ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К СРАВНЕНИЮ ИНТЕРВАЛЬНОГО И ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОГО ОЦЕНИВАНИЯ *

А.И. Овсеевич
ИПМех РАН

Рассматривается задача умножения с гарантированной точностью неопределенного вектора $x \in \mathbf{R}^n$ на точно известную матрицу A. Вектор локализован в многомерном координатном параллелепипеде (брусе) $\mathcal{B}$. Рассмотрим эллипсоид $\mathcal{E}$ минимального объема, содержащий интервал. После умножения на матрицу новая область локализации $A\mathcal{B}$ вообще говоря перестает быть брусом, а область $A\mathcal{E}$ остается эллипсоидом. Чтобы остаться в рамках интервального подхода нужно заменить $A\mathcal{B}$ на минимальный содержащий ее брус $\mathrm{Box}(A\mathcal{B})$. Получаются две области локализации: $\mathrm{Box}(A\mathcal{B})$ и $A\mathcal{E}$. Качество метода измеряется объемом области локализации. Результат сравнения зависит исключительно от матрицы A. Будем считать ее случайным элементом гауссовского ансамбля и изучим вероятность того, что интервальный подход лучше эллипсоидального. Основной результат состоит в том, что эта вероятность стремится к нулю, когда размерность задачи стремится к бесконечности.

1. Введение

Рассмотрим следующую простейшую задачу в области численных методов линейной алгебры. Дан вектор $x \in \mathbf{R}^n$, о котором известно лишь, что он находится внутри ограниченной области Ω, и кроме того дана точно известная матрица A. Мы хотим как можно точнее локализовать вектор Ax. Разумеется, вектор Ax содержится в $A\Omega$ и ничего более точного сказать нельзя. Но в реальности такой ответ не обязательно хорош. Скажем, для машинных вычислений области неопределенности Ω и $A\Omega$ обязательно должны принадлежать к некоторому классу "простых" множеств, для которых можно с легкостью проверить содержится ли в них данный вектор.

Имеется по крайней мере два класса подходящих областей: брусы $\mathcal{B} = \{x \in \mathbf{R}^n : |x_i - a_i| \le b_i\}$, и эллипсоиды $\mathcal{E} = \{x \in \mathbf{R}^n : \langle Q^{-1}(x-a), x-a\rangle \le 1\}$. Совокупность методов вычислений с векторами, локализованными в брусах, называют интервальным анализом, а аналогичные методы вычислений с векторами, локализованными в эллипсоидах, называют эллипсоидальным анализом.

Данная работа выросла из статьи [4], где приведены свидетельства того, что в задаче умножения вектора на матрицу эллипсоидальный анализ в некотором смысле лучше, чем интервальный. Точнее говоря, пусть изначально вектор локализован в брусе $\mathcal{B}$, а $\mathcal{E}$ — эллипсоид минимального объема содержащий $\mathcal{B}$. Конечно $\mathcal{E}$ также локализует вектор, но на этой стадии замена $\mathcal{B}$ на $\mathcal{E}$ приводит к очевидной потере точности. Однако, после умножения на A область $A\mathcal{B}$ не обязательно будет брусом, а область $A\mathcal{E}$ остается эллипсоидом. Чтобы остаться в рамках интервального подхода нужно заменить

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №11-08-00435.

$A\mathcal{B}$ на минимальный содержащий ее брус $\mathrm{Box}(A\mathcal{B})$. Получаются две области локализации: $\mathrm{Box}(A\mathcal{B})$ и $A\mathcal{E}$. В работе [4] предложено сравнивать качество методов по объему окончательных областей локализации.

1.1. Основное неравенство

Результат сравнения зависит исключительно от матрицы A, а не от исходного бруса, и определяется знаком $\gtrless$ в неравенстве

$$\prod_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \leq \frac{(\pi n)^{\frac{n}{2}}\,|\det A|}{2^n\,\Gamma\left(\dfrac{n}{2}+1\right)}. \tag{1.1}$$

Это неравенство задает множество матриц, для которых эллипсоидальный метод хуже интервального. Неравенство (1.1) непосредственно получается из точных формул для объемов эллипсоидов и брусов, в частности, множитель $\pi^{n/2}/\Gamma(\frac{n}{2}+1)$ возникает как объем шара, описанного вокруг единичного куба. Большинство реальных вычислительных задач линейной алгебры связаны с большой размерностью n. Поэтому мы сравниваем эллипсоиды и брусы при $n\to\infty$.

2. Случайные матрицы

Множество Ω_n матриц $n\times n$, удовлетворяющих неравенству (1.1) достаточно сложно. Несколько неопределенно можно сказать, что множество Ω_n довольно-таки бедное, в том смысле, что большинство матриц в нем не лежат. Но a priori неясно как измерить размер Ω_n и установить, что он мал. Мы предлагаем вероятностный подход: считаем, что матрица A — случайная, причем ее элементы — независимые гауссовские случайные величины с нулевым средним и единичной дисперсией, так что распределение любого элемента a_{ij} матрицы имеет вид

$$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \tag{2.1}$$

Естественно считать, что естественный размер множества Ω_n, на котором выполнено неравенство (1.1) задается вероятностью $\mathbf{P}(\Omega_n)=(2\pi)^{-n^2/2}\int_{\Omega_n}e^{-\frac{1}{2}\operatorname{Tr}AA^*}dA$. Здесь $\operatorname{Tr}AA^*=\sum a_{ij}^2$, и $dA=\prod da_{ij}$.

3. Основной результат

Теорема 1. *Вероятность события Ω_n состоящего в том, что интервалы лучше эллипсоидов стремится к нулю при $n\to\infty$. Другими словами,*

$$\mathbf{P}(\Omega_n)=(2\pi)^{-n^2/2}\int_{\Omega_n}e^{-\frac{1}{2}\operatorname{Tr}AA^*}dA=o(1). \tag{3.1}$$

На самом деле $\mathbf{P}(\Omega_n)=O(1/(n^2\log n))$.

Обозначим $\log \sum\limits_{j=1}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{\sqrt{n}}\right|$ через χ_i и определим

$$\psi_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\chi_i,\ C_n = \log\frac{(\pi n)^{\frac{1}{2}}}{2\,\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)^{1/n}},\ \Delta_n = \frac{1}{n}\log\left|\det\left(\frac{A}{\sqrt{n}}\right)\right|.$$

Множество Ω_n задается неравенством

$$\psi_n \le C_n + \Delta_n \tag{3.2}$$

и основной результат говорит о том, что такое неравенство выполняется с очень малой вероятностью. Причина состоит в том, что каждый член в неравенстве (3.2) имеет вполне определенный и даже детерминированный "предел по вероятности" при $n\to\infty$: $\psi_n = \frac{1}{2}\log\frac{2n}{\pi} + o(1)$, $C_n = \frac{1}{2}\log\frac{\pi e}{2} + o(1)$, $\Delta_n = -\frac{1}{2} + o(1)$, но предельное неравенство $\frac{1}{2}\log\frac{2n}{\pi} \le \frac{1}{2}\log\frac{\pi e}{2} - \frac{1}{2}$ в высшей степени неверно. В дальнейшем мы развернем эту аргументацию подробно.

3.1. Эвристический анализ неравенства (3.2)

Функции χ_i можно считать независимыми случайными величинами на вероятностном пространстве $n\times n$-матриц, а левая часть (3.2) имеет вид среднего значения $\psi_n = \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}\chi_i$. Поэтому при $n\to\infty$ можно применить закон больших чисел (ЗБЧ) к анализу левой части (3.2) и ожидать при этом, что

$$\psi_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\chi_i \to \mathbf{E}\chi_1 \text{ по вероятности.} \tag{3.3}$$

В силу центральной предельной теоремы (ЦПТ) распределение величины $f_i = \sum\limits_{j=1}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{\sqrt{n}}\right|$ прближенно гауссовское с ковариацией $1-\frac{2}{\pi}$ и математическим ожиданием $\sqrt{\frac{2n}{\pi}}$. Поэтому следует ожидать, что

$$\mathbf{E}\chi_1 = \mathbf{E}\log f_1 = \log\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + o(1), \tag{3.4}$$

и величина ψ_n содержится в $o(1)$-окрестности $\log\sqrt{\frac{2n}{\pi}}$ с вероятностью $1+o(1)$. Следовательно, при большом n неравенство (3.2) с подавляющей вероятностью должно принимать вид

$$\Delta_n \ge \log\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + \frac{1}{2}\log\frac{\pi e}{2} + o(1) = \frac{1}{2}\log n + \frac{1}{2} + o(1), \tag{3.5}$$

где величина ψ_n отсутствует. Благодаря Зигелю [1, 2] мы имеем явное выражение

$$\mathbf{E}|\det A|^k = (2\pi)^{-n^2/2}\int |\det A|^k\, e^{-\frac{1}{2}\operatorname{Tr}(AA^*)}dA = 2^{\frac{kn}{2}}\prod_{i=1}^{n}\frac{\Gamma\left(\frac{k+i}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{i}{2}\right)} \tag{3.6}$$

для $\mathbf{E}|\det A|^k$. В частности из (3.6) следует, что $\mathbf{E}e^{n\Delta_n} = o(1)$. Поэтому величина Δ_n может быть большой только с (экспоненциально) малой вероятностью, и вероятность события (3.5) стремится к нулю при $n\to\infty$.

3.2. Строгий анализ левой части неравенства (3.2)

В предшествующих аргументах неявным образом подразумевалось, что некоторые предельные переходы можно переставлять. Мы не будем подводить базу в точности под эти соображения, а используем вместо ЦПТ субгауссовские оценки. Это позволит убрать один из предельных переходов.

Вещественная случайная величина называется субгауссовской, если $\mathbf{E}e^{\lambda\xi} \le e^{\frac{1}{2}\lambda^2}$ для любого вещественного λ. Следующий факт для нас весьма важен:

Теорема 2. *Если x — стандартная гауссовская величина, то величина*

$$\xi = |x| - \mathbf{E}|x| \tag{3.7}$$

является субгауссовской.

В самом деле $\mathbf{E}|x| = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$, $\mathbf{E}e^{\lambda\xi} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-\lambda\sqrt{\frac{2}{\pi}}}\left(\int_{-\lambda}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2}dx\right)e^{\frac{1}{2}\lambda^2}$ и доказательство сводится к проверке неравенства

$$\sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-\lambda\sqrt{\frac{2}{\pi}}}\left(\int_{-\lambda}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2}dx\right) \le 1 \tag{3.8}$$

для вещественного λ. В принципе, его можно проверить численно, например, используя Maple. Можно дать и вполне теоретическое доказательство на основе теории логарифмической вогнутости [5]. В самом деле, достаточно показать, что левая часть (3.8) имеет единственный локальный максимум, который в таком случае достигается при $\lambda = 0$. В точке максимума λ, выполнено условие $\frac{e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}}{\int_{-\lambda}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2}dx} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$. Чтобы установить единственность достаточно показать, что $\lambda \mapsto \log\int_{-\lambda}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2}dx$ — строго вогнутая функция. Но

$$\log\int_{-\lambda}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2}dx = \log\int_{0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x-\lambda)^2}dx,$$

и требуемое заключение вытекает из того, что функция

$$\phi : (x,\lambda) \mapsto \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}(x-\lambda)^2}, & \text{при } x > 0 \\ 0, & \text{при } x \le 0 \end{cases}$$

логарифмически вогнута, а интересующая нас функция получается из ϕ интегрированием по параметру x (см., например, [5], Chapter 4).

Отсюда немедленно получаем такое следствие.

Следствие 1. *Каждая случайная величина $\widetilde{\xi} = f_i - \sqrt{\frac{2n}{\pi}} = \sum_{j=1}^{n} \frac{|a_{ij}| - \mathbf{E}|a_{ij}|}{\sqrt{n}}$ является субгауссовской.*

В свою очередь, из этого следствия вытекает такое неравенство типа Чернова

$$\mathbf{P}\left(\widetilde{\xi} \ge x\right) \le e^{-\frac{1}{2}x^2} \text{ и } \mathbf{P}\left(\widetilde{\xi} \le -x\right) \le e^{-\frac{1}{2}x^2} \text{ если } x \ge 0. \tag{3.9}$$

В самом деле, ясно, что если величины η_i — независимые субгауссовские, то величина $\eta = \sum_{i=1}^{n} \eta_i/\sqrt{n}$ также субгауссовская. Тем самым величина $\widetilde{\xi}$ является субгауссовской, а оценка (3.9) следует из неравенства Чебышева. Более точно, если η — субгауссовская случайная величина, то из неравенства Чебышева следует, что $\mathbf{P}(\eta \geq x) = \mathbf{P}(e^{\lambda\eta} \geq e^{\lambda x}) \leq e^{\frac{1}{2}\lambda^2 - \lambda x}$ для любого $\lambda \geq 0$. Минимизируя по λ получим, что $\mathbf{P}(\eta \geq x) \leq e^{-\frac{1}{2}x^2}$ при $x \geq 0$. Аналогично $\mathbf{P}(\eta \leq -x) \leq e^{-\frac{1}{2}x^2}$ при $x \geq 0$.

Кроме того, выполнено следующее простое (в сравнении с (3.9)) неравенство. Пусть p — плотность вероятности случайной величины $\widetilde{\xi}$, тогда

$$\sup p(x) \leq \sqrt{2n/\pi} = D. \tag{3.10}$$

В самом деле, последнее неравенство непосредственно вытекает из того, что плотность вероятности случайной величины $|x_i|$ есть $\sqrt{2/\pi}e^{-\frac{1}{2}x^2}$ при $x \geq 0$, и 0 при $x < 0$. Поэтому она никогда не превышает $\sqrt{2/\pi}$.

Мы получим из (3.9), (3.10) следующий набор асимптотических равенств:

$$\mathbf{E}\log f_i = \log\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + o(1), \tag{3.11}$$

$$\mathbf{E}\log^2 f_i = \log^2\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + o(1), \tag{3.12}$$

$$\mathbf{E}\left|\log f_i - \mathbf{E}\log f_i\right|^2 = o(1), \tag{3.13}$$

где последнее равенство вытекает из предыдущих. Точнее,

$$\mathbf{E}\log f_i = \log\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + O\left(\frac{1}{n}\right), \tag{3.14}$$

$$\mathbf{E}\log^2 f_i = \log^2\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + O\left(\frac{\log n}{n}\right), \tag{3.15}$$

$$\mathbf{E}\left|\log f_i - \mathbf{E}\log f_i\right|^2 = O\left(\frac{\log n}{n}\right). \tag{3.16}$$

В частности, выполнено асимптотическое равенство (3.4), и можно применить ЗБЧ для обоснования (3.3). Тем самым, в некотором разумном смысле $\psi_n - \log\sqrt{\frac{2n}{\pi}} \to 0$.

Перейдем к обоснованию апсимптотической формулы (3.3). Воспользуемся стандартной схемой доказательства закона больших чисел. Видно, что разность левой и правой части мала в средне-квадратичном смысле:

$$\mathbf{E}(\psi_n - \mathbf{E}\psi_n)^2 = \mathbf{E}\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\chi_i - \mathbf{E}\chi_i)\right|^2 = \frac{1}{n}\mathbf{E}\left(\chi_1 - \mathbf{E}\chi_1\right)^2 = o(1). \tag{3.17}$$

В самом деле, ввиду (3.13) $\frac{1}{n}\mathbf{E}\left(\chi_1 - \mathbf{E}\chi_1\right)^2 = O(\frac{\log n}{n^2})$.

Наконец, соотношения (3.17), (3.4) и неравенство Чебышева вместе доказывают такую оценку:

$$\mathbf{P}\left(\psi_n \leq \frac{1}{4}\log n + C\right) = o(1), \tag{3.18}$$

где C — произвольная абсолютная константа, а член $o(1)$ есть на самом деле $O(\frac{1}{n^2\log n})$. Тем самым величина ψ_n с подавляющей вероятностью весьма велика.

3.3. Анализ правой части (3.2)

Чтобы доказать, что величина Δ_n принимает большие значения с очень малой вероятностью используем формулу Зигеля (3.6) для экспоненциального момента

$$\mathbf{E}e^{n\Delta_n} = \left(\frac{2}{n}\right)^{\frac{n}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma(1/2)}. \tag{3.19}$$

Логарифм правой части (3.19) есть $-\frac{n}{2} - \frac{1}{2} + o(1)$ ввиду формулы Стирлинга. Теперь с помощью неравенства Чебышева можно оценить вероятность больших значений Δ_n так:

$$\mathbf{P}(\Delta_n \geq x) \leq e^{-nx}\mathbf{E}e^{n\Delta_n} \sim e^{-nx-\frac{n}{2}-\frac{1}{2}}.$$

В частности,

$$\mathbf{P}\left(\Delta_n \geq \frac{1}{4}\log n + C\right) \leq (1+o(1))e^{-\frac{1}{4}n\log n}, \tag{3.20}$$

где C — произвольная константа.

3.4. Подведение итогов

Вернемся к неравенству (3.2), где $C_n \to C = \frac{1}{2}\log\frac{\pi e}{2}$ ввиду формулы Стирлинга. Если неравенство (3.2) выполнено для больших n, то либо $\psi_n \leq \frac{1}{4}\log n + C + 1$, либо $\Delta_n \geq \frac{1}{4}\log n - C - 1$. Но ввиду соотношений (3.18), (3.20) эти события bv.n малые вероятности при $n \to \infty$. Это доказывает основную теорему 1, утверждающую что вероятность превосходства интервалов над эллипсоидами мала при $n \to \infty$. На самом деле эта вероятность есть $O(1/(n^2\log n))$. Можно считать, что получено некоторое свидетельство в пользу преимущества эллипсоидов над интервалами в линейно-алгебраических вычислениях с гарантированной точностью.

Список литературы

[1] Siegel, C.L. Über die analytische Theorie der quadratischen Formen, Ann. Math. Ser. 2, **36** (1935), 527–606.

[2] Godement, R., Fonctions holomorphes de carré sommable dans le demi-plan de Siegel, Seminaire H. Cartan, Ecole Normale Supérieure, Paris, 1958.

[3] Helgason, Sigurdur, Differential Geometry and Symmetric Spaces, Academic Press, New York London 1962.

[4] Овсеевич, А.И., Тарабанько, Ю.В., Черноусько, Ф.Л., Сравнение интервальных и эллипсоидальных оценок погрешности векторных операций, ДАН 2005, т. 71, 1, 127-130.

[5] Simon, Barry, Functional Integration and Quantum Physics, Academic Press New York San Francisco London 1979.