Znanstveno računanje 2
11. i 12. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Izglađivanje podataka i metoda najmanjih kvadrata:
  - Veza izglađivanja i najmanjih kvadrata.
  - Globalno i lokalno izglađivanje.
  - Diskretni ortogonalni polonomi i Forsytheov algoritam.
  - Lokalno izglađivanje — najmanji kvadrati, integral.
  - Diskretna ortogonalnost trigonometrijskih funkcija.
  - Najmanji kvadrati i splajn funkcije.
  - Dierckx.

Informacije

Konzultacije (trajno, nažalost):

- utorak, 16–17 sati, petak, 19–20 sati.

Sljedeća dva tjedna — 9. 6. i 16. 6.

- nemamo nastavu,
- tu sam — možete me iskoristiti za konzultacije.

Završni projektni zadaci će biti spremni

- do kraja ovog vikenda — 7. 6., na mom webu,
- preuzimanje ide preko foruma (kao prije),
- rok za predaju je petak, 17. 7., u 14 sati.

Izglađivanje podataka i diskretni najmanji kvadrati

Uvod u izglađivanje podataka

Zadan je skup podataka (ili točaka u ravnini)

$$(x_i, f_i), \quad i = 0, \dots, n,$$

pri čemu

- vrijednosti x_i smatramo točnim — bez grešaka,
- a vrijednosti f_i su "izmjerene" vrijednosti i nose u sebi neku grešku, označimo ju s ε_i.

Na primjer, f_i možemo interpretirati kao

- približne vrijednosti neke funkcije f u točkama x_i.

Prave vrijednosti $f(x_i)$, naravno, ne znamo!

Točke x_i, bar zasad, ne moraju biti međusobno različite, isto kao i kod diskretnih najmanjih kvadrata.
Međutim, pretpostavimo da jesu međusobno različite

Uvod u izglađivanje podataka

Dakle, imamo izmjereni uzorak funkcijskih vrijednosti funkcije f na diskretnom skupu točaka $x_0, \ldots, x_n$, za koji vrijedi

$$f_i = f(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Ideja: uz određene statističke pretpostavke na "slučajnost" grešaka ε_i,

- zamijeniti f_i vrijednošću neke aproksimacijske funkcije φ u točki x_i,
- tako da očekivane greške u $\varphi_i := \varphi(x_i)$ budu "manje".

Drugim riječima, cilj je

- ukloniti slučajne greške u f_i, ili
- "izgladiti" ove izmjerene podatke!

Statističke pretpostavke na model

Za izglađivanje trebamo dvije statističke pretpostavke na greške.

Prva i ključna pretpostavka:

- U mjerenjima nema sistematskih grešaka, tj. imamo dobro "kalibrirane" instrumente, ili,
- srednja vrijednost ili očekivanje greške je nula

$$E(\varepsilon_i) = 0, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Pisano vektorski u prostoru $\mathbb{R}^{n+1}$, uz oznaku $\varepsilon = (\varepsilon_0, \ldots, \varepsilon_n)^T$,

$$E(\varepsilon) = 0.$$

Uz tu pretpostavku, nepoznata vrijednost $f(x_i)$ je ista kao i očekivanje izmjerene vrijednosti f_i, za $i = 0, \ldots, n$.

Statističke pretpostavke na model

Druga pretpostavka, koja bitno olakšava računanje:

- Greške u različitim mjerenjima (od točke do točke) su statistički nezavisne,
- tj., kovarijacijska matrica $V := V(\varepsilon)$ je dijagonalna

$$V(\varepsilon) = \mathrm{diag}(\sigma_0^2, \ldots, \sigma_n^2),$$

a $\sigma_0, \ldots, \sigma_n$ su standardne devijacije u pojedinim mjerenjima (kvadrati su varijance).

Sasvim općenito, kovarijacijska matrica V može biti

- bilo koja (simetrična) pozitivno definitna matrica.

No, dijagonalnost bitno ubrzava računanje, a često je istinita u praksi.

Skalarni produkt generiran s $W = V^{-1}$

Na vektorskom prostoru $\mathbb{R}^{n+1}$ definiramo skalarni produkt generiran matricom $W := V^{-1}$ na sljedeći način

$$\langle u, v\rangle_W := v^T W u = \langle Wu, v\rangle, \quad u, v \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

Iz pozitivne definitnosti matrice V^{-1} lako slijedi da je ovo zaista skalarni produkt.

Pripadnu W-normu vektora definiramo na standardni način

$$\|v\|_W := \sqrt{\langle v, v\rangle_W} = \sqrt{\langle Wv, v\rangle}, \quad v \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

Obično ćemo koristiti kvadrat norme

$$\|v\|_W^2 = \langle v, v\rangle_W = \langle Wv, v\rangle, \quad v \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

Linearna aproksimacija

Aproksimacijsku funkciju φ prikazujemo kao

- nepoznatu linearnu kombinaciju
- poznatih (izabranih) funkcija — tzv. funkcija "baze" u izabranom modelu.

Neka su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ izabrane funkcije "baze" u modelu.
Aproksimacijska funkcija φ ima oblik

$$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + \cdots c_m\varphi_m(x) = \sum_{j=0}^{m} c_j\varphi_j(x),$$

Koeficijenti $c_0, \ldots, c_m$ u ovoj linearnoj kombinaciji su nepoznati parametri koje treba odrediti.

Dovoljno je uzeti $m \leq n$. U praksi, točaka $x_0, \ldots, x_n$ ima mnogo više nego nepoznatih parametara $c_0, \ldots, c_m$, tj. $n \gg m$.

Linearna aproksimacija

Iz vrijednosti funkcija baze φ_j u točkama x_i formiramo

- (općenito, pravokutnu) matricu $A \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(m+1)}$

na sljedeći način

$$a_{ij} := \varphi_j(x_i), \quad i = 0, \ldots, n, \quad j = 0, \ldots, m.$$

Ako su funkcije baze “dobro” izabrane, onda su

- stupci matrice A su linearno nezavisni,

tako da A ima puni stupčani rang (zato nam treba $m \leq n$).

Uz ove oznake, imamo

$$\varphi(x_i) = \sum_{j=0}^{m} c_j \varphi_j(x_i) = \sum_{j=0}^{m} a_{ij} c_j, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Linearni model i procjena parametara

Nepoznate parametre $c_0, \ldots, c_m$ određujemo iz "modela"

$$f_i = \varphi(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 0, \ldots, n,$$

Označimo s

- $\tilde{f} := (f_0, \ldots, f_n)^T \in \mathbb{R}^{n+1}$ vektor izmjerenih vrijednosti,
- $c := (c_0, \ldots, c_m)^T \in \mathbb{R}^{m+1}$ vektor nepoznatih parametara.

Onda dobivamo tzv. linearni model za procjenu parametara c u obliku

$$\tilde{f} = Ac + \varepsilon.$$

Uz sve navedene pretpostavke, najbolju procjenu parametara dobivamo iz Gauss–Markov teorema:

- to je ona s najmanjom varijancom!

Veza izglađivanja i najmanjih kvadrata

To direktno vodi u metodu najmanjih kvadrata:

- minimiziraj varijancu.

Preciznije, najbolji izbor parametara (za fiksni m) je rješenje c problema najmanjih kvadrata

$$\|\tilde{f} - Ac\|_W^2 = \langle W(\tilde{f} - Ac), \tilde{f} - Ac\rangle \to \min,$$

uz $W = V^{-1}$. Pripadni sustav normalnih jednadžbi je

$$(A^T W A)c = A^T W \tilde{f}.$$

Dodatno, kovarijacijska matrica najbolje procjene c je

$$V(c) = (A^T W A)^{-1}.$$

Veza izglađivanja i najmanjih kvadrata

Na kraju, pripadna minimalna varijanca je

$$s^2 = \frac{\|\tilde{f} - Ac\|_W^2}{n - m}.$$

Do na faktor u nazivniku,

- brojnik je ono što se minimizira (najmanji kvadrati)!

Ovaj rezultat vrijedi za bilo koju simetričnu pozitivno definitnu kovarijacijsku matricu V.

Standardni zapis skalarnog produkta

U praksi je kovarijacijska matrica V često dijagonalna

$$V(\varepsilon) = \mathrm{diag}(\sigma_0^2, \ldots, \sigma_n^2),$$

a $\sigma_0, \ldots, \sigma_n$ su standardne devijacije u pojedinim mjerenjima (kvadrati su varijance). Tada se koristi standardna oznaka

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}, \quad i = 0, \ldots, n,$$

a pripadni težinski skalarni produkt ima oblik

$$\langle u, v \rangle_W = \sum_{i=0}^{n} w_i u_i v_i, \quad u, v \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

Složenost pada s $O(n^2)$ na $O(n)$.

Težinski najmanji kvadrati

Pripadni problem najmanjih kvadrata

$$\|\tilde{f} - Ac\|_W^2 = \langle W(\tilde{f} - Ac), \tilde{f} - Ac \rangle \to \min,$$

onda ima "puni" oblik

$$\|\tilde{f} - Ac\|_W^2 = \sum_{i=0}^{n} w_i \left(f_i - \sum_{j=0}^{m} c_j \varphi_j(x_i) \right)^2 \to \min .$$

Praktični problemi kod izglađivanja

- Praktična uloga varijanci σ_i, odnosno težina w_i.
- Skaliranje slično klasičnoj pretpostavci — greške su nezavisne, normalna distribucija $N(0, 1)$.
- Izbacivanje istih točaka (zbog dimenzije).

U primjeni kod izglađivanja — m se traži!

- Ideja — diži m (dimenziju prostora), sve dok se varijanca s_m^2 približno ne stabilizira.
- Matrica A varira (raste) s m.
- To ima smisla koristiti ako uzimamo ortogonalne baze, tako da A ima ortogonalne stupce ($A^T W A = I_m$).
- Realizacija za polinome = Forsytheov algoritam s detekcijom stupnja.