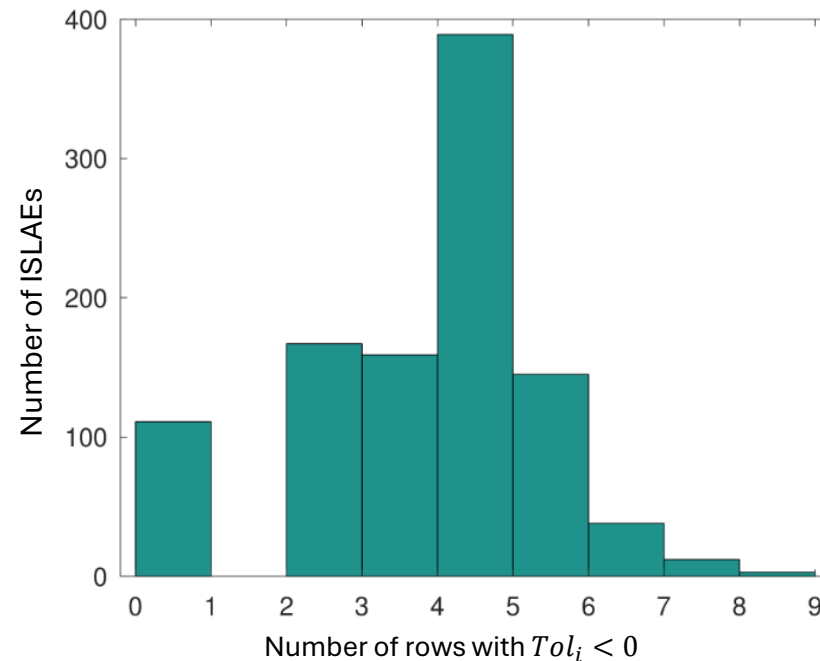


Пример. Множества решений



Приложение

Рассмотрим данные по калибровке 1024 приборов по линейной регрессии по 9 уровням. Для 100 с небольшим случаев все данные совместны. Для 400 случаев прямая проходит через половину измерений (каждая точка - 100 измерений)



Преимущества и недостатки алгоритмов

- Уменьшение множества решений
- Увеличение размера системы
- Как выбрать интервалы для двойного оценивания?

Заключение

- В работе расширена твинная арифметика Нестерова (добавлена полная интервальная арифметика)
- Рассмотрен способ использования твинов в изотопном анализе данных
- Приведены два алгоритма решения Твинных СЛАУ

To-do

- Развитие численных методов с использованием твинов
- Рассмотрение различных способов составления твина из изотопных данных
- Рассмотрение других постановок задач с двусторонним оцениванием

Спасибо за внимание!

tatianaiavoruk@gmail.com

github.com/Tatiana655/Twins

