

Les contraintes d'intervalles

Application à l'estimation de paramètres

Laurent Granvilliers

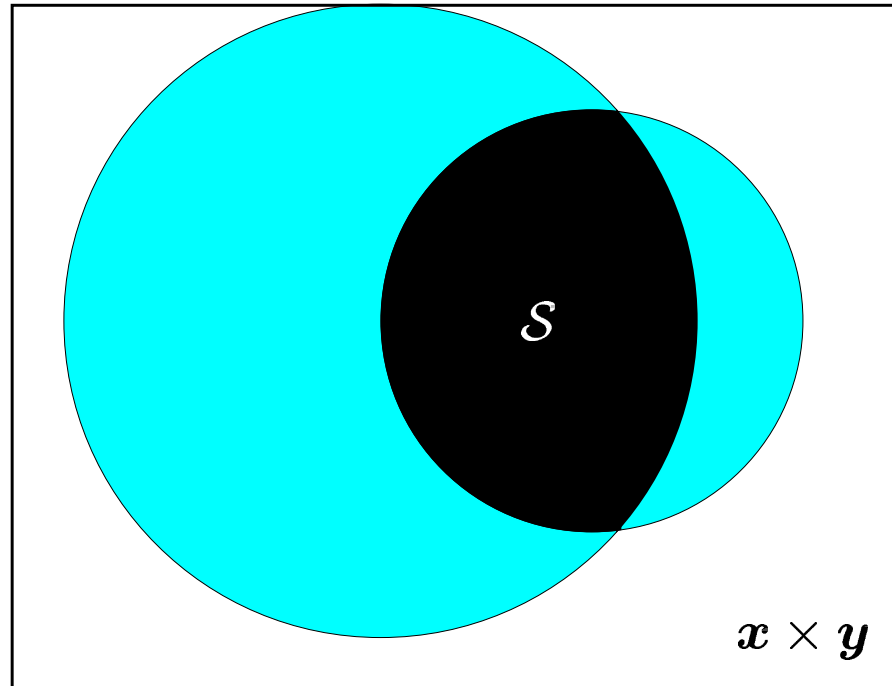
`granvilliers@irin.univ-nantes.fr`

IRIN – Université de Nantes

Plan

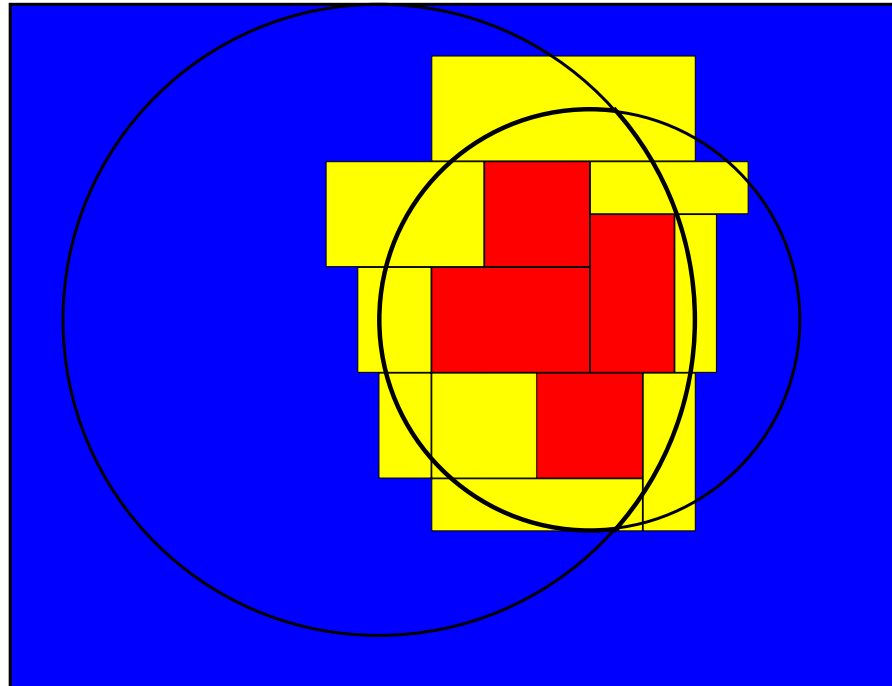
- Introduction
- Arithmétique d'intervalles
- Contraintes d'intervalles
- Estimation ensembliste de paramètres
- Résultats expérimentaux
- Perspectives

Systeme de contraintes



$$\left\{ \begin{array}{l} (x, y) \in \mathbf{x} \times \mathbf{y} \\ (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 \leq r_0^2 \\ (x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 \leq r_1^2 \end{array} \right.$$

Approximation des solutions



- Ensemble de pavés intérieurs
- Ensemble de pavés extérieurs
- Pas de perte de solution

Arithmétique d'intervalles

Ramon E. Moore 66

Les grandes lignes

- Représentation des données incertaines

$$U = 12V \pm 0.025 \in [11.975, 12.025]V$$

- Quantification des erreurs

$$\pi \in 3.14 \pm 0.01 = [3.13, 3.15]$$

- Calculs sur des ensembles de nombres réels

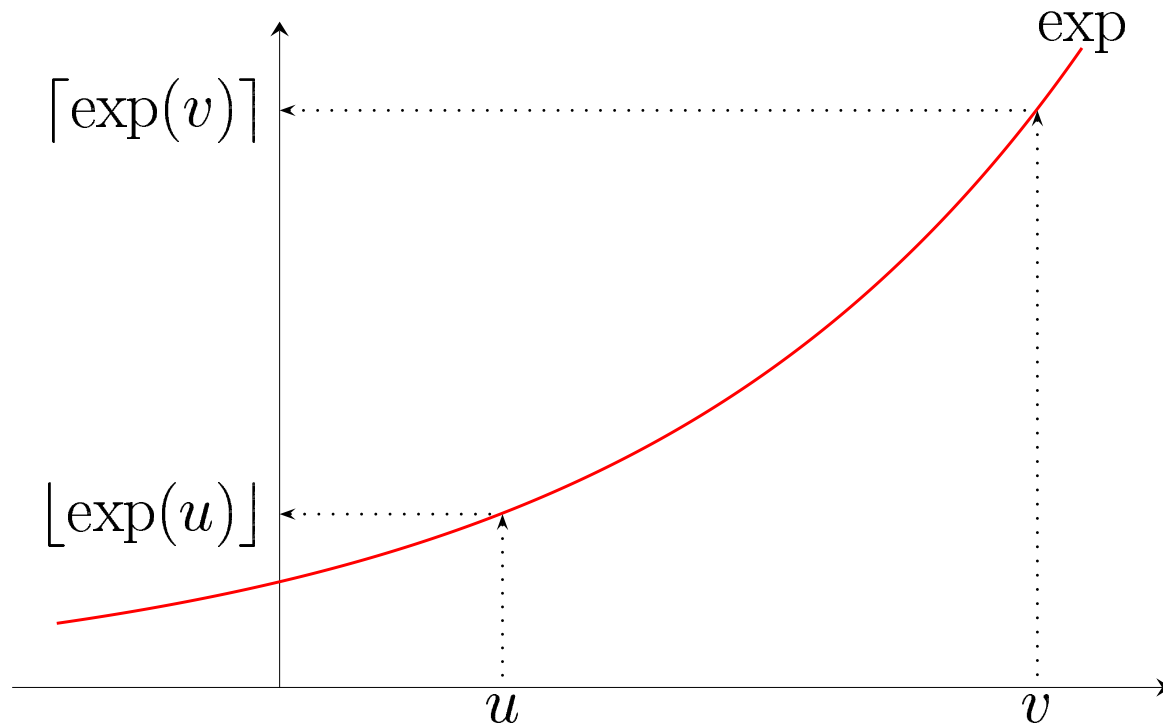
$$[-1, 4] + [0, 2] = [-1 + 0, 4 + 2] = [-1, 6]$$

$$[-1, 4] - [0, 2] = [-1 - 2, 4 - 0] = [-3, 4]$$

$$\log([-1, 1]) = [-\infty, 0]$$

- Analyse par intervalles

Opérations arithmétiques



- \exp monotone croissante \implies calcul sur les bornes
- Gestion des arrondis vers les infinis
- Calcul garanti : $\{\exp(x) \mid x \in [u, v]\} \subseteq [\lfloor \exp(u) \rfloor, \lceil \exp(v) \rceil]$

Évaluation de fonction réelle

Soit

$$\begin{cases} f(x) = x \exp(x) + 1 \\ x \in [0, 1] \end{cases}$$

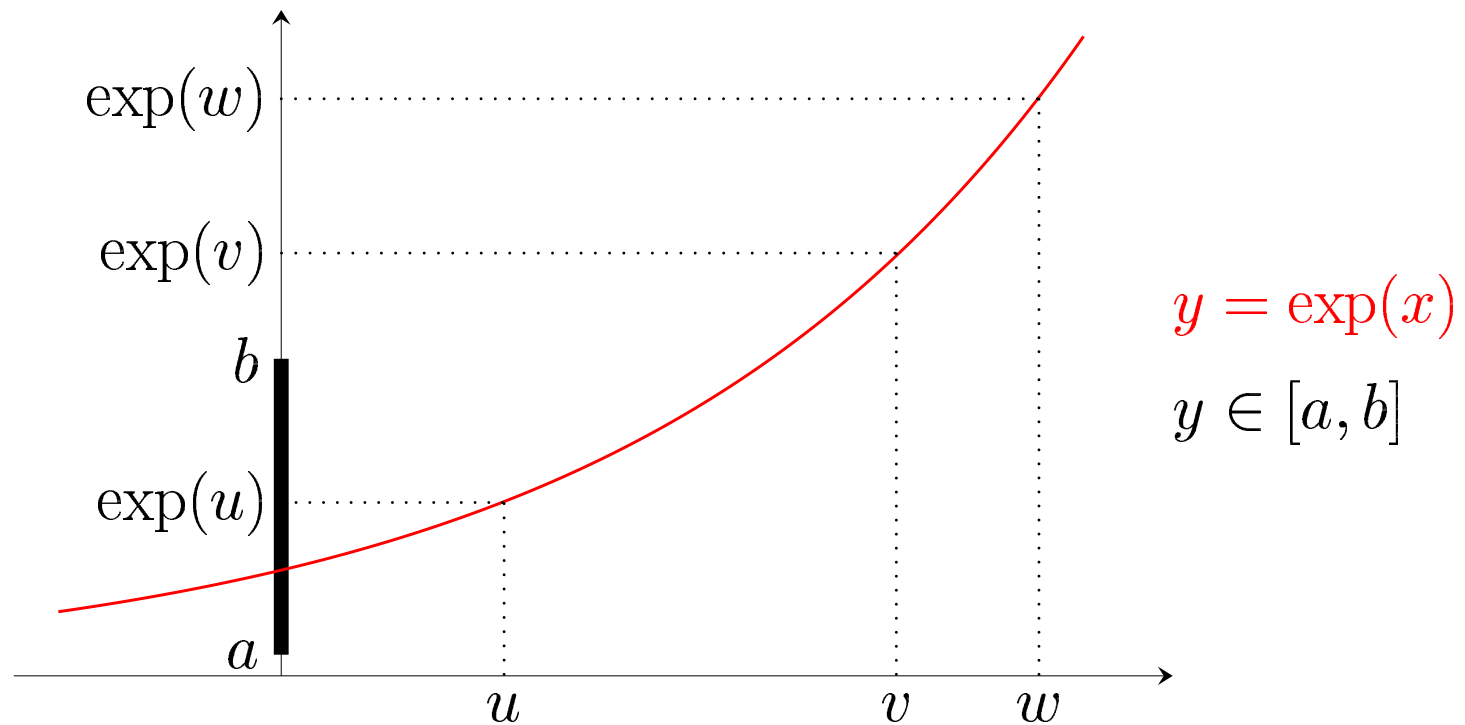
- Évaluation naturelle \implies sur-ensemble de la variation de f sur $[0, 1]$

$$\{f(x) \mid x \in [0, 1]\} \subseteq [0, 1] \times \exp([0, 1]) + [1, 1]$$

- Problème de dépendance \implies sur-estimation

$$\{x - x \mid x \in [0, 1]\} \subseteq [0, 1] - [0, 1] = [-1, 1]$$

Satisfaction de contraintes



- $x \in [v, w]$, $\exp([v, w]) \cap [a, b] = \emptyset$
 \implies pas de solution de la contrainte dans $[v, w] \times [a, b]$
- $x \in [u, v]$, $\exp([u, v]) \cap [a, b] \neq \emptyset$
 \implies peut-être des solutions dans $[u, v] \times [a, b]$

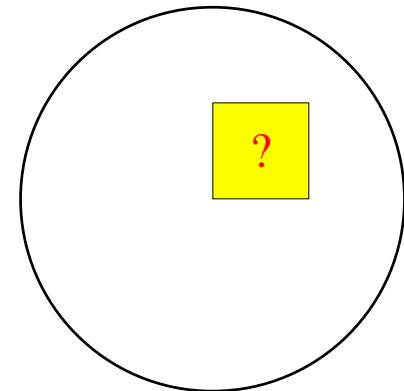
Approche intérieure

- 3 caractérisations d'un pavé
 - pas de solution (bleu)
 - peut-être des solutions (jaune)
 - que des solutions (rouge)

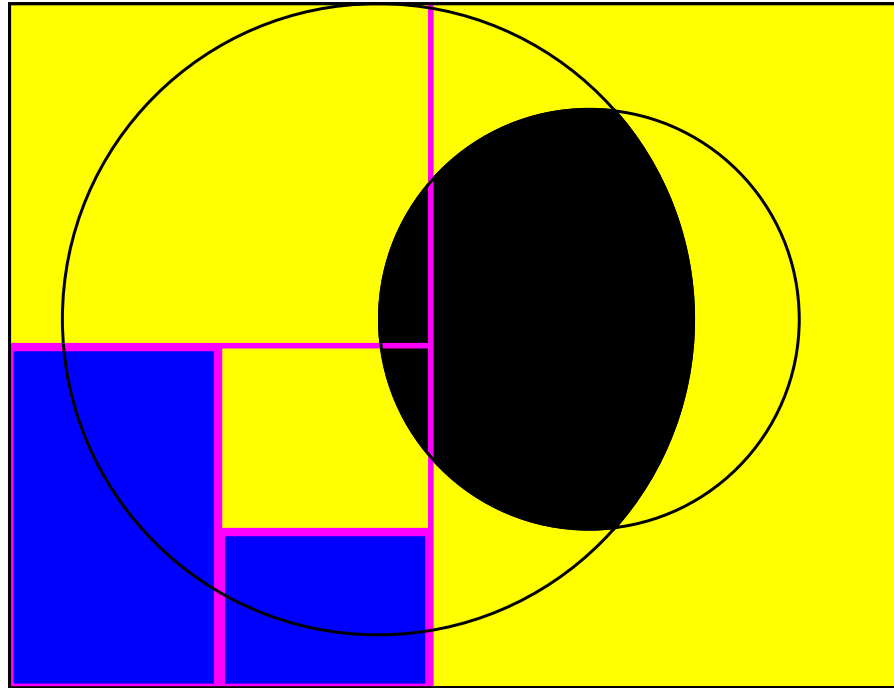
- De jaune à rouge

ex. $x^2 + y^2 \leq 4, (x, y) \in [0, 1]^2$

- Évaluation de $x^2 + y^2 \implies [0, 2]$
- Test : pour tout a dans $[0, 2]$, on a $a \leq 4$
 \implies le pavé $[0, 1]^2$ devient rouge



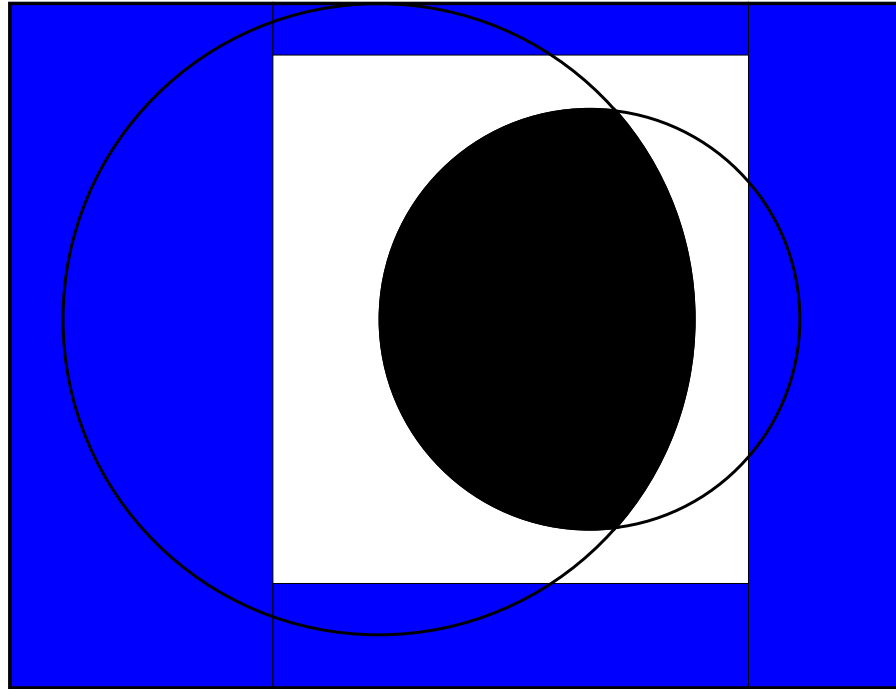
Algorithme évaluation-découpage



- Listes de pavés jaunes, bleus, rouges
- Contrainte non satisfaite : jaune \implies bleu
- Calcul intérieur : jaune \implies rouge
- Découpage : jaune \implies pavés jaunes plus petits

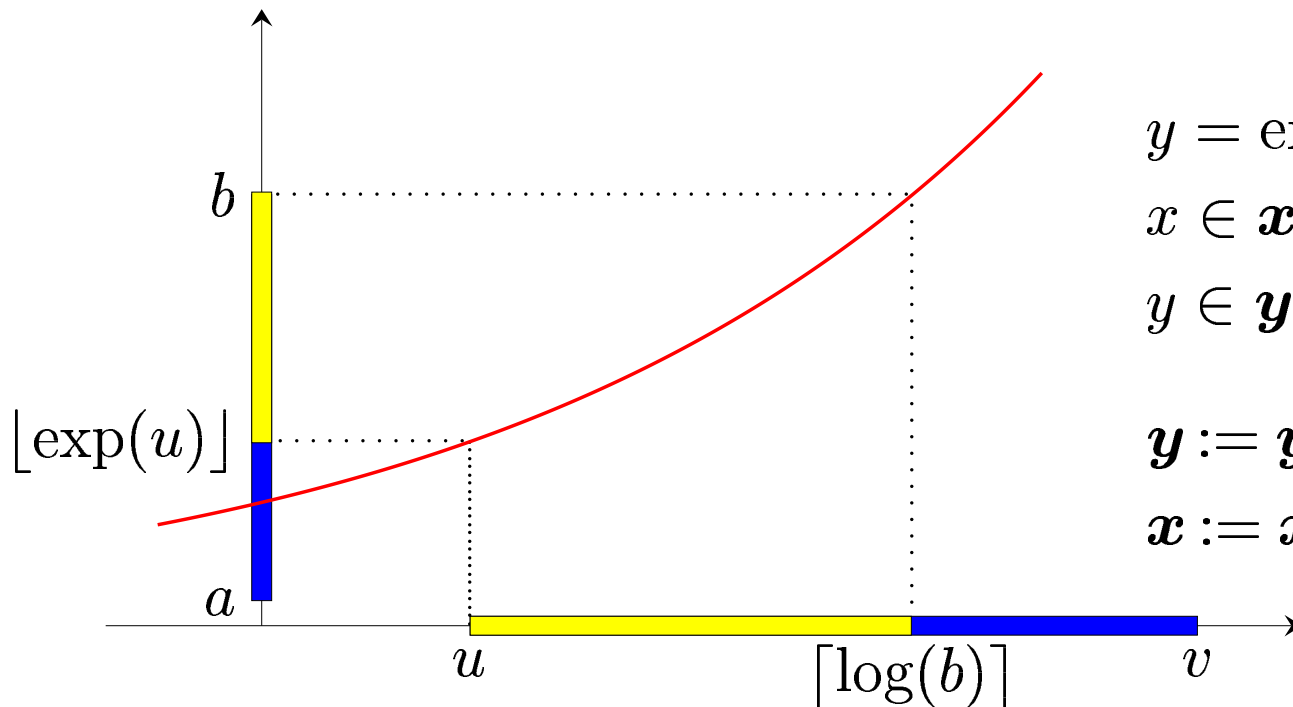
Contraintes d'intervalles

Réduction de domaines



- But : exclure des sous-domaines ne contenant pas de solution avant de découper
- Amélioration de la complexité pratique par des algorithmes polynomiaux

Réduction par inversion



$$y = \exp(x)$$

$$x \in \mathbf{x} = [u, v]$$

$$y \in \mathbf{y} = [a, b]$$

$$\mathbf{y} := \mathbf{y} \cap \exp([u, v])$$

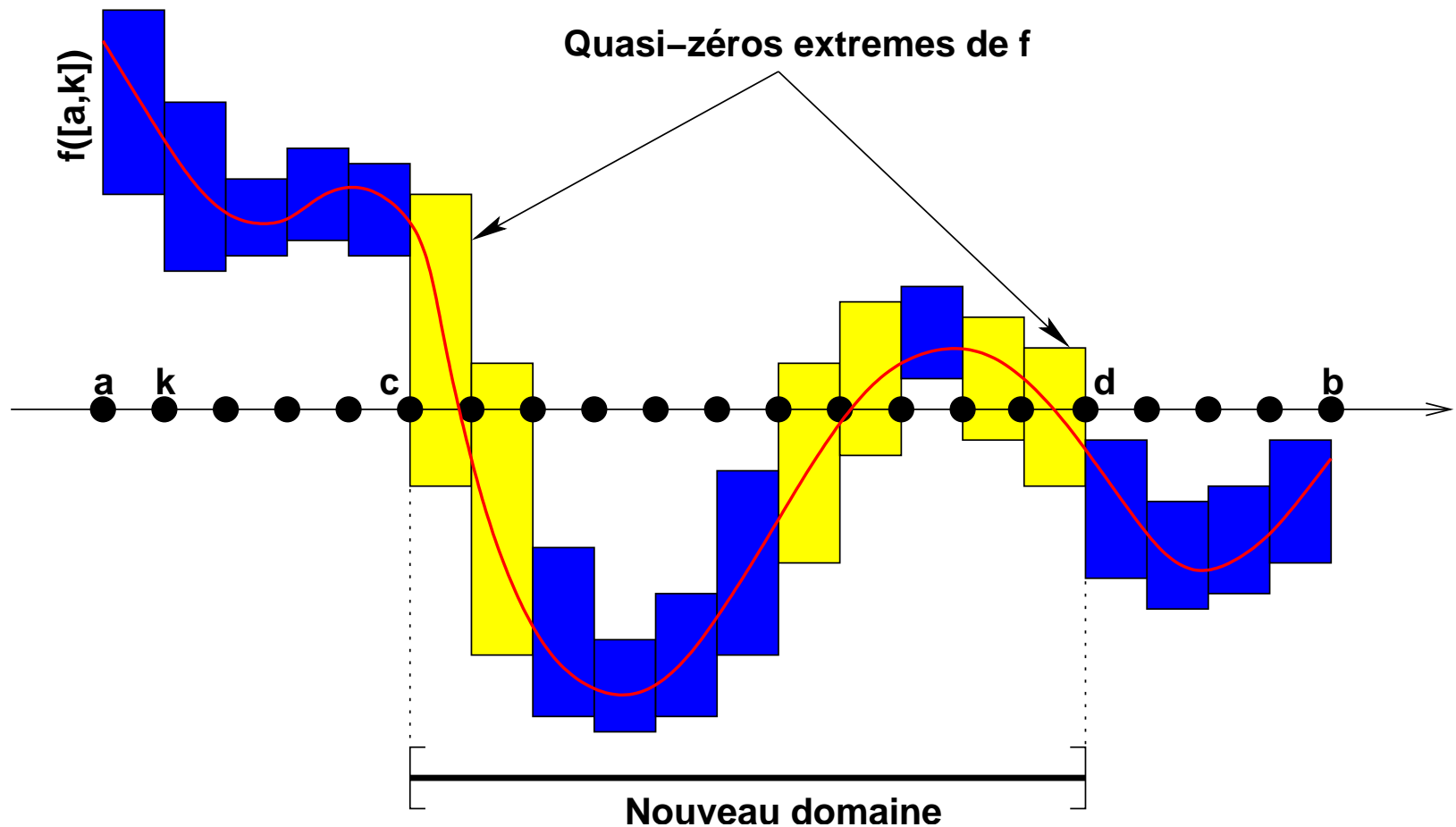
$$\mathbf{x} := \mathbf{x} \cap \exp^{-1}([a, b])$$

- Arithmétique relationnelle, John G. Cleary 87
- Décomposition en contraintes primitives

$$x + y^2 = 1 \quad \Longrightarrow \quad \{w = y^2, x + w = 1\}$$

Réduction par découpage local

- Box consistency, Frédéric Benhamou *et al* 94
- Exemple pour $f(x) = 0$



Propagation de contraintes

- But : partager et propager les réductions de domaines obtenues des différentes contraintes
- Soit par exemple

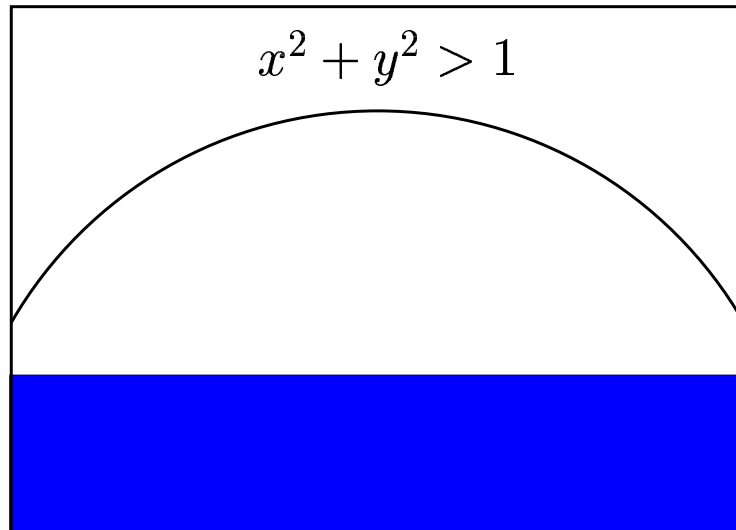
$$\begin{cases} x \in \mathbf{x} = [0, 6] \\ c_1 : (x - 1)(x - 2)(x - 3)(x - 4) = 0 \\ c_2 : (x - 0.5)(x - 1.5)(x - 3)(x - 3.5)(x - 5) = 0 \end{cases}$$

- Réductions (au mieux) :

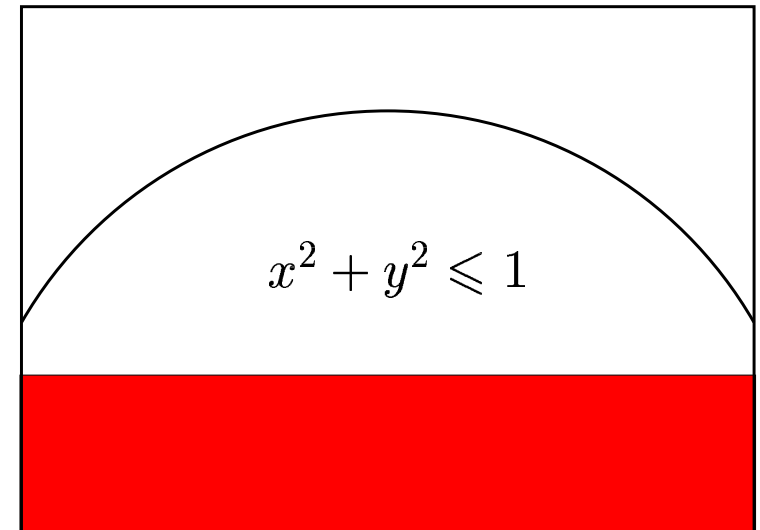
$$[0, 6] \xrightarrow{c_1} [1, 4] \xrightarrow{c_2} [1.5, 3.5] \xrightarrow{c_1} [2, 3] \xrightarrow{c_2} [3, 3]$$

- Propriété : point-fixe obtenu en temps fini

Calcul intérieur par négation



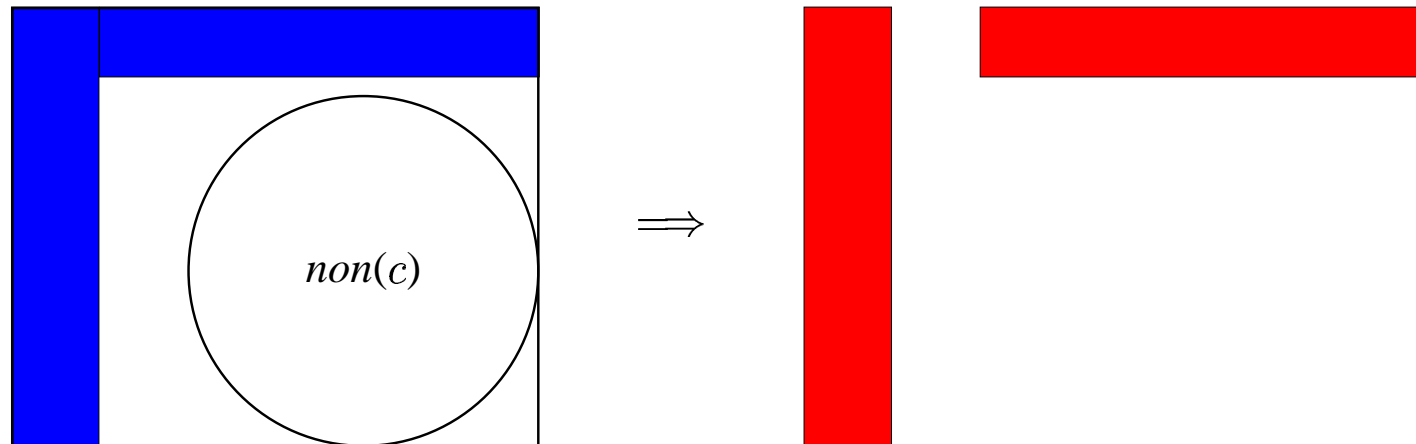
\Rightarrow



- Pas de solution pour $c \Rightarrow$ que des solutions pour la négation de c
- Adapté aux inégalités
- Ici, le pavé rouge est aussi solution de $(\forall x \ x^2 + y^2 \leq 1)$

Propagation de contraintes

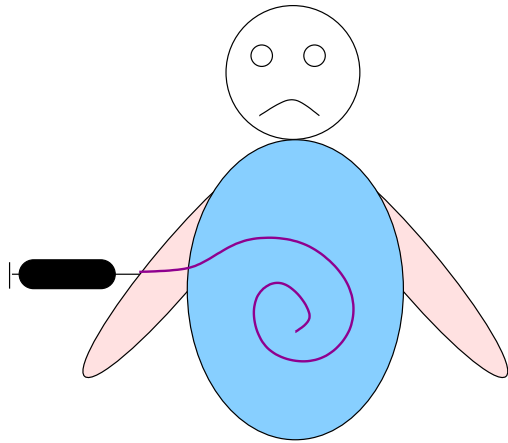
- But : Calculer un pavé intérieur pour un ensemble de contraintes
- Un calcul intérieur par contraintes



- Chaque pavé intérieur pour c est réduit par rapport aux autres contraintes
- Pas de retour sur une contrainte

Estimation de paramètres

Exemple en pharmacocinétique



- Injection en intraveineuse
- y : concentration de médicament

- Décroissance constante de la concentration au cours du temps

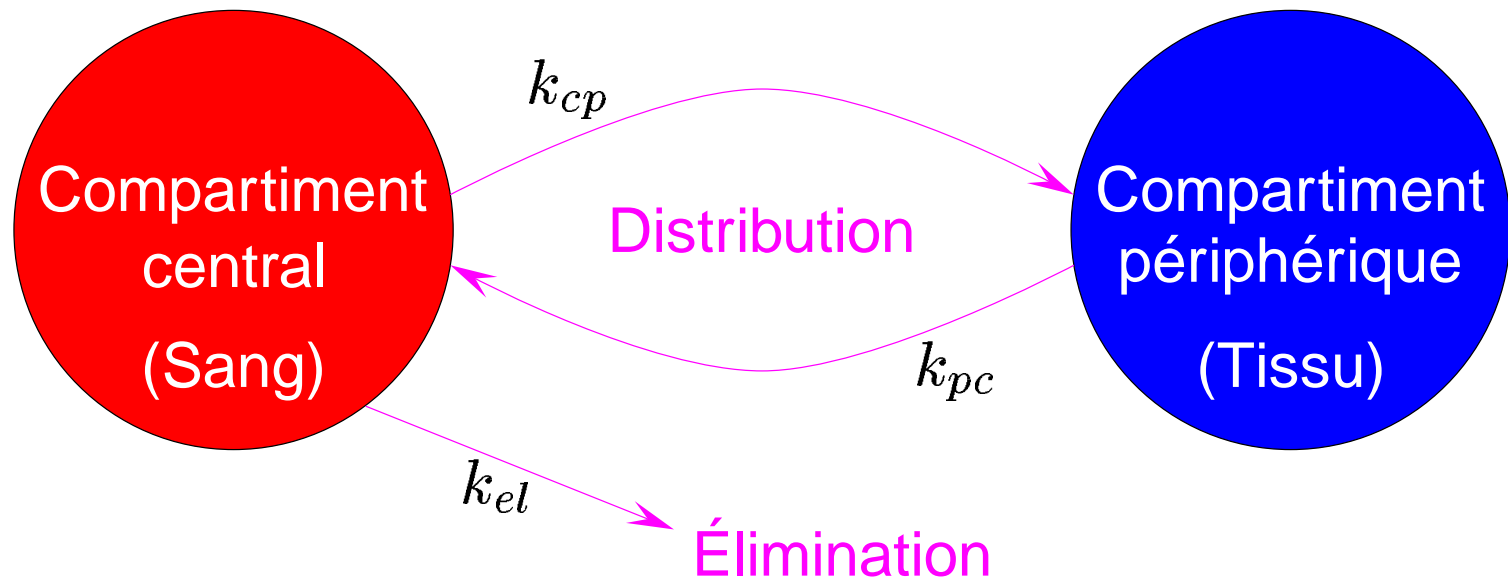
$$\frac{dy}{dt} = -k \cdot y$$

- Modèle

$$y(t) = y(0) \cdot \exp(-k \cdot t)$$

Modèle à compartiments

- Exemple de 2 compartiments

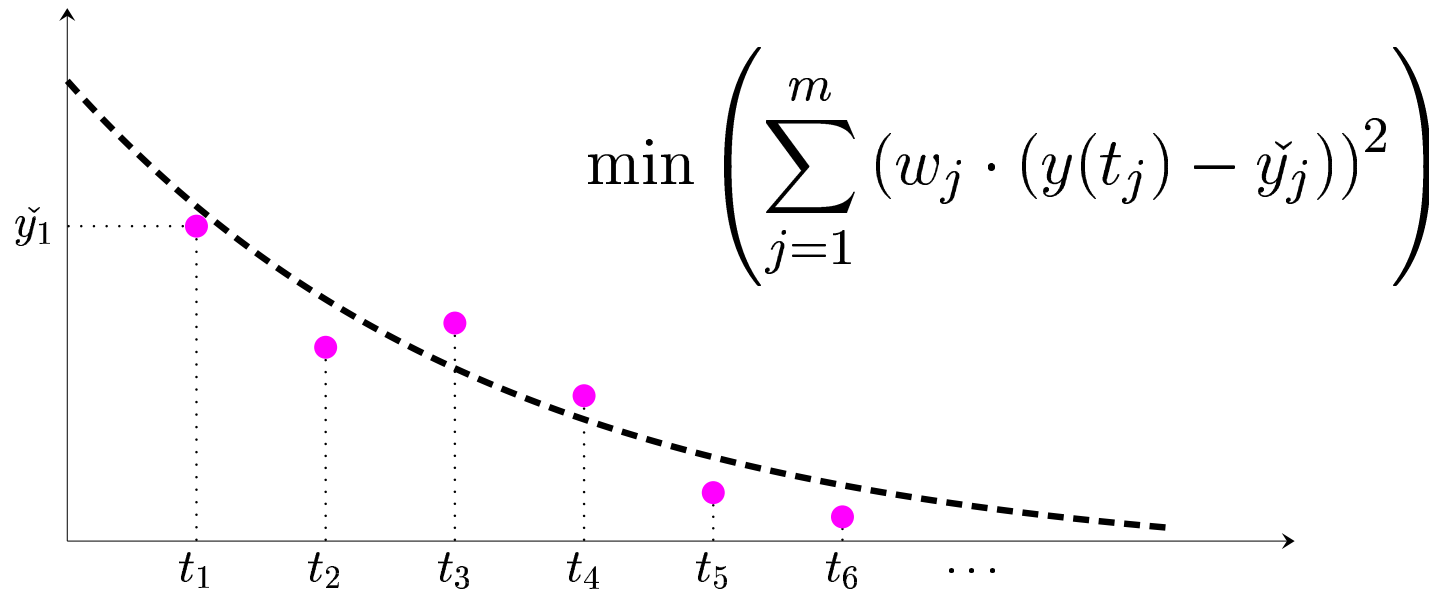


- Modèle en sommes d'exponentielles

$$y(t) = \sum_i x_{2i-1} \cdot \exp(-x_{2i} \cdot t)$$

Estimation de paramètres

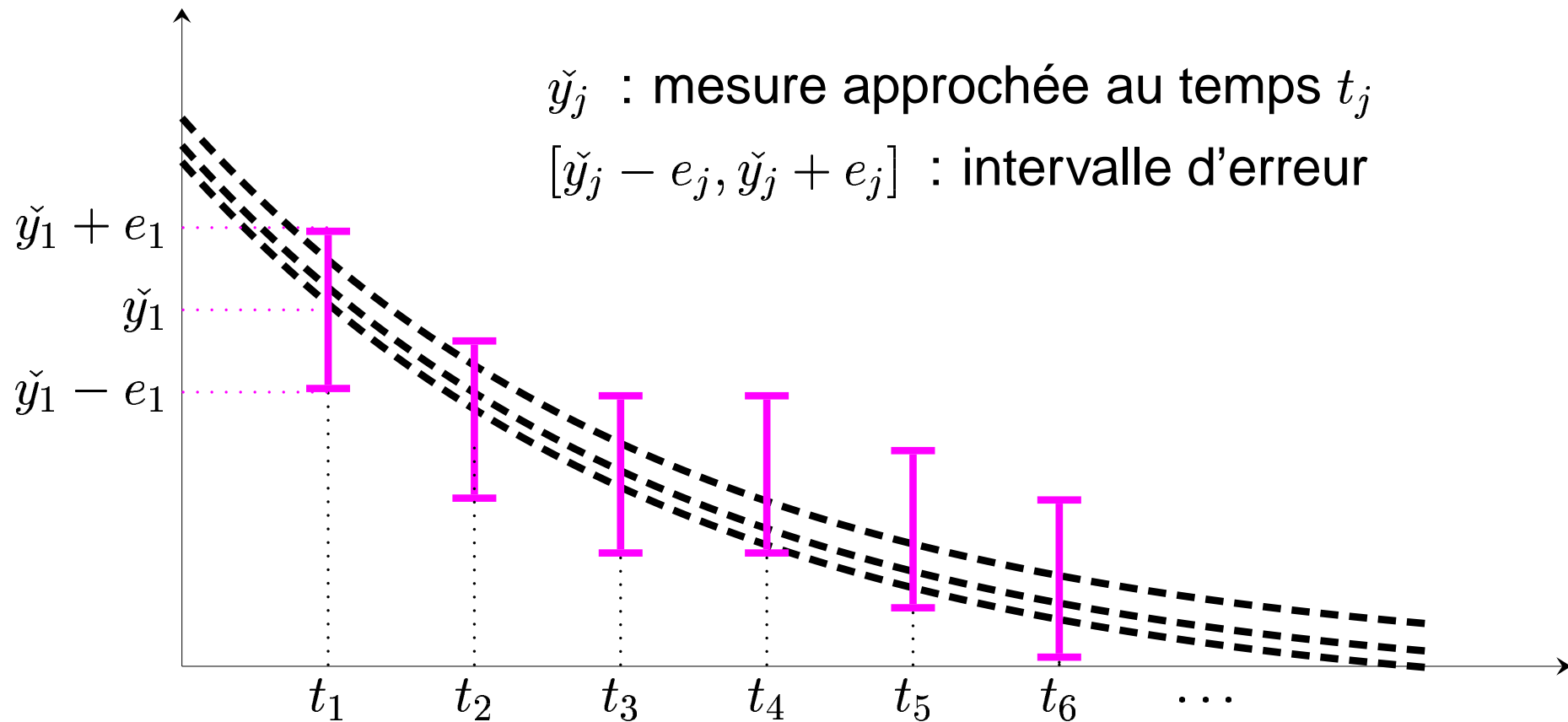
- Mesures (t_j, \check{y}_j) , $j = 1, \dots, m$
- Vecteur de paramètres $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$
- Approche classique en optimisation



⇒ nombreux minima locaux, sensibilité aux valeurs initiales, non prise en compte du bruit sur les données

Estimation ensembliste

- Données bruitées dans un contexte à erreurs bornées



Systeme de contraintes

- Inconnues (x_1, \dots, x_n) de domaines $\mathbf{x}_1 \times \dots \times \mathbf{x}_n$
- 2 formulations équivalentes du problème
 - Caractériser l'ensemble

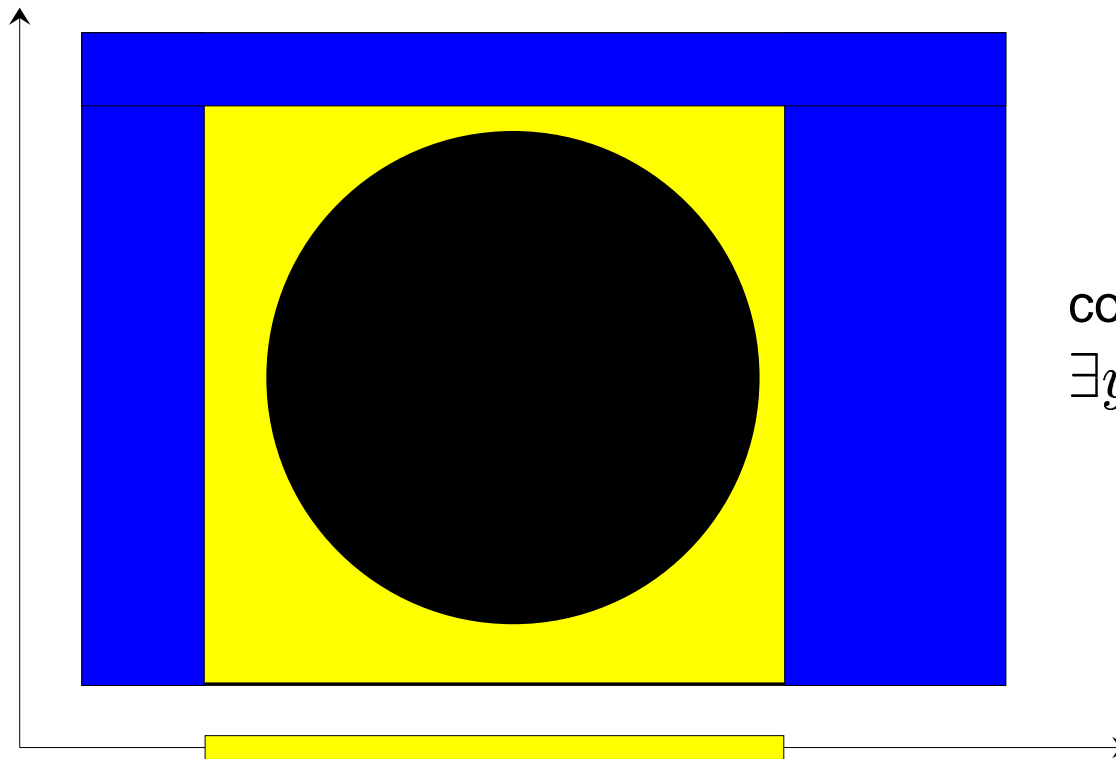
$$\mathcal{S} = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbf{x}_1 \times \dots \times \mathbf{x}_n \mid \forall j \in \{1, \dots, m\}, \\ y(x_1, \dots, x_n, t_j) \in [\check{y}_j - e_j, \check{y}_j + e_j]\}$$

- Posons la variable y_j associée à $\mathbf{y}_j = [\check{y}_j - e_j, \check{y}_j + e_j]$

$$\mathcal{S} = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbf{x}_1 \times \dots \times \mathbf{x}_n \mid \forall j \in \{1, \dots, m\}, \\ \exists y_j \in \mathbf{y}_j, y(x_1, \dots, x_n, t_j) = y_j\}$$

Réduction de domaines

- But : réduction / contrainte $\exists y_j \in \mathbf{y}_j \ y(x_1, \dots, x_n, t_j) = y_j$
- Réduction classique et projection sur les variables (x_1, \dots, x_n)



contrainte
 $\exists y \ x^2 + y^2 \leq 1$

Calcul intérieur

- Négation de la contrainte $\exists y_j \in \mathbf{y}_j \ y(x_1, \dots, x_n, t_j) = y_j$

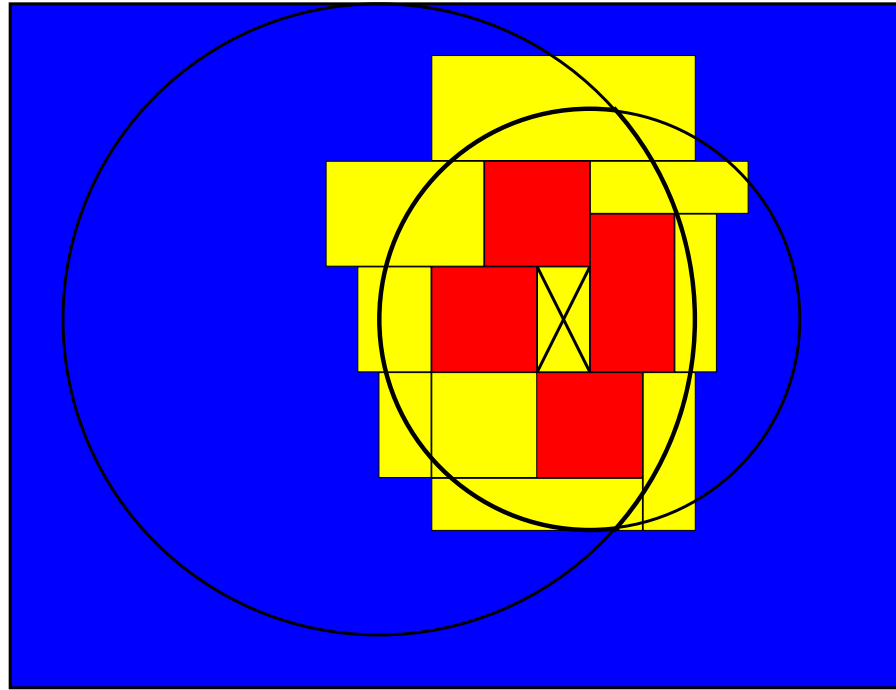
$$\forall y_j \in \mathbf{y}_j \ y(x_1, \dots, x_n, t_j) \neq y_j$$

$$\iff$$

$$\forall y_j \in \mathbf{y}_j \ y(x_1, \dots, x_n, t_j) < y_j \text{ ou } y(x_1, \dots, x_n, t_j) > y_j$$

- Calcul intérieur classique et
 - traitement du \forall : pas de réduction sur y_j
 - traitement du ou: union des calculs sur chaque membre

Calcul intérieur/extérieur



- Caractérisation de S par deux pavés : l'union des pavés jaunes et rouges et l'union des pavés rouges
- Accélération : rejeter les pavés jaunes inclus dans l'union des pavés rouges déjà calculés

Résultats expérimentaux

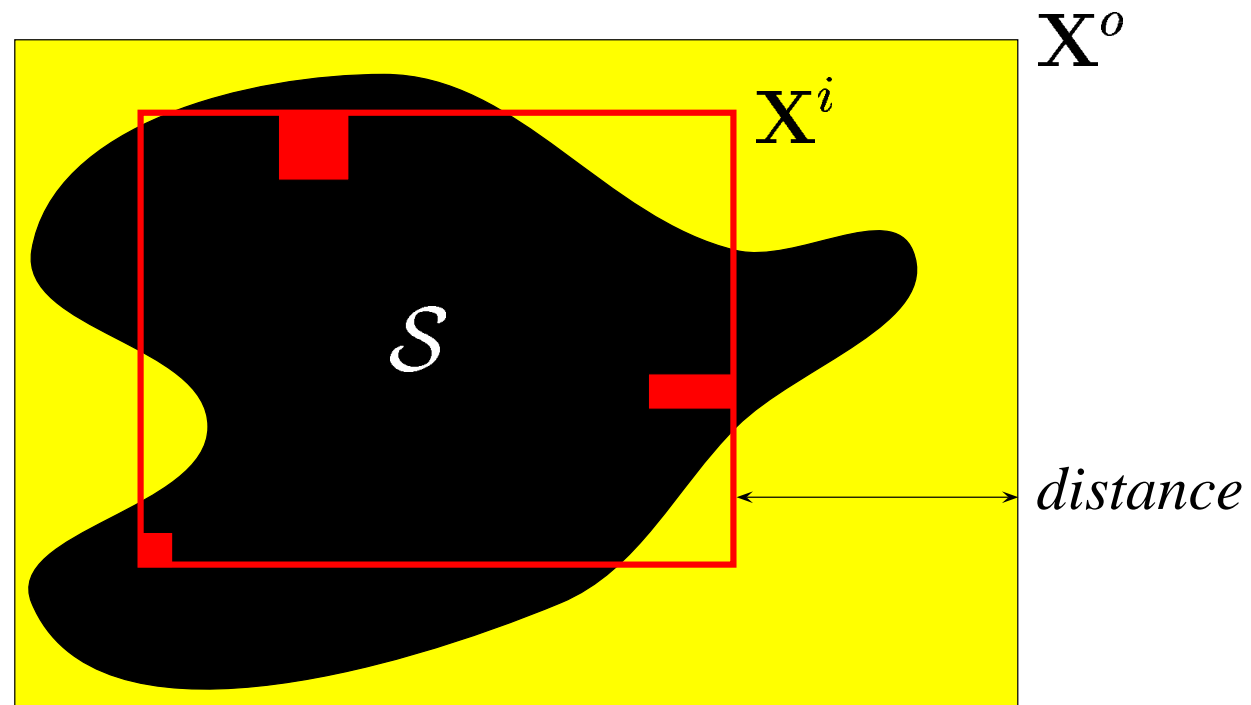
Simulation

- Valeur exacte x^* bruitée par simulation
- 11 mesures et 6 paramètres (inconnues)

$$\left\{ \begin{array}{l} t = (0, 1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 69, 81, 100) \\ x^* = (10, 1, -5, 0.1, 1, 0.01) \\ \check{y}_j = \sum_{i=1}^3 x_{2i-1}^* \cdot \exp(-x_{2i}^* \cdot t_j), \quad j = 1, \dots, 11 \\ e_j = \text{à définir}, \quad j = 1, \dots, 11 \\ \mathbf{X} = [-10^3, 10^3] \times [0.5, 2] \times [-10^3, 10^3] \times \\ [0.05, 0.5] \times [-10^3, 10^3] \times [0, 0.05] \end{array} \right.$$

Contrôle de l'algorithme

- Arrêt de l'algorithme de découpage : au plus 10^5 pavés
- Notion de distance entre X^i et X^o



Résultat numérique

- $\mathbf{x}^* = (10, 1, -5, 0.1, 1, 0.01)$
- Erreur e_j de $5 \cdot 10^{-4}$
- Union des pavés intérieurs et extérieurs

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^o &= [9.99556, 10.004526] && \times [0.99934264, 1.0006508] \\ &[-5.003985, -4.9961343] && \times [0.099799356, 0.10020335] \\ &[0.99593845, 1.0040806] && \times [0.0099458411, 0.0100542] \end{aligned}$$

- Union des pavés intérieurs

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^i &= [9.9956044, 10.00437] && \times [0.99940399, 1.0005969] \\ &[-5.0037124, -4.9962551] && \times [0.099802944, 0.10019656] \\ &[0.99596941, 1.0040606] && \times [0.0099461508, 0.010054001] \end{aligned}$$

Analyse des résultats

- Erreur / précision / temps

Erreur	Distance X^i/X^0	Précision X^i	Temps (s)
$5 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$9 \cdot 10^{-1}$	123.80
$5 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-2}$	77.00
$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$9 \cdot 10^{-3}$	86.70

- X^i grossit en même temps que l'erreur
 $\implies S$ également
- La distance décroît quand l'erreur et le temps de calcul augmentent
 \implies plus de calculs intérieurs, calculs plus coûteux

Conclusion

Points forts

- Modélisation de l'estimation ensembliste de paramètres par un ensemble de contraintes numériques quantifiées
- Calculs garantis grâce à l'arithmétique d'intervalles avec gestion des arrondis
- Accélération de l'algorithme d'évaluation-découpage par des réductions et des calculs intérieurs par négation
- Implémentation dans RealPaver

<http://www.sciences.univ-nantes.fr/info/perso/permanents/granvil/realpaver/>

Perspectives

- Expérimentation à plus grande échelle
- Contraintes redondantes et algorithmes symboliques
- Approches semi-automatiques pour la recherche de solutions
- Traitement d'autres types de modèles : sinusoides ou

$$y(t) = \sum_i x_{2i-1} \cdot (1 - \exp(-x_{2i} t))$$

- Techniques de satisfaction de contraintes pour la résolution d'équations différentielles

Références

- F. Benhamou *et al.* Revising Hull and Box Consistency, ICLP'1999.
- F. Benhamou and F. Goualard. Universally Quantified Interval Constraints, CP'2000.
- L. Jaulin *et al.* Applied Interval Analysis, Springer, 2001.
- O. Lhomme. Consistency Techniques for Numeric CSPs, IJCAI'1993.
- S. Ratschan. Approximate Quantified Constraint Solving by Cylindrical Box Decomposition, Reliable Computing, 2002.