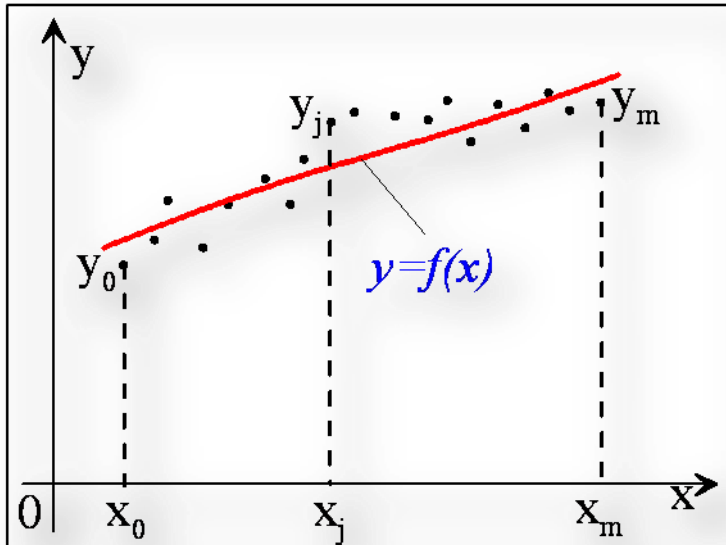


WYKŁAD 2

APROKSYMACJA WIELOMIANOWA I ZAGADNIENIE NAJMNIEJSZYCH KWADRATÓW

Sformułowanie zagadnienia aproksymacji w sensie najmniejszych kwadratów



Rozważmy zbiór punktów (węzłów) na płaszczyźnie

$$\{(x_k, y_k), k = 0, \dots, m\}$$

W typowym zadaniu aproksymacji liczba węzłów m może być znaczna, toteż standardowa interpolacja nie jest dobrym pomysłem. Wielomian interpolacyjny (wysokiego stopnia) będzie miał silnie oscylacyjny charakter, a jego postać będzie niesłychanie wrażliwa na małe błędy w danych wejściowych.

Zastosujemy inne podejście. Naszym celem jest znalezienie funkcji, której przebieg uchwyci „ogólny trend” zmienności w zbiorze zadanych punktów (czerwona linia na wykresie), a wykres tej funkcji jest – w odpowiednio określonym sensie – najbliższy punktom tego zbioru.

Będziemy poszukiwać tej funkcji w postaci kombinacji liniowej z góry określonych funkcji bazowych (np. pewnych wielomianów) $\{\varphi_k(x), k = 0, \dots, n\}$

$$f(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x) \equiv \sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)$$

Potrzebne jest kryterium wg którego określimy wartość nieznanych współczynników $\{a_j, j = 0, 1, \dots, n\}$. W zagadnieniu aproksymacji w sensie najmniejszych kwadratów dążymy do zminimalizowania następującej wielkości

$$R = R(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{k=0}^m [f(x_k) - y_k]^2 = \sum_{k=0}^m \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_k) - y_k \right]^2 = \min$$

Warunkiem koniecznym istnienia minimum jest jednoczesne znikanie pochodnych cząstkowych pierwszego rzędu

$$\frac{\partial R}{\partial a_i} = 0, \quad i = 0, \dots, n$$

Warunki te prowadzą do liniowego układu równań dla współczynników $\{a_j, j = 0, \dots, n\}$

$$\frac{\partial R}{\partial a_i} = 2 \sum_{k=0}^m \varphi_i(x_k) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_k) - y_k \right] = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

⇓

$$\sum_{j=0}^n \left[\sum_{k=0}^m \varphi_i(x_k) \varphi_j(x_k) \right] a_j = \sum_{k=0}^m y_k \varphi_i(x_k)$$

Otrzymany układ równań liniowych można zapisać w formie macierzowo-wektorowej

$$\mathbf{M}\mathbf{a} = \mathbf{z}$$

gdzie

$$M_{ij} = \sum_{k=0}^m \varphi_i(x_k) \varphi_j(x_k) = M_{ji} \quad , \quad i, j = 0, 1, \dots, n$$

$$\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots, a_n]^T$$

$$z_i = \sum_{k=0}^m y_k \varphi_i(x_k) \quad , \quad i = 0, 1, \dots, n$$

W szczególności, w roli funkcji bazowych możemy przyjąć jednomiany

$$\varphi_0(x) \equiv 1, \quad \varphi_1(x) = x, \dots, \varphi_j(x) = x^j, \dots, \varphi_n(x) = x^n$$

Wówczas elementy macierzy \mathbf{M} i wektora prawych stron \mathbf{z} mają następującą formę

$$M_{ij} = \sum_{k=0}^m x_k^{i+j} \quad , \quad i, j = 0, 1, \dots, n \quad , \quad z_i = \sum_{k=0}^m y_k x_k^i \quad , \quad i = 0, 1, \dots, n$$

Zauważmy, że macierz \mathbf{M} można wyrazić jako następujący iloczyn

$$\mathbf{M} = \mathbf{W}^T \mathbf{W}$$

przy czym element macierzy \mathbf{W} są dane wzorami

$$W_{kj} = x_k^j \quad , \quad k = 0, \dots, m \quad , \quad j = 0, \dots, n$$

Istotnie, dowodzi tego następujący rachunek

$$(\mathbf{W}^T \mathbf{W})_{ij} = \sum_{k=0}^m (\mathbf{W}^T)_{ik} (\mathbf{W})_{kj} = \sum_{k=0}^m (\mathbf{W})_{ki} (\mathbf{W})_{kj} = \sum_{k=0}^m x_k^i x_k^j = (\mathbf{M})_{ij}$$

Ponadto, wektor prawych stron może być przedstawiony w postaci

$$\mathbf{z} = \mathbf{W}^T \mathbf{y} \quad , \quad \mathbf{y} = [y_0, y_1, \dots, y_m]^T$$

Szczególna postać układu równań nie jest przypadkiem i wynika z faktu, że **zagadnienie aproksymacji w sensie najmniejszych kwadratów może być interpretowane jako nadokreślone zagadnienie interpolacji.**

Przyjrzyjmy się bliżej problemowi liniowego **zagadnienia nadokreślonego**. Jest to taki układ równań liniowych, w którym **liczba równań jest większa niż liczba niewiadomych**

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad , \quad \dim(\mathbf{A}) = (m, n) \quad , \quad m > n$$

Macierz współczynników A jest macierzą prostokątną (ma więcej wierszy niż kolumn). Typowo, **układ nadokreślony jest sprzeczny**, tj. nie istnieje w R^n wektor \mathbf{x} taki, że wszystkie równania układu są jednocześnie spełnione.

Postawimy zadanie wyznaczenia „rozwiązania” układu nadokreślonego w innym, nieco bardziej „liberalnym” sensie. **Mianowicie, zadowolimy się takim wektorem \mathbf{x} , dla którego długość wektora**

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$$

jest najmniejsza. Innymi słowy, staramy się wybrać taki wektor \mathbf{x} , że wielkość

$$\|\mathbf{r}\|_2 := \sqrt{r_1^2 + \dots + r_m^2}$$

jest najmniejsza.

Potrzebne będzie nam pojęcie **zakresu (pola) macierzy**. Zakresem macierzy \mathbf{A} (prostokątnej o wymiarach (m,n)) nazywamy zbiór w R^m oznaczany $range(\mathbf{A})$ i taki, że

$$range(\mathbf{A}) := \{ \mathbf{y} \in R^m : \mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \in R^n \}$$

Widzimy, że zakres \mathbf{A} to po prostu zbiór wartości przekształcenia liniowego z R^n do R^m zadanego przez tę macierz. Zbiór ten jest podprzestrzenią liniową w R^m .

Drugim ważnym pojęciem jest **jądro macierzy** (przestrzeń zerowa). W naszym zastosowaniu potrzebujemy odwołać się do jądra **macierzy transponowanej** \mathbf{A}^T . Jest to zbiór wektorów (de facto podprzestrzeń liniowa w R^m) zdefiniowany następująco

$$ker(\mathbf{A}^T) = \{ \mathbf{y} \in R^m : \mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{0} \in R^n \}$$

Wykażemy, że dowolny wektor z $range(\mathbf{A})$ jest prostopadły (ortogonalny) do każdego wektora z $ker(\mathbf{A}^T)$, tj. podprzestrzenie te są ortogonalne, co możemy zapisać tak

$$range(\mathbf{A}) \perp ker(\mathbf{A}^T) \Leftrightarrow \forall_{\mathbf{v} \in range(\mathbf{A})} \forall_{\mathbf{w} \in ker(\mathbf{A}^T)} (\mathbf{v}, \mathbf{w}) \equiv \sum_{j=1}^m v_j w_j = 0$$

Prześledźmy dowód tego ważnego stwierdzenia ...

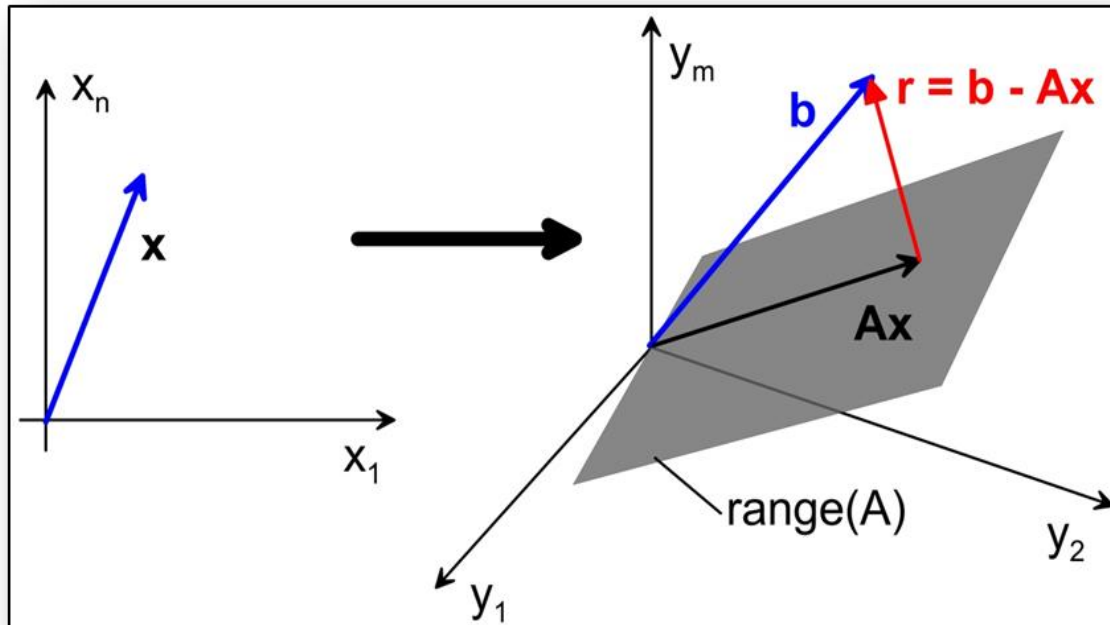
Zauważmy po pierwsze, że

$$\mathbf{v} \in \text{range}(\mathbf{A}) \Leftrightarrow \exists_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{v} = \mathbf{A}\mathbf{p}$$

Obliczmy teraz iloczyn skalarny wektora \mathbf{v} i dowolnego wektora \mathbf{w} z przestrzeni $\ker(\mathbf{A}^T)$

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}, \mathbf{w}) &= (\mathbf{A}\mathbf{p}, \mathbf{w}) = \sum_{j=1}^m (\mathbf{A}\mathbf{p})_j w_j = \sum_{j=1}^m \left(\sum_{k=1}^n a_{jk} p_k \right) w_j = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{j=1}^m a_{jk} w_j \right) p_k = \\ &= \sum_{k=1}^n \left(\sum_{j=1}^m a_{jk} w_j \right) p_k = \sum_{k=1}^n (\mathbf{A}^T \mathbf{w})_k p_k = (\mathbf{p}, \mathbf{A}^T \mathbf{w}) = (\mathbf{p}, \mathbf{0}) = 0 \end{aligned}$$

Otrzymaliśmy zero co – wobec dowolności wyboru wektorów – dowodzi stwierdzenia.



Istotę zagadnienia najmniejszych kwadratów ilustruje rysunek. Zauważmy, że wektor residualny \mathbf{r} ma najmniejszą długość (normę) jeśli jest wektorem prostopadłym do $\text{range}(\mathbf{A})$. Zgodnie z powyższym stwierdzeniem, wektor \mathbf{r} należy zatem do $\ker(\mathbf{A}^T)$.

Możemy zatem napisać

$$\|\mathbf{r}\|_2 \equiv \sqrt{\sum_{k=1}^m r_k^2} = \min \Leftrightarrow \mathbf{r} \perp \text{range}(\mathbf{A}) \Leftrightarrow \mathbf{r} \in \ker(\mathbf{A}^T)$$

⇓

$$\mathbf{A}^T (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) = 0 \Rightarrow \mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$

Zauważmy, że macierz otrzymanego powyżej układu liniowego, czyli $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, jest kwadratowa o wymiarze n . W teorii macierzy dowodzi się, że macierz ta jest nieosobliwa jeśli tylko rząd macierzy \mathbf{A} jest równy n (tj. wszystkie jej kolumny traktowane jako m -wymiarowe wektory są liniowo niezależne).

W kontekście zagadnienia aproksymacji wielomianowej w sensie najmniejszych kwadratów, macierz $\mathbf{A} = \mathbf{W}$, a $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{W}^T \mathbf{W} = \mathbf{M}$. Można powiedzieć, że zagadnienie aproksymacji to w istocie „nadokreślone” zagadnienie interpolacji, które prowadzi do nadokreślonego układu równań postaci $\mathbf{W}\mathbf{a} = \mathbf{y}$. Istotnie, mamy bowiem

$$y_j = f(x_j) = \sum_{k=0}^n x_j^k a_k = \sum_{k=0}^n W_{jk} a_k, \quad j = 0, 1, \dots, m$$

Opisany sposób rozwiązania układu nadokreślonego (poprzez sprowadzenie go do układu z macierzą kwadratową $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$) nazywamy też **metodą równań normalnych**.

Metoda wielomianów ortogonalnych

Omówimy teraz inną metodę rozwiązania zagadnienia aproksymacji wielomianowej, alternatywna wobec metody równań normalnych. Okazuje się, że zagadnienie aproksymacji można rozwiązać wprost, tj. bez rozwiązywania żadnych układów równań!

Dla ustalonego układu węzłów $\{(x_k, y_k), k = 0, \dots, m\}$ definiujemy (dyskretny) iloczyn skalarny dwóch funkcji bazowych wzorem

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle := \sum_{k=0}^m \varphi_i(x_k) \varphi_j(x_k)$$

Mówimy, że układ funkcji bazowych $\{\varphi_i(x), i = 0, \dots, n\}$ jest układem ortogonalnym jeśli spełnia on warunki (ortogonalności) postaci

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \quad , \quad i \neq j$$

Użycie w zagadnieniu aproksymacji ortogonalnego układu funkcji bazowych jest bardzo korzystne bowiem macierz \mathbf{M} układu równań normalnych jest czysto diagonalna!

$$M_{ij} = \begin{cases} \sum_{k=0}^m \varphi_i^2(x_k) & , \quad i = j \\ 0 & , \quad i \neq j \end{cases}$$

Oznacza to, że układ równań normalnych jest całkowicie „rozprzęgnięty”. Innymi słowy, mamy do czynienia w układem równań, których rozwiązanie jest trywialne, a mianowicie

$$\left(\sum_{k=0}^m \varphi_i^2(x_k) \right) a_i = \sum_{k=0}^m y_k \varphi_i(x_k) \quad , \quad i = 0, \dots, n$$

⇓

$$a_i = \frac{\sum_{k=0}^m y_k \varphi_i(x_k)}{\sum_{k=0}^m \varphi_i^2(x_k)}$$

Pozostaje kwestia jak skonstruować ortogonalny układ funkcji bazowych dla danego zbioru węzłów. Okazuje się, że można skonstruować taką bazę wielomianową.

Procedura konstrukcji tej bazy jest rekursywna. Oznacza to, że kolejne funkcje (wielomiany) bazowe będą zbudowane przy pomocy (dwóch) wielomianów skonstruowanych uprzednio. Jasnym jest, że procedura taka wymaga określenia „warunków startowych”, tj. zdefiniowania wprost dwóch pierwszych wielomianów bazowych, a mianowicie

$$q_0(x) \equiv 1 \quad , \quad q_1(x) = x - \alpha_1$$

Liczba α_1 jest dobrana w taki sposób, aby wielomiany q_0 i q_1 były:

$$\langle q_0, q_1 \rangle = 0 \Rightarrow \sum_{k=0}^m (x_k - \alpha_1) = 0 \Rightarrow \alpha_1 = \frac{1}{m+1} \sum_{k=0}^m x_k$$

Następne wielomiany w sekwencji wyznaczane są ze wzoru rekurencyjnego postaci

$$q_{j+1}(x) = xq_j(x) - \alpha_{j+1}q_j(x) - \beta_jq_{j-1}(x)$$

Przy czym współczynniki α_{j+1} i β_j są wyznaczane w taki sposób, aby nowy wielomian q_{j+1} był ortogonalny do wielomianów q_j i q_{j-1} :

$$\langle q_{j+1}, q_j \rangle = 0 \quad , \quad \langle q_{j+1}, q_{j-1} \rangle = 0$$

Po podstawieniu formuły rekurencyjnej dla q_{j+1} do warunków ortogonalności otrzymujemy prosty do rozwiązania układ dwóch równań liniowych z niewiadomymi α_{j+1} i β_j . Układ ten ma rozwiązanie (**sprawdzić!**)

$$\alpha_{j+1} = \frac{\langle xq_j, q_j \rangle}{\langle q_j, q_j \rangle} = \frac{\sum_{k=0}^m x_k q_j^2(x_k)}{\sum_{k=0}^m q_j^2(x_k)} \quad , \quad \beta_j = \frac{\langle xq_j, q_{j-1} \rangle}{\langle q_{j-1}, q_{j-1} \rangle} = \frac{\sum_{k=0}^m x_k q_{j-1}(x_k) q_j(x_k)}{\sum_{k=0}^m q_{j-1}^2(x_k)}$$

Kluczowym pytaniem jest: jak to się dzieje, że wymuszenie ortogonalności wielomianu q_{j+1} względem wielomianów q_j i q_{j-1} gwarantuje, że $\langle q_{j+1}, q_i \rangle = 0$, $i = 0, 1, \dots, j-2$?!

Okazuje się, że warunki ortogonalności do „starszych” wielomianów są spełnione automatycznie. Aby to zrozumieć, obliczmy iloczyn skalarny wielomianu q_{j+1} i dowolnego wielomianu q_i dla $i \leq j-2$:

$$\langle q_{j+1}, q_i \rangle = \langle xq_j, q_i \rangle - \alpha_{j+1} \underbrace{\langle q_j, q_i \rangle}_0 - \beta_j \underbrace{\langle q_{j-1}, q_i \rangle}_0 = \underbrace{\langle q_j, xq_i \rangle}_{\substack{xq_i(x) \text{ has} \\ \text{order } i+1 < j}} = \sum_{p=0}^{i+1 < j} \gamma_p \underbrace{\langle q_j, q_p \rangle}_{=0 \text{ for each } p < j} = 0$$

Objaśnijmy...

Składnik drugi i trzeci są równe zero na mocy założenia indukcyjnego, że układ wielomianów do numeru j włącznie jest ortogonalny. Składnik pierwszy może być interpretowany jako iloczyn skalarny wielomianu q_j przez pewien wielomian xq_i , którego stopień wynosi $i+1$ i nie przewyższa $j-1$. Wielomian ten może być przedstawiony jako pewna kombinacja liniowa wcześniej utworzonych wielomianów bazowych q_p , $0 \leq p \leq i+1$. Na mocy założenia indukcyjnego każdy z tych wielomianów jest ortogonalny do wielomianu q_j , a zatem i pierwszy składnik znika.

Ostateczna forma wielomianu aproksymacyjnego może być zapisana wzorem

$$f(x) = \sum_{j=0}^n \left[\frac{\sum_{k=0}^m y_k q_j(x_k)}{\sum_{k=0}^m q_j^2(x_k)} \right] q_j(x)$$

Uwagi końcowe:

- Bardzo efektywną obliczeniowo i numerycznie stabilną metodą obliczania wartości wielomianu przedstawionego jako pewna kombinacja liniowa bazowych wielomianów ortogonalnych i skonstruowanych wg reguły rekurencyjnej podał **Clenshaw**. Jej opis i implementacje w języku C++ można znaleźć z podręczniku *Numerical Recipes in C++*, 3rd Ed., na stronie 222.
- Aproksymacja w sensie najmniejszych kwadratów za pomocą wielomianu stopnia 1-szego zwana jest również **regresją liniową**.

Ćwiczenie domowe: wyprowadzić formuły regresji liniowej.