Numerička matematika
7. predavanje

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Interpolacija splajnovima:
  - Kubični splajn i neprekidnost druge derivacije.
  - Razne vrste rubnih uvjeta.
  - Ocjene pogreške za kubični splajn.
  - Po dijelovima parabolička interpolacija — natuknice.
- Usporedba raznih vrsta interpolacije — primjer.

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Metoda najmanjih kvadrata:
  - Diskretni problem najmanjih kvadrata.
  - Normalne jednadžbe.
  - Linearizacija.
  - Primjer za najmanje kvadrate — etil.
  - Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata.

Kubična splajn interpolacija

Kubična splajn interpolacija

Brojeve $s_0, \ldots, s_n$ možemo odrediti i iz zahtjeva da funkcija φ

- ima neprekidnu drugu derivaciju u unutarnjim čvorovima mreže $x_1, \ldots x_{n-1}$, tj. da je φ klase $C^2[a, b]$.

Takva se interpolacija zove kubična splajn interpolacija.

Iz tih uvjeta ne možemo jednoznačno izračunati splajn φ, jer

- treba odrediti $4n$ koeficijenata kubičnih polinoma,
- a imamo $2n$ uvjeta interpolacije (svaki polinom mora interpolirati funkciju u rubnim točkama svog intervala),
- uvjeta ljepljenja prve derivacije u unutarnjim čvorovima ima $n - 1$ (toliko je unutarnjih čvorova),
- i još imamo $n - 1$ uvjeta ljepljenja druge derivacije.

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Zaključak. Ukupno imamo

- $4n - 2$ uvjeta interpolacije i neprekidnosti derivacija,
- a moramo odrediti $4n$ koeficijenata kubnih polinoma,
- pa vidimo da nedostaju 2 uvjeta, da bismo te koeficijente mogli jednoznačno odrediti.

Nastavak. Pogledajmo što možemo izvesti bez ta 2 uvjeta, a onda ćemo diskutirati kako njih možemo zadati.

Za početak, prva derivacija se lijepi u unutarnjim čvorovima, čim postavimo zahtjev interpolacije nagiba — da je

$$\varphi'(x_k) = s_k, \quad k = 1, \ldots, n-1,$$

bez obzira na to što su brojevi s_k.

Ljepljenje druge derivacije

Ostaje još postaviti uvjete ljepljenja druge derivacije od φ u unutarnjim čvorovima. Zahtjev na pripadne polinome p_k je

$$p_k''(x_k) = p_{k+1}''(x_k), \quad k = 1, \ldots, n-1.$$

Ako polinome p_k pišemo u formi relativno obzirom na početnu točku podintervala, tj. ako je

$$\begin{aligned} p_k(x) = c_{0,k} &+ c_{1,k}(x - x_{k-1}) \\ &+ c_{2,k}(x - x_{k-1})^2 + c_{3,k}(x - x_{k-1})^3, \end{aligned}$$

onda je

$$\begin{aligned} p_k''(x) &= 2c_{2,k} + 6c_{3,k}(x - x_{k-1}), \\ p_{k+1}''(x) &= 2c_{2,k+1} + 6c_{3,k+1}(x - x_k). \end{aligned}$$

Ljepljenje druge derivacije

Uvrštavanjem x_k i dijeljenjem s 2 izlazi uvjet ljepljenja

$$c_{2,k} + 3c_{3,k}(x_k - x_{k-1}) = c_{2,k+1}.$$

Ostaje samo napisati koeficijente $c_{i,k}$ u terminima f_k i s_k.
Ponovimo, za kubični polinom s 2 dvostruka čvora, imali smo

$$\begin{aligned} c_{3,k} &= \frac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2}, \\ c_{2,k} &= \frac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k} - h_k c_{3,k} \\ &= \frac{3f[x_{k-1}, x_k] - 2s_{k-1} - s_k}{h_k}. \end{aligned}$$

Ove dvije relacije uvrstimo u uvjet ljepljenja druge derivacije.

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Sređivanjem lijeve strane izlazi

$$\frac{-3f[x_{k-1}, x_k] + s_{k-1} + 2s_k}{h_k} = \frac{3f[x_k, x_{k+1}] - 2s_k - s_{k+1}}{h_{k+1}}.$$

Pomnožimo prethodnu relaciju s $h_k h_{k+1}$ i

- prebacimo sve s_k na lijevu stranu (oni su nepoznati),
- a članove koji nemaju s_k na desnu stranu (to je poznato).

Dobivamo da mora vrijediti

$$\begin{aligned} h_{k+1} s_{k-1} &+ 2(h_k + h_{k+1}) s_k + h_k s_{k+1} \\ &= 3(h_{k+1} f[x_{k-1}, x_k] + h_k f[x_k, x_{k+1}]), \end{aligned}$$

za $k = 1, \ldots, n-1$.

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Ovo je linearni sustav

- s $(n+1)$ nepoznanica i $(n-1)$ jednadžbi.

Ako zadamo nagibe s_0 i s_n, ostaje točno $n-1$ nepoznanica. Matrica tako dobivenog linearnog sustava je trodijagonalna

$$\begin{bmatrix} 2(h_1+h_2) & h_1 & & & \\ h_3 & 2(h_2+h_3) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{n-1} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-2} \\ & & & h_n & 2(h_{n-1}+h_n) \end{bmatrix}$$

i strogo dijagonalno dominantna po recima, jer je

$$2(h_k+h_{k+1}) > h_k + h_{k+1},$$

pa je i regularna.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ovaj linearni sustav sigurno ima jedinstveno rješenje za "nagibe" $s_1, \ldots, s_{n-1}$.

Za rješavanje sustava možemo koristiti Gaussove eliminacije ili LR faktorizaciju bez pivotiranja — stabilno i vrlo brzo.

Algoritam. Za "opću" trodijagonalnu matricu A, reda n,

$$A = \begin{bmatrix} d_1 & e_1 & & & \\ c_2 & d_2 & e_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & d_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & c_n & d_n \end{bmatrix}.$$

pretpostavimo da postoji LR faktorizacija bez pivotiranja.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Tada nije teško pokazati da su matrice L i R oblika

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ell_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ell_{n-1} & 1 & \\ & & & \ell_n & 1 \end{bmatrix},$$

$$R = \begin{bmatrix} r_1 & e_1 & & & \\ & r_2 & e_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & r_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & & r_n \end{bmatrix}.$$

Matrice A i R imaju jednake dijagonale iznad glavne (e-ovi).

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ostale elemente matrica L i R računamo sljedećim algoritmom

$$
\begin{aligned}
& r_1 = d_1, \\
& \text{za } i = 2, \ldots, n: \\
& \qquad \ell_i = c_i / r_{i-1}, \\
& \qquad r_i = d_i - \ell_i \, e_{i-1}.
\end{aligned}
$$

Složenost LR faktorizacije je samo $O(n)$. Isto vrijedi i za supstitucije unaprijed/unatrag, kod rješavanja sustava $Ax = b$.

Primijetite da, kod splajn interpolacije,

- nagibi s_k nisu nezavisni, nego ovise jedan o drugom.
- To znači da aproksimacija više nije lokalna, jer se promjenom jedne točke (x_k, f_k) mijenjaju svi polinomi.

Dva dodatna uvjeta — rubni uvjeti

Posljednje otvoreno pitanje je:

- Kako možemo izabrati (ili zadati) s_0 i s_n?

Naime, nedostaju još 2 uvjeta za jedinstvenost splajna!

- Oni se, najčešće, ne zadaju direktno.

Uobičajeno se zadaju tzv. rubni uvjeti na funkciju φ,

- iz kojih se onda određuju s_0 i s_n,
- ili dobivamo dvije dodatne jednadžbe, koje se dodaju ranijem linearnom sustavu za nagibe (tamo s_0 i s_n ostavimo na lijevoj strani, jer ih ne znamo).

Postoji nekoliko tradicionalnih načina zadavanja rubnih uvjeta, odnosno, jednadžbi koje nedostaju.

Potpuni (kompletni) splajn

(a) Potpuni (kompletni) splajn

Poznato:

- derivacija funkcije f u rubovima (recimo, kod rješavanja rubnih problema za običnu diferencijalnu jednadžbu).

Zadaje se:

$$s_0 = f'(x_0), \qquad s_n = f'(x_n).$$

Greška aproksimacije u funkcijskoj vrijednosti je $O(h^4)$.

- Rubni uvjeti su egzaktni — iz funkcije f, odnosno, iz f', pa nemaju nikakvu grešku aproksimacije.
- Greška dolazi samo od po dijelovima kubične interpolacije i ta je $O(h^4)$.

Zadana druga derivacija u rubovima

(b) Zadana druga derivacija u rubovima

Poznato:

- druga derivacija funkcije f u rubovima.

Zadaje se:

$$f''(x_0) = \varphi''(x_0) = p_1''(x_0), \qquad f''(x_n) = \varphi''(x_n) = p_n''(x_n).$$

Treba još izraziti

- $p_1''(x_0)$ preko s_0, s_1,
- $p_n''(x_n)$ preko s_{n-1} i s_n.

Zadana druga derivacija u rubovima — početak

Znamo da je

$$c_{2,1} = \frac{p_1''(x_0)}{2} = \frac{f''(x_0)}{2}.$$

Iz izraza za $c_{2,1}$ izlazi

$$\frac{3f[x_0, x_1] - 2s_0 - s_1}{h_1} = \frac{f''(x_0)}{2}.$$

Kad to sredimo, dobivamo

$$2s_0 + s_1 = 3f[x_0, x_1] - \frac{h_1}{2} f''(x_0).$$

Ovu jednadžbu treba dodati kao prvu u linearni sustav.
Uočite da je pripadni redak strogo dijagonalno dominantan!

Zadana druga derivacija u rubovima — kraj

Slično, iz

$$p_n''(x_n) = 2c_{2,n} + 6c_{3,n}h_n,$$

uvrštavanjem izraza za $c_{2,n}$ i $c_{3,n}$, izlazi

$$s_{n-1} + 2s_n = 3f[x_{n-1}, x_n] + \frac{h_n}{2} f''(x_n).$$

Tu jednadžbu dodajemo kao zadnju u linearni sustav i pripadni redak je opet strogo dijagonalno dominantan.

Dobiveni linearni sustav

- ima $n+1$-u jednadžbu i isto toliko nepoznanica,
- a matrica je regularna, pa ima jedinstveno rješenje.

Greška aproksimacije u funkcijskoj vrijednosti je $O(h^4)$.

Prirodni splajn

(c) Prirodni splajn

Poznato: tzv. slobodni krajevi (dolazi iz jednadžbe štapa),

$$\varphi''(x_0) = \varphi''(x_n) = 0.$$

Dodatne jednadžbe: isto kao u (b), samo se uvrsti $f''(x_0) = f''(x_n) = 0$, pa dobijemo

$$2s_0 + s_1 = 3f[x_0, x_1], \qquad s_{n-1} + 2s_n = 3f[x_{n-1}, x_n].$$

Greška aproksimacije:

- Ako f nema druge derivacije na rubu jednake 0, onda je greška u funkcijskoj vrijednosti samo $O(h^2)$.
- Ako ih ima, onda je greška $O(h^4)$ — kao u (b) slučaju.

Numerička aproksimacija derivacija u rubovima

(d) Numerička aproksimacija derivacija

Nepoznato: ponašanje derivacije funkcije f u rubovima.

Preostala dva parametra mogu se odrediti tako da

- numerički aproksimiramo φ', ili φ'', ili φ''', u rubovima.
- Kao aproksimaciju koristimo odgovarajuću derivaciju kubičnog interpolacijskog polinoma za f, koji prolazi točkama $x_0, \ldots, x_3$, odnosno, $x_{n-3}, \ldots, x_n$.

Greška aproksimacije je reda $O(h^4)$ u funkcijskoj vrijednosti, za bilo koju od ovih varijanti.

Lošija aproksimacija derivacija povećava grešku pri rubovima!

Not-a-knot (nije čvor) splajn

(e) Not-a-knot (nije čvor) splajn

Nepoznato: dvije "rubne" jednadžbe za splajn φ.

Umjesto neke aproksimacije (neke) derivacije od f u rubovima, koristimo tzv. "not-a-knot" (nije čvor) uvjet za splajn.

- Parametre s_0 i s_n biramo tako da su prva dva i posljednja dva kubična polinoma jednaka, tj. tako da je

$$p_1 = p_2, \qquad p_{n-1} = p_n.$$

To daje dodatne uvjete ljepljenja u čvorovima x_1 i x_{n-1}:

- u x_1 se zalijepi i treća derivacija polinoma p_1 i p_2,
- u x_{n-1} se zalijepi i treća derivacija polinoma p_{n-1} i p_n.

Not-a-knot (nije čvor) splajn — početak

Te zahtjeve možemo pisati kao

$$p_1'''(x_1) = p_2'''(x_1), \qquad p_{n-1}'''(x_{n-1}) = p_n'''(x_{n-1}).$$

Iz prve jednadžbe slijedi da su vodeći koeficijenti polinoma p_1 i p_2 jednaki,

$$c_{3,1} = c_{3,2}.$$

Uvjet ljepljenja druge derivacije u x_1 ima oblik (v. ranije)

$$c_{2,1} + 3c_{3,1}h_1 = c_{2,2}.$$

U formuli za $c_{2,2}$ iskoristimo da je $c_{3,2} = c_{3,1}$

$$c_{2,2} = \frac{f[x_1, x_2] - s_1}{h_2} - h_2 c_{3,2} = \frac{f[x_1, x_2] - s_1}{h_2} - h_2 c_{3,1}.$$

Not-a-knot (nije čvor) splajn — početak

U uvjet ljepljenja uvrstimo ovo i izraze za $c_{2,1}$, $c_{3,1}$. Dobivamo

$$\begin{aligned} &\frac{f[x_0,x_1]-s_0}{h_1}+2\,\frac{s_1+s_0-2f[x_0,x_1]}{h_1} \\ &\qquad\qquad = \frac{f[x_1,x_2]-s_1}{h_2}-h_2\,\frac{s_1+s_0-2f[x_0,x_1]}{h_1^2}. \end{aligned}$$

Sređivanjem, izlazi prva jednadžba

$$\begin{aligned} &h_2 s_0+(h_1+h_2)s_1 \\ &\qquad = \frac{(h_1+2(h_1+h_2))h_2\,f[x_0,x_1]+h_1^2\,f[x_1,x_2]}{h_1+h_2}. \end{aligned}$$

Not-a-knot (nije čvor) splajn — kraj

Na sličan način dobivamo i zadnju jednadžbu

$$
\begin{aligned}
&(h_{n-1} + h_n)s_{n-1} + h_{n-1}s_n \\
&\quad = \frac{(h_n + 2(h_{n-1} + h_n))h_{n-1}\, f[x_{n-1}, x_n] + h_n^2\, f[x_{n-2}, x_{n-1}]}{h_{n-1} + h_n}.
\end{aligned}
$$

Greška aproksimacije za funkcijske vrijednosti je $O(h^4)$.

Porijeklo naziva “not-a-knot”:

- kubični splajn uobičajeno ima neprekidne druge derivacije u unutarnjim čvorovima $x_1, \ldots, x_{n-1}$.
- Treća derivacija funkcije φ, općenito, “puca”.
- Kod “not-a-knot” splajna, u x_1 i x_{n-1} ne puca treća derivacija, pa to nisu “pravi” čvorovi splajna.

Ostali rubni uvjeti

(f) Ostali rubni uvjeti

Svi dosad opisani načini zadavanja rubnih uvjeta “čuvaju”

- trodijagonalnu strukturu linearnog sustava za nepoznate parametre s_k.

Za aproksimaciju periodičkih funkcija (na intervalu koji odgovara periodu) zahtijeva se periodičnost prve i druge derivacije u rubovima

$$\varphi'(x_0) = \varphi'(x_n), \qquad \varphi''(x_0) = \varphi''(x_n),$$

što vodi na jednadžbe

$$p_1'(x_0) = p_n'(x_n), \qquad p_1''(x_0) = p_n''(x_n).$$

Dobiveni linearni sustav više nije trodijagonalan.

Greška kubične splajn interpolacije

Neka je $f \in C^2[a,b]$ i pretpostavimo da

- f ima ograničenu i integrabilnu četvrtu derivaciju na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$.

Tada je

$$\|f(x) - \varphi(x)\|_\infty \leq \frac{5}{384}\, h^4\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f'(x) - \varphi'(x)\|_\infty \leq \frac{1}{24}\, h^3\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f''(x) - \varphi''(x)\|_\infty \leq \frac{3}{8}\, h^2\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f'''(x) - \varphi'''(x)\|_\infty \leq \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\beta} + \beta\right) h\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

gdje je $\beta := (\max_k h_k)/(\min_k h_k)$ mjera neuniformnosti mreže.

Greška kubičnog splajna i rubni uvjeti

Ove ocjene greške, naravno, vrijede samo uz pretpostavku

- da su i rubni uvjeti dovoljno točni,
- tj. i oni zadovoljavaju odgovarajuću ocjenu greške.

U protivnom, gubimo točnost pri rubovima.

Napomena.

- Dozvoljeno je kombinirati razne oblike rubnih uvjeta u jednom i drugom rubu.

Demo — Not-a-knot kubična splajn interp.

Pokazati kako izgleda Not-a-knot kubična splajn interpolacija na primjeru funkcije Runge:

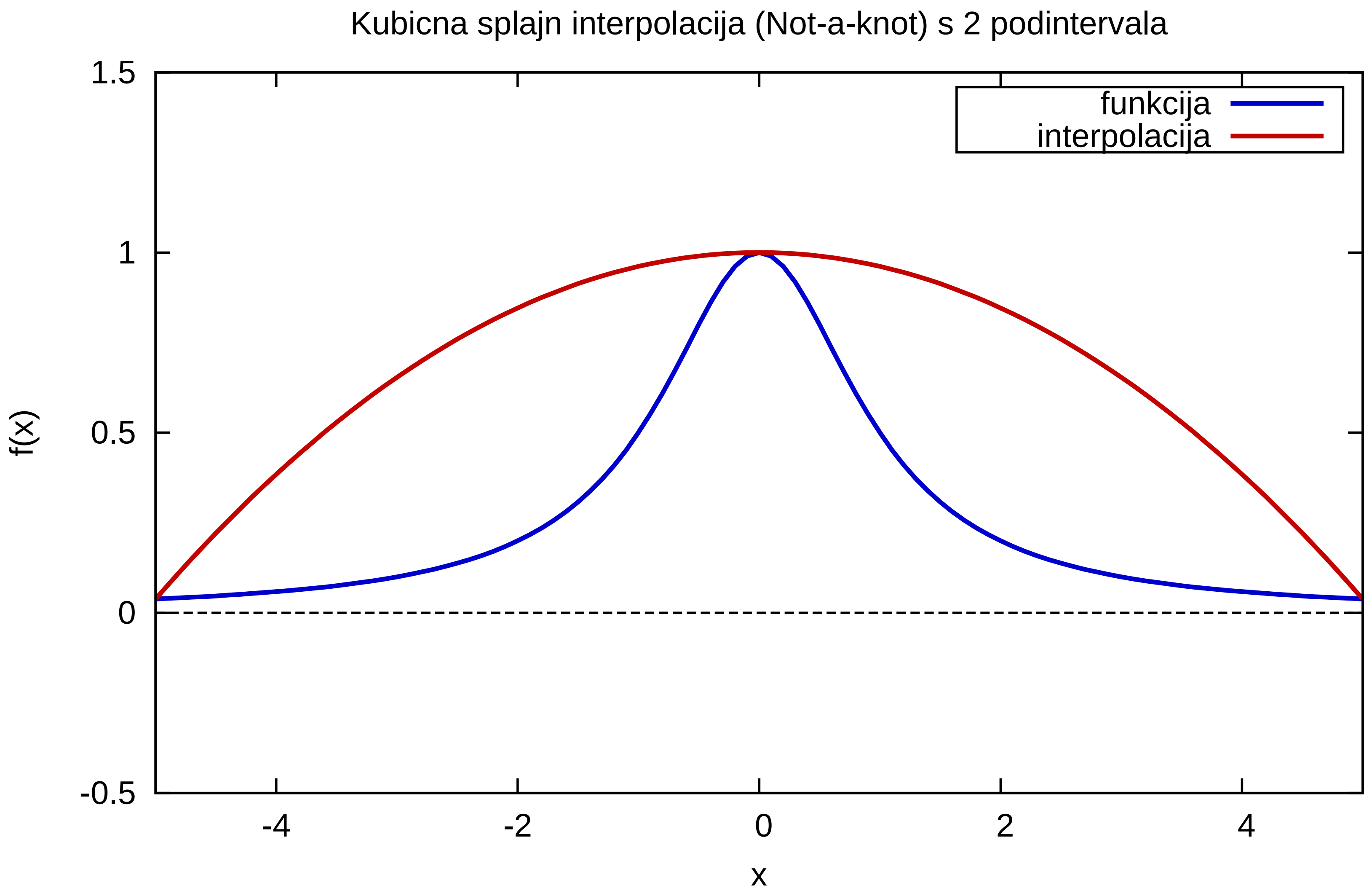
$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, \qquad x \in [-5, 5],$$

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

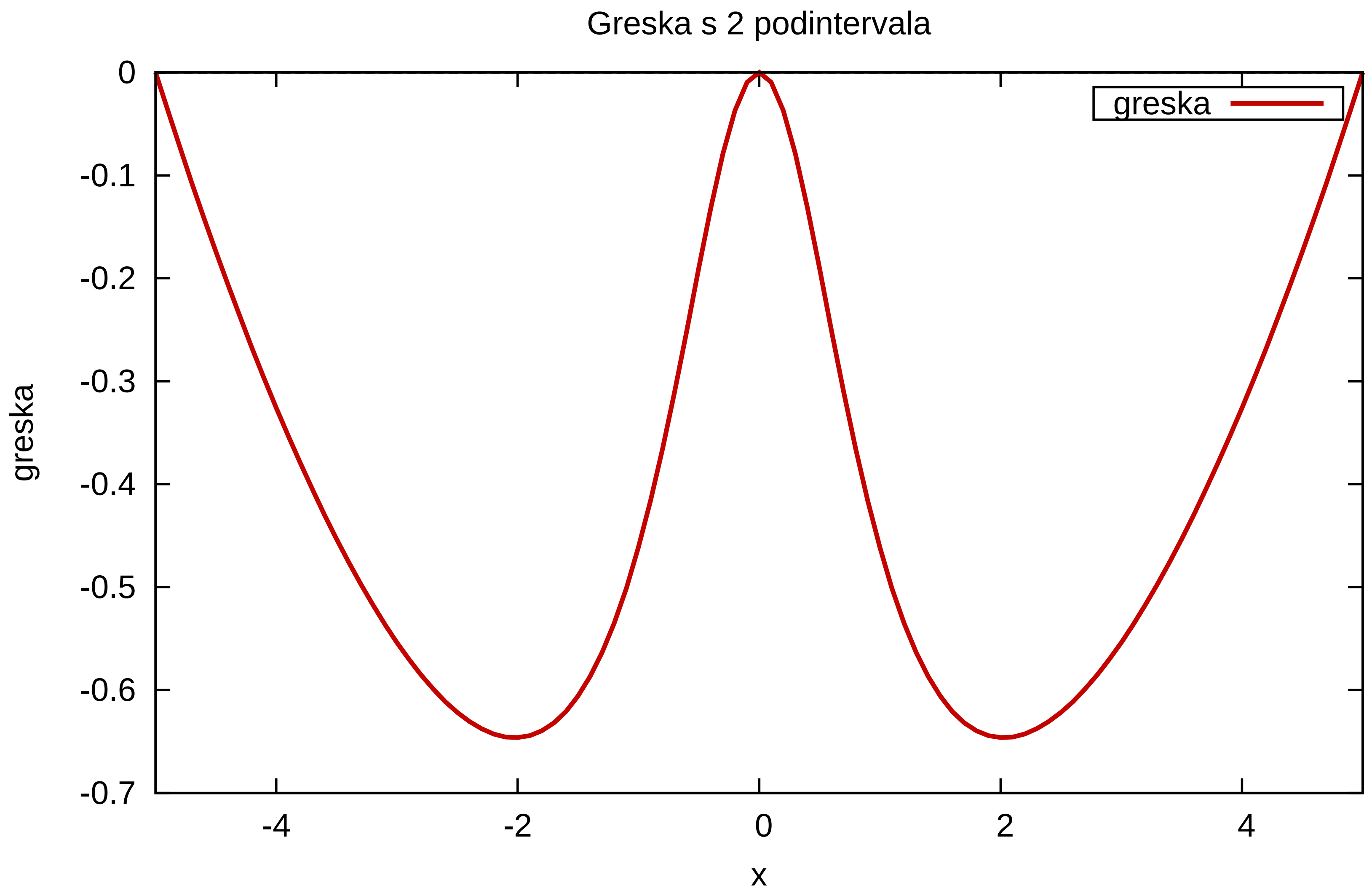
- `NM\07_F\07_GPT\CUB_SPL\00_srung.plt`

Slike interpolacija i grešaka su na sljedećim stranicama.

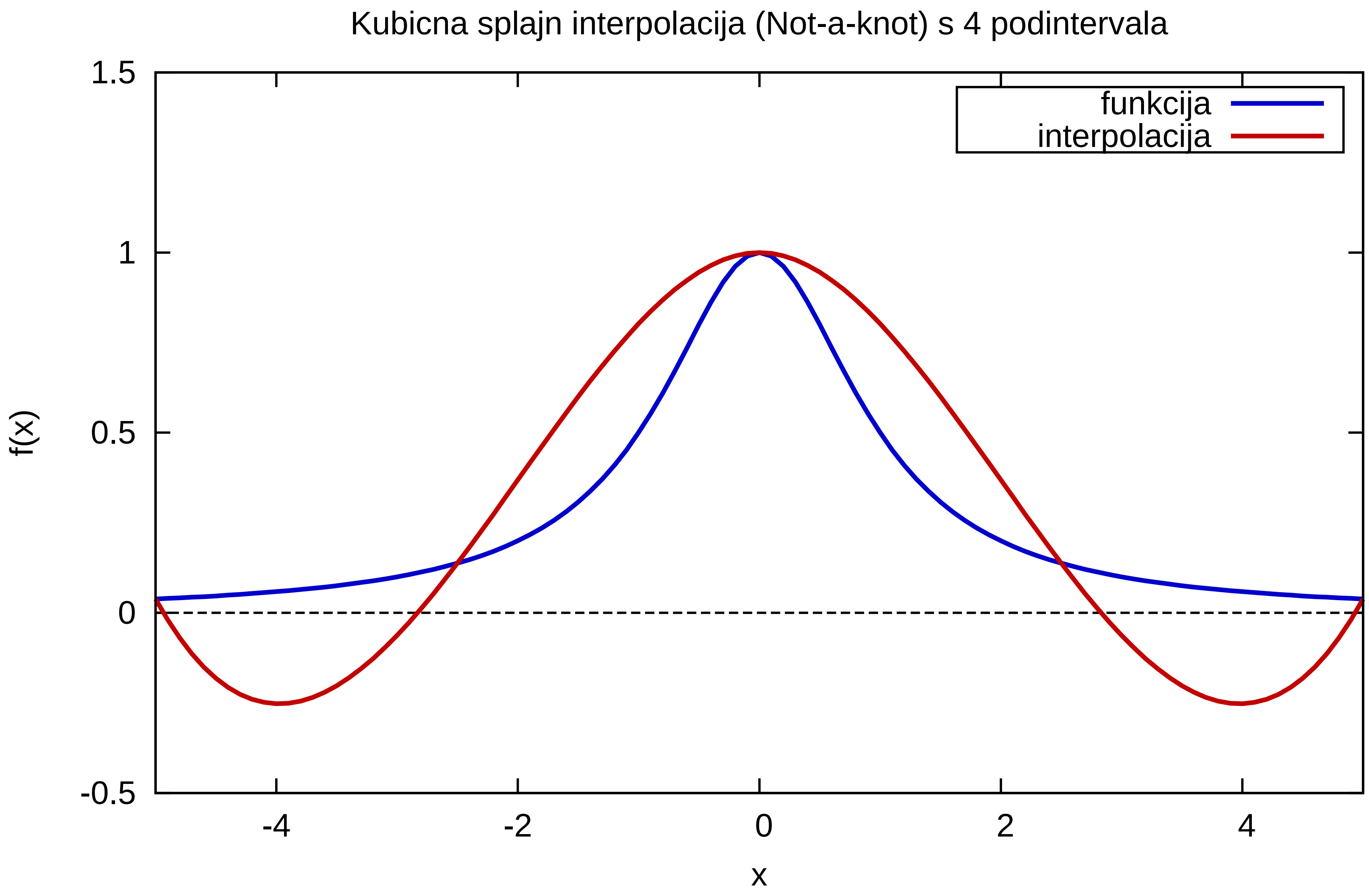
Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



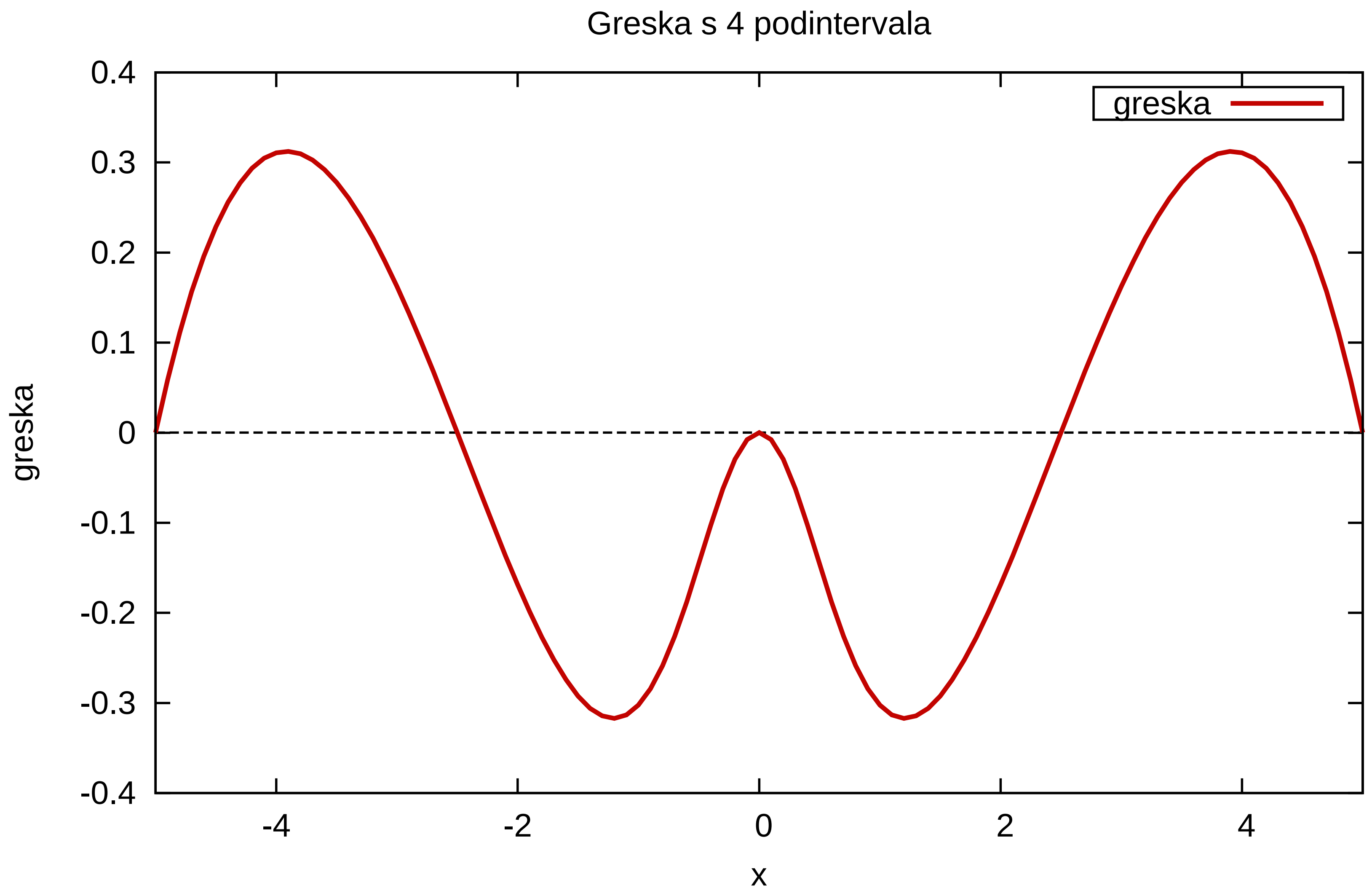
Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



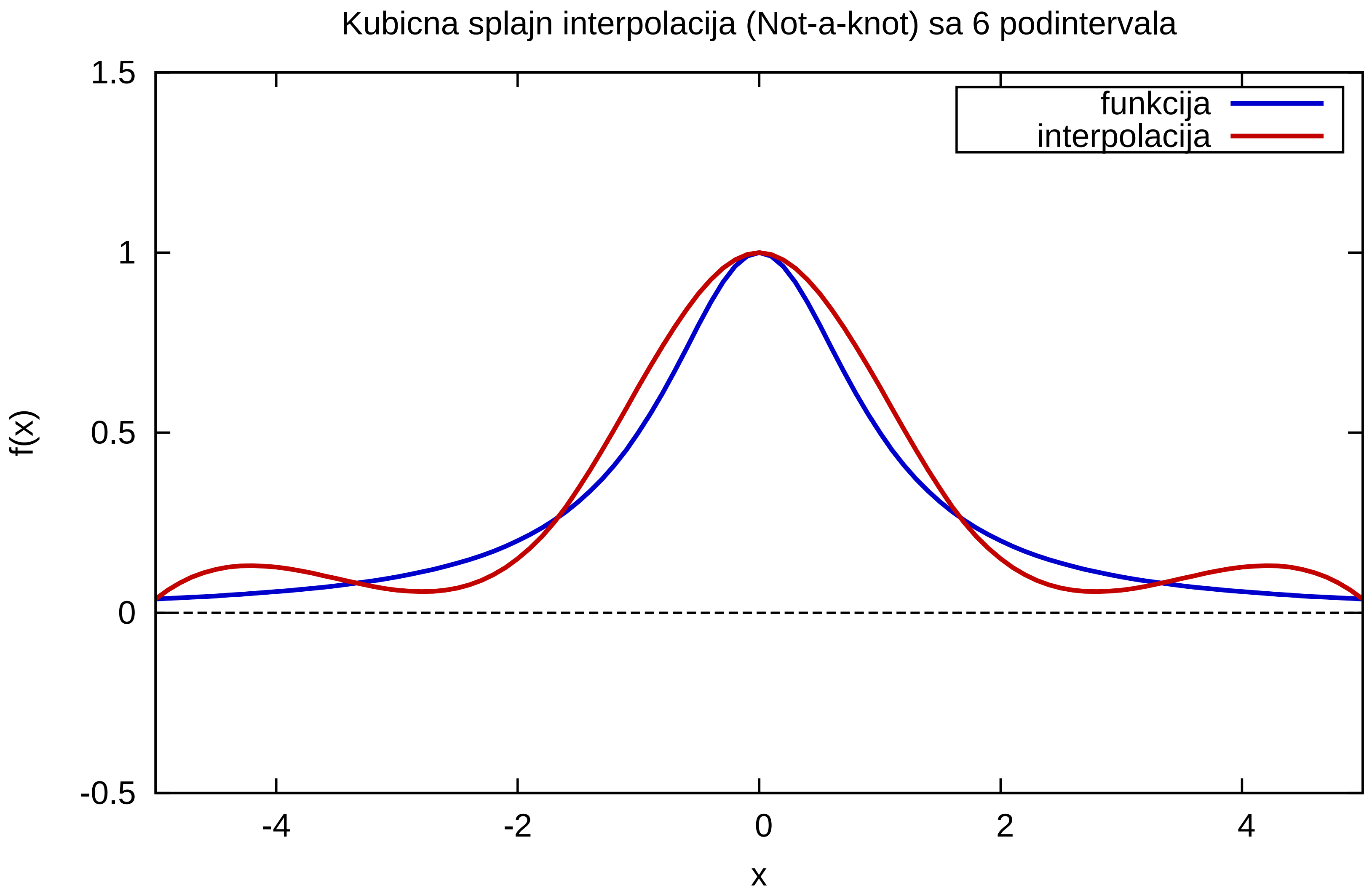
Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge

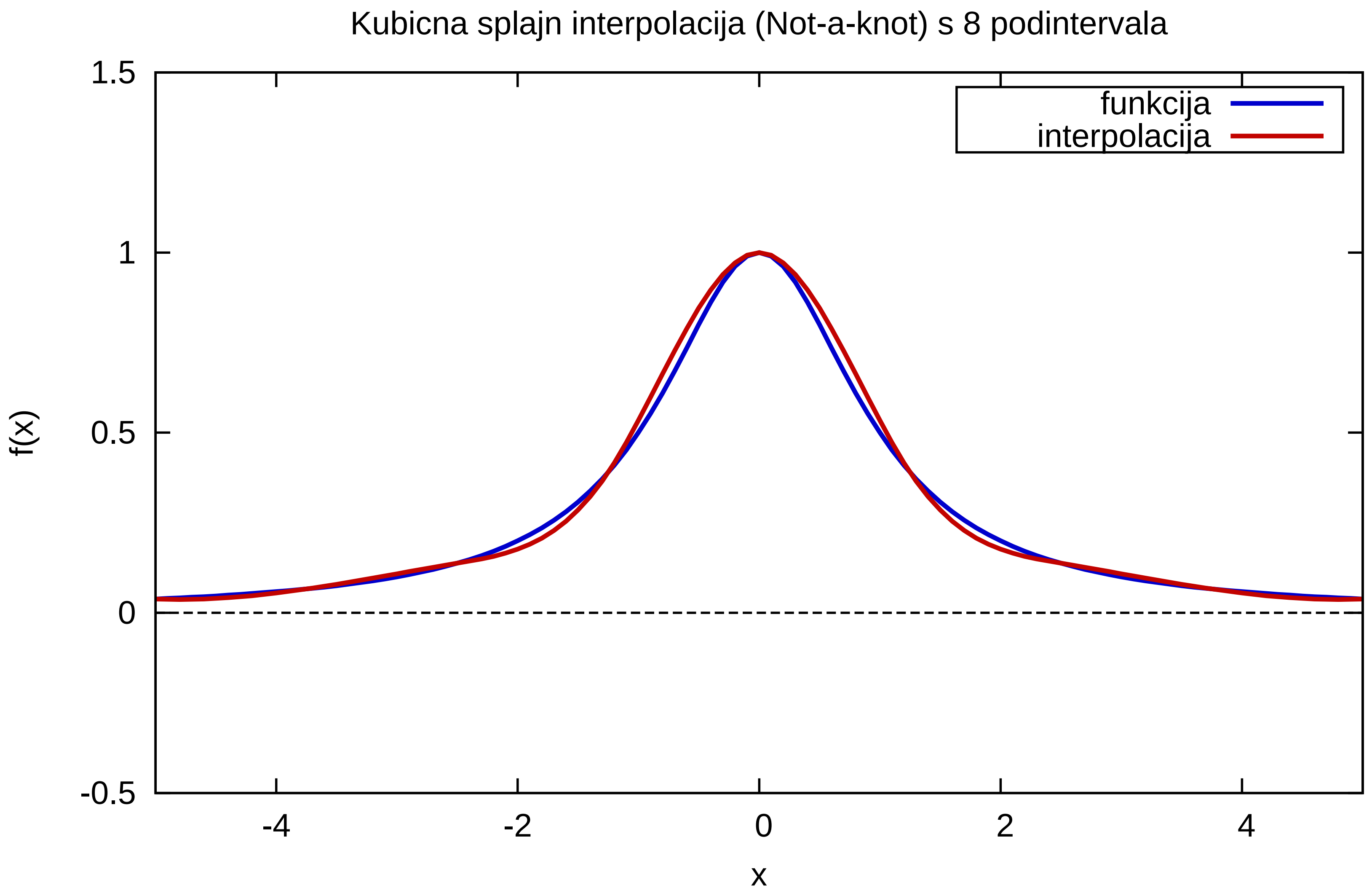


Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge

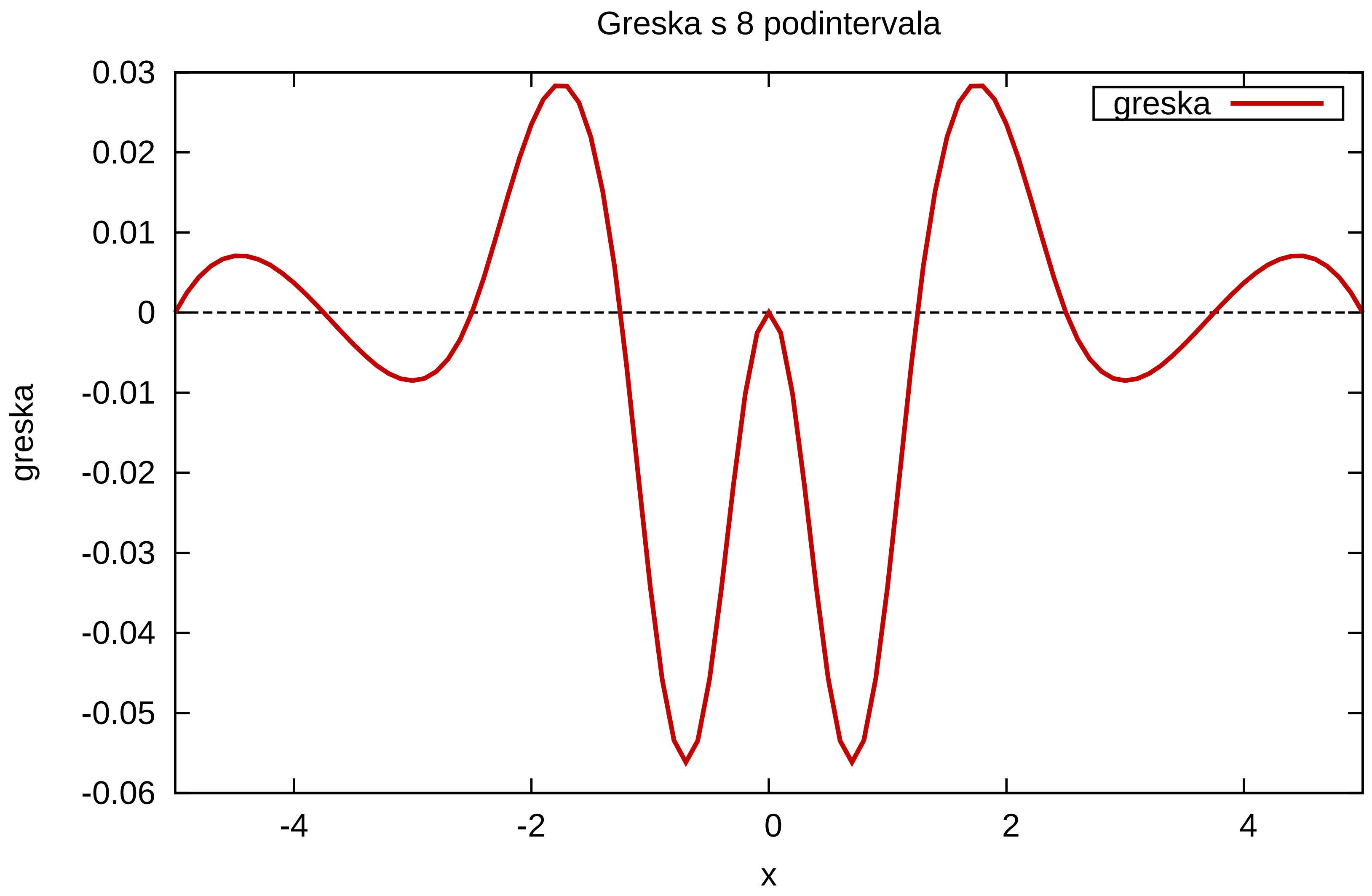


Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge

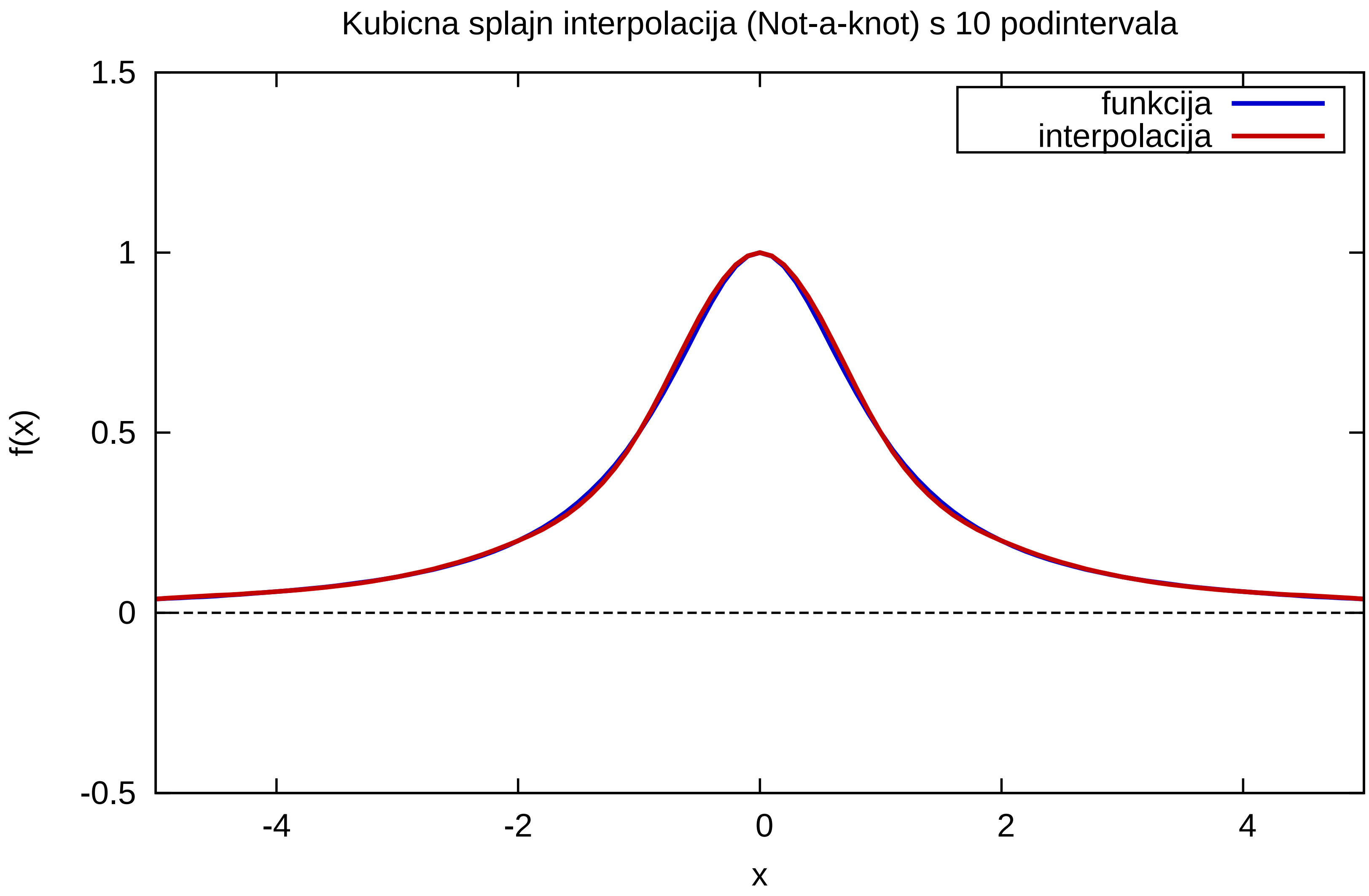
Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



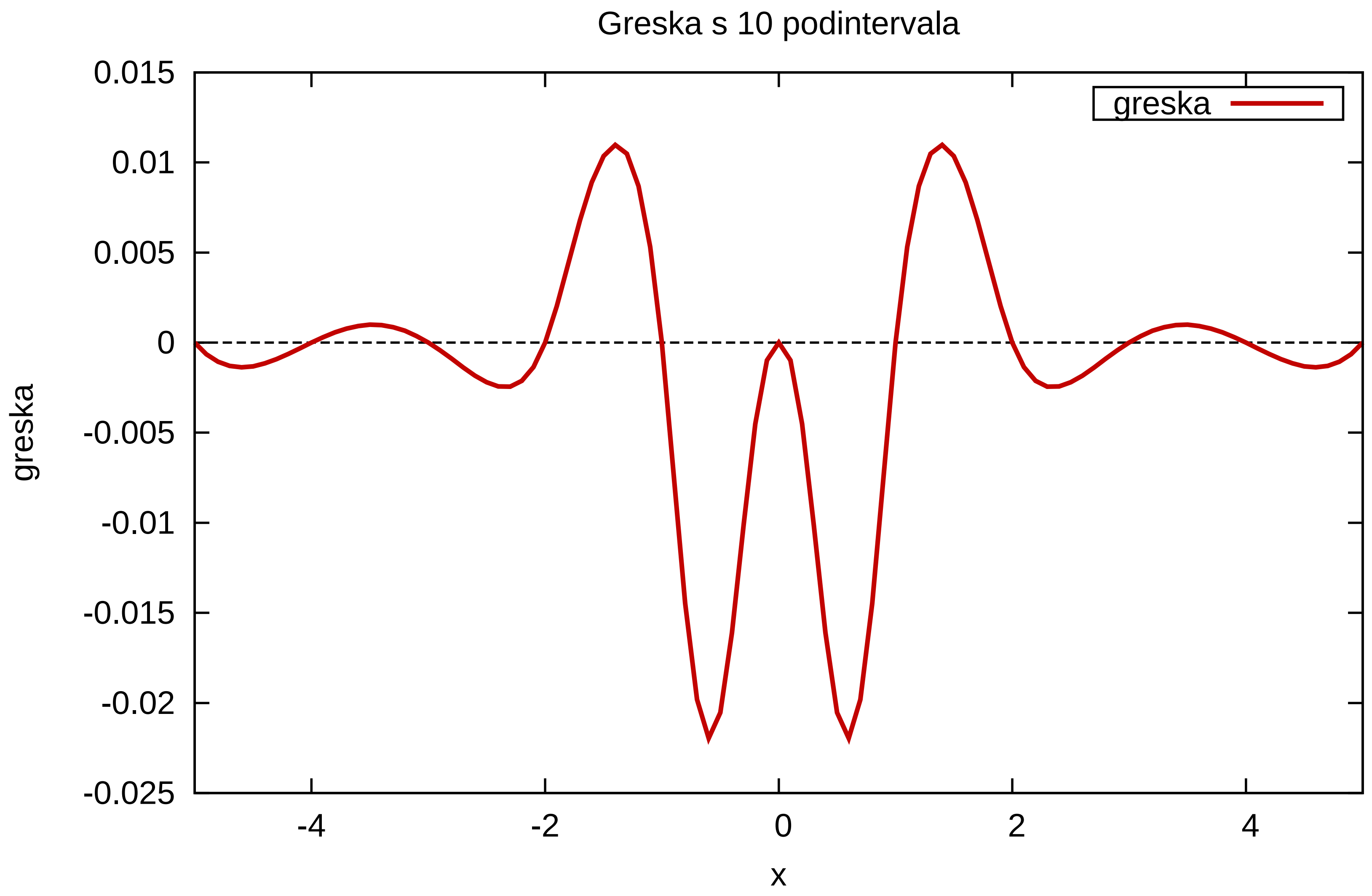
Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



Kubična splajn interp. (Not-a-knot) — Runge



Primjer — prirodni splajn

Primjer. Neka je

$$f(x) = \sin(\pi x).$$

Nađite prirodni splajn koji aproksimira funkciju f na $[0, 1]$ s čvorovima interpolacije $x_k = 0.2 \cdot k$, za $k = 0, \ldots, 5$.

Izračunajte vrijednost tog splajna u točki 0.55.

Čvorovi su ekvidistantni s razmakom $h = 0.2$, pa "srednje" jednadžbe linearnog sustava za splajn glase

$$hs_{k-1} + 4hs_k + hs_{k+1} = 3(hf[x_{k-1}, x_k] + hf[x_k, x_{k+1}]),$$

za $k = 1, \ldots, 4$.

Za račun "na ruke" možemo skratiti h. Međutim, u programu koji računa rješenje ostaju polazne jednadžbe. Zato ne kratim.

Primjer — prirodni splajn

Dodatne jednadžbe (prva i zadnja) za prirodni splajn su

$$2s_0 + s_1 = 3f[x_0, x_1], \qquad s_4 + 2s_5 = 3f[x_4, x_5].$$

Za desnu stranu sustava trebamo prve podijeljene razlike

x_k	$f[x_k]$	$f[x_k, x_{k+1}]$
0.0	0.0000000000	
		2.9389262615
0.2	0.5877852523	
		1.8163563200
0.4	0.9510565163	
		0.0000000000
0.6	0.9510565163	
		-1.8163563200
0.8	0.5877852523	
		-2.9389262615
1.0	0.0000000000	

Primjer — prirodni splajn

Iz svih ovih podataka dobivamo linearni sustav za “nagibe” s_k

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 1.0 & & & & \\ 0.2 & 0.8 & 0.2 & & & \\ & 0.2 & 0.8 & 0.2 & & \\ & & 0.2 & 0.8 & 0.2 & \\ & & & 0.2 & 0.8 & 0.2 \\ & & & & 1.0 & 2.0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ s_4 \\ s_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.8167787844 \\ 2.8531695489 \\ 1.0898137920 \\ -1.0898137920 \\ -2.8531695489 \\ -8.8167787844 \end{bmatrix}$$

Rješenje tog linearnog sustava (GE bez pivotiranja) je

$$\begin{aligned} s_0 = -s_5 &= 3.1387417029, \\ s_1 = -s_4 &= 2.5392953786, \\ s_2 = -s_3 &= 0.9699245271. \end{aligned}$$

Primjer — prirodni splajn

Zadana točka $x = 0.55$ nalazi se u intervalu $[x_2, x_3] = [0.4, 0.6]$. Restrikcija splajna φ na taj interval je kubični polinom p_3, kojeg nalazimo iz tablice podijeljenih razlika

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \ldots, t_{k+3}]$
0.4	0.9510565163			
		0.9699245271		
0.4	0.9510565163		-4.8496226357	
		0.0000000000		0.0000000000
0.6	0.9510565163		-4.8496226357	
		-0.9699245271		
0.6	0.9510565163			

Odavde odmah slijedi da je p_3, zapravo, kvadratni polinom

$$p_3(x) = 0.9510565163 + 0.9699245271(x - 0.4) \\ - 4.8496226357(x - 0.4)^2.$$

Primjer — prirodni splajn

Pogledajmo još aproksimacije za funkciju, prvu i drugu derivaciju u točki 0.55.

	funkcija $j = 0$	prva derivacija $j = 1$	druga derivacija $j = 2$
$\varphi^{(j)}(0.55)$	0.9874286861	-0.4849622636	-9.6992452715
$f^{(j)}(0.55)$	0.9876883406	-0.4914533661	-9.7480931932
greška	0.0002596545	-0.0064911026	-0.0488479218

Aproksimacije su vrlo točne, iako je h relativno velik, jer funkcija $\sin(\pi x)$ zadovoljava prirodne rubne uvjete u 0 i 1.

Greška aproksimacije funkcije je reda veličine $O(h^4)$, prve derivacije $O(h^3)$, a druge derivacije $O(h^2)$.

Po dijelovima parabolička interpolacija

Po dijelovima parabolička interpolacija

Ako stavimo $m = 2$, tj. na svakom podintervalu uzmemo kvadratni polinom, onda

- moramo naći $3n$ koeficijenata,
- a imamo $2n$ uvjeta interpolacije za funkcijske vrijednosti.

Zahtijevamo da aproksimacijska funkcija φ u unutarnjim čvorovima interpolacije $x_1, \ldots, x_{n-1}$ ima

- neprekidnu prvu derivaciju, pa smo dodali još $n - 1$ uvjet.
- dakle, treba nam još jedan uvjet!

Taj uvjet ne može se postaviti simetrično, ali se aproksimacija može naći.

Ovaj pristup se uobičajeno ne koristi, jer kontrolu derivacije možemo napraviti samo na jednom rubu.

Parabolički splajn — natuknice

Simetričnost, nalik na kubični splajn, dobivamo tako da

- čvorovi interpolacije x_k nisu rubne točke podintervala

za parabolički splajn, tj. imamo dvije mreže i razlikujemo

- čvorove splajna (t_k) od čvorova interpolacije (x_k).

Čvorove za splajn stavljamo između točaka podataka

$$x_0 < t_0 < x_1 < t_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < t_{n-1} < x_n,$$

a na rubovima možemo staviti $t_{-1} \leq x_0$ i $x_n \leq t_n$.

Tako dobivamo $n+1$ kvadratnih polinoma p_k, na intervalima $[t_{k-1}, t_k]$, za $k = 0, \ldots, n$. Uvjeti interpolacije i ljepljenja funkcije i derivacije u unutarnjim čvorovima splajn mreže, ostavljaju točno dva rubna uvjeta u t_{-1} i t_n.

Dodatna literatura o splajnovima

Standardni izbor čvorova za splajn mrežu je u polovištima intervala između podataka,

$$t_k = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}, \qquad k = 0, \ldots, n-1.$$

Na rubovima se uzima $t_{-1} = x_0$ i $t_n = x_n$, pa se zadaju rubni uvjeti na prvu derivaciju u x_0 i x_n.

Postoji cijela teorija splajn funkcija — ne samo polinomnih.

- Vektorski prostor, "lokalna" baza — B–splajnovi, itd.

Dodatna literatura:

- Carl de Boor,
  A Practical Guide to Splines (Revised Edition),
  Springer, New York, 2001.

Usporedba raznih vrsta interpolacije

Demo — Interpolacija izmjerenih podataka

Pokazati kako izgleda usporedba raznih vrsta interpolacije:

- interpolacija polinomima,
- Akimina po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija,
- interpolacija Not-a-knot kubičnim splajnom,

na skupu izmjerenih podataka u praksi,

- s raznim izborima čvorova interpolacije.

Ovo je poznato "težak" primjer za interpolaciju!
Razlog: podaci naliče na arctg = integral funkcije Runge.

- `NM\07_F\07_GPT\C_Interp\00_interp.plt`

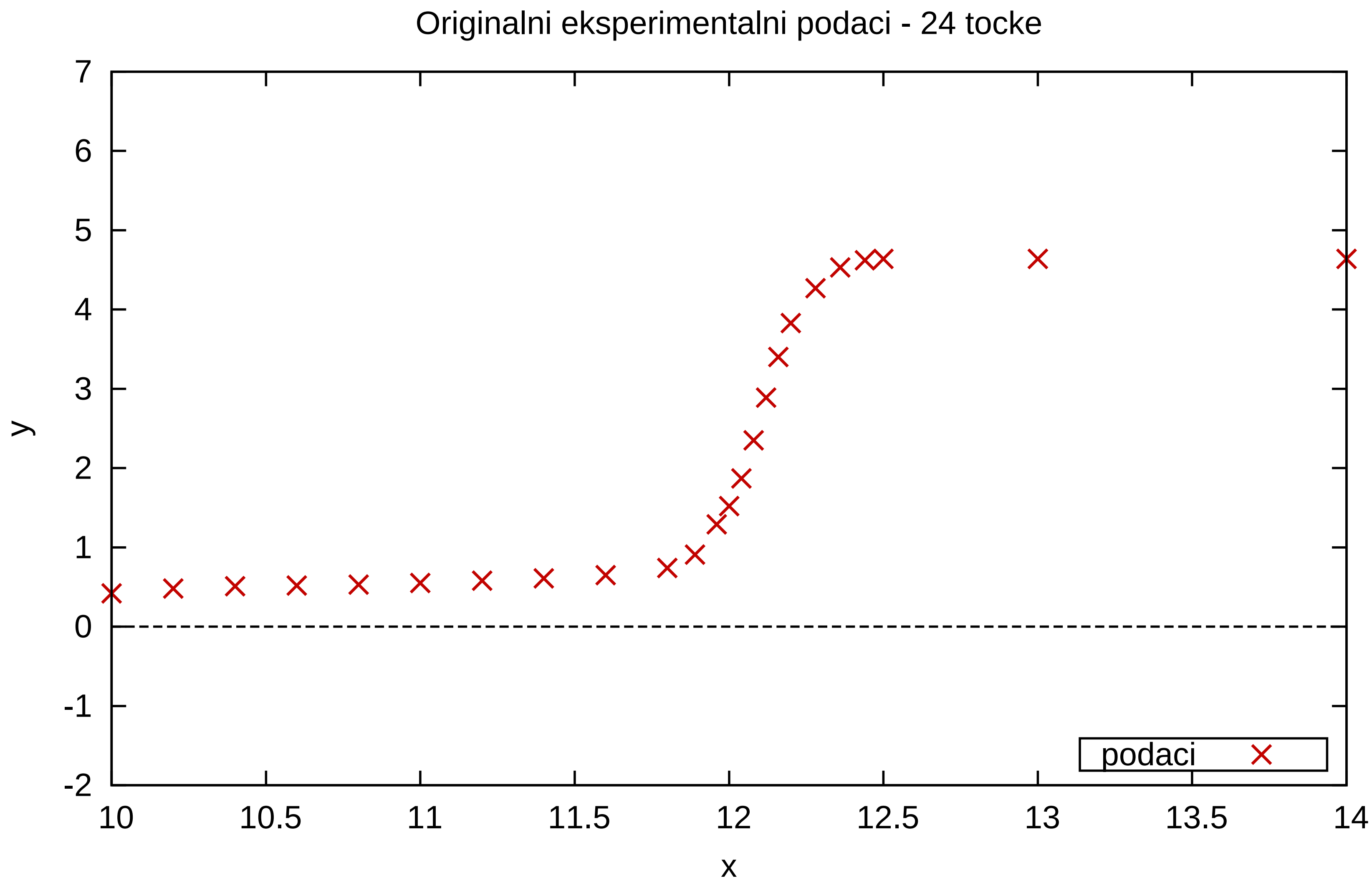
Cijeli demo je na sljedećim stranicama.

Eksperimentalno izmjereni podaci — tablica

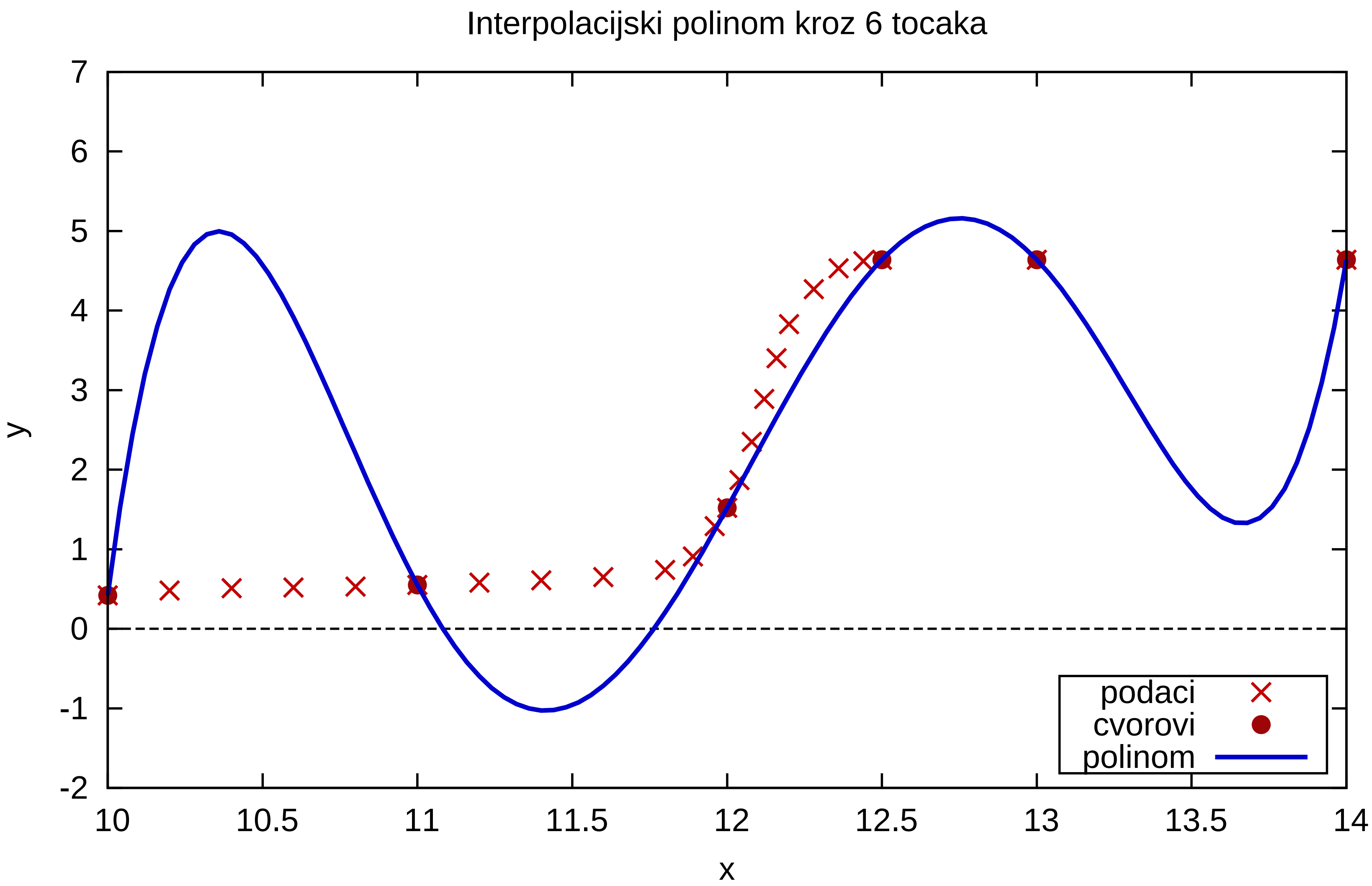
Originalni eksperimentalno izmjereni podaci su 24 točke:

k	x_k	y_k	k	x_k	y_k	k	x_k	y_k
1	10.00	0.42	9	11.60	0.65	17	12.16	3.40
2	10.20	0.48	10	11.80	0.74	18	12.20	3.83
3	10.40	0.51	11	11.89	0.91	19	12.28	4.27
4	10.60	0.52	12	11.96	1.29	20	12.36	4.53
5	10.80	0.53	13	12.00	1.52	21	12.44	4.62
6	11.00	0.55	14	12.04	1.87	22	12.50	4.64
7	11.20	0.58	15	12.08	2.35	23	13.00	4.64
8	11.40	0.61	16	12.12	2.89	24	14.00	4.64

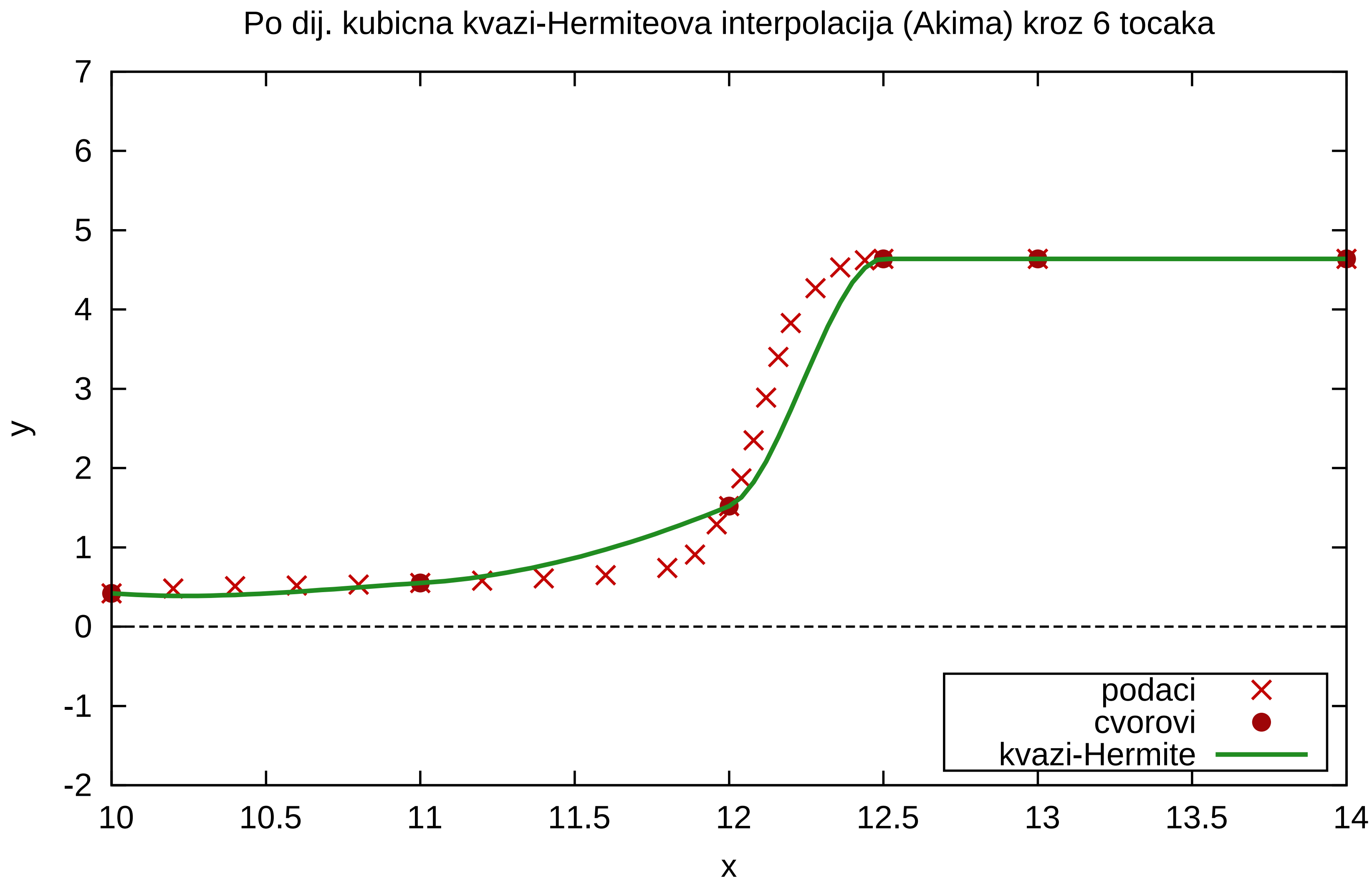
Eksperimentalno izmjereni podaci



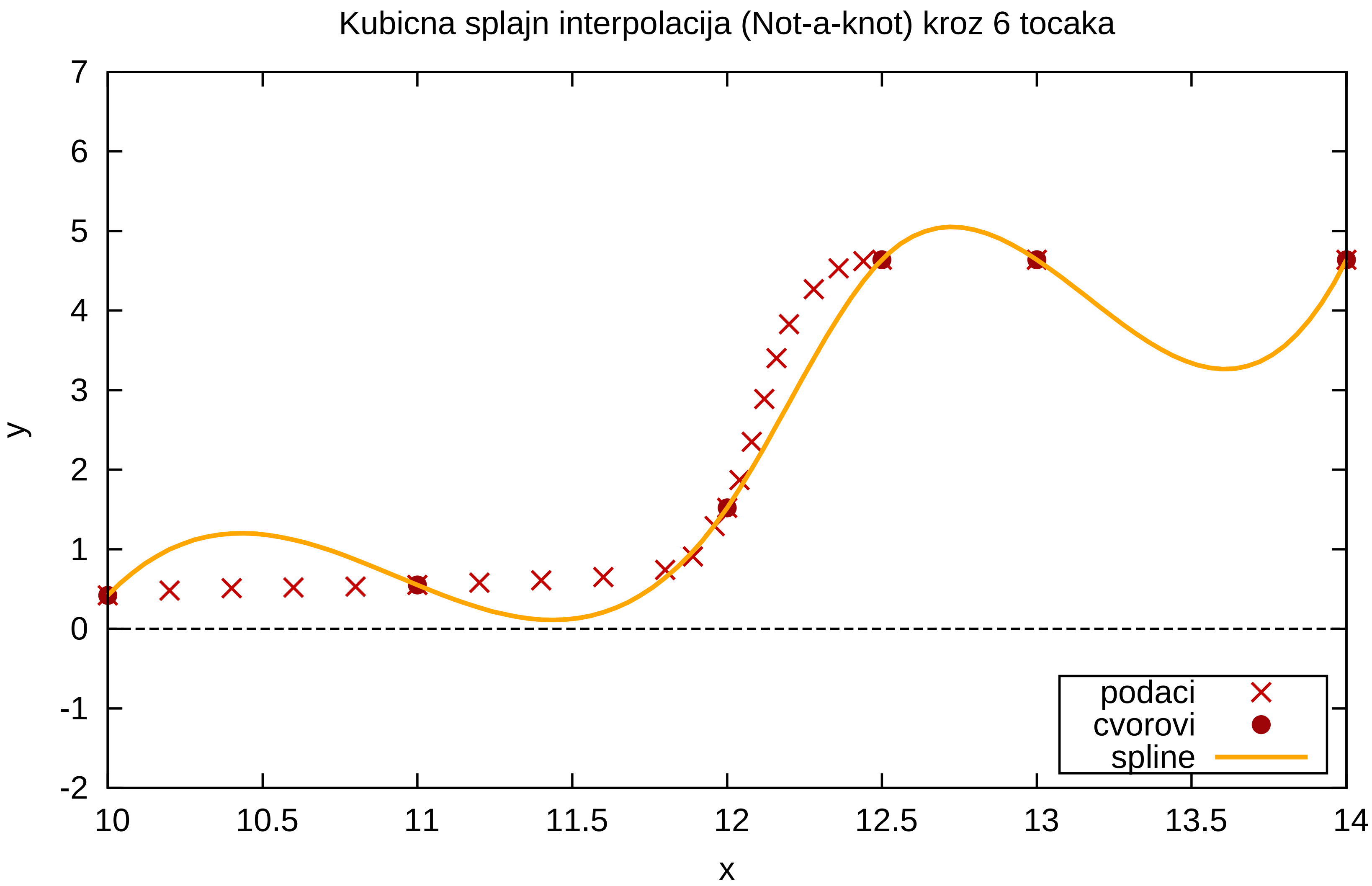
Polinom — 6 čvorova



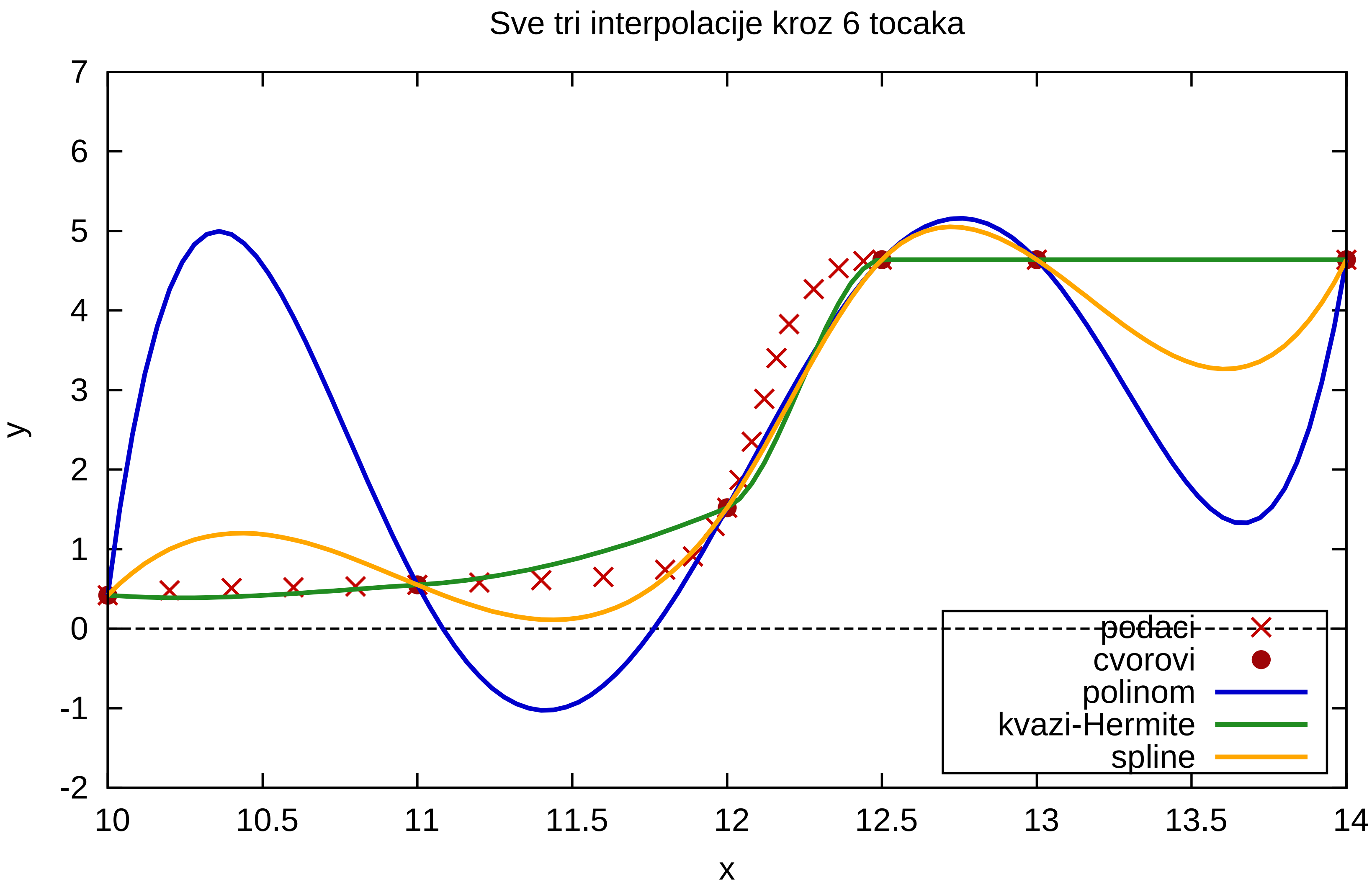
Akima — 6 čvorova



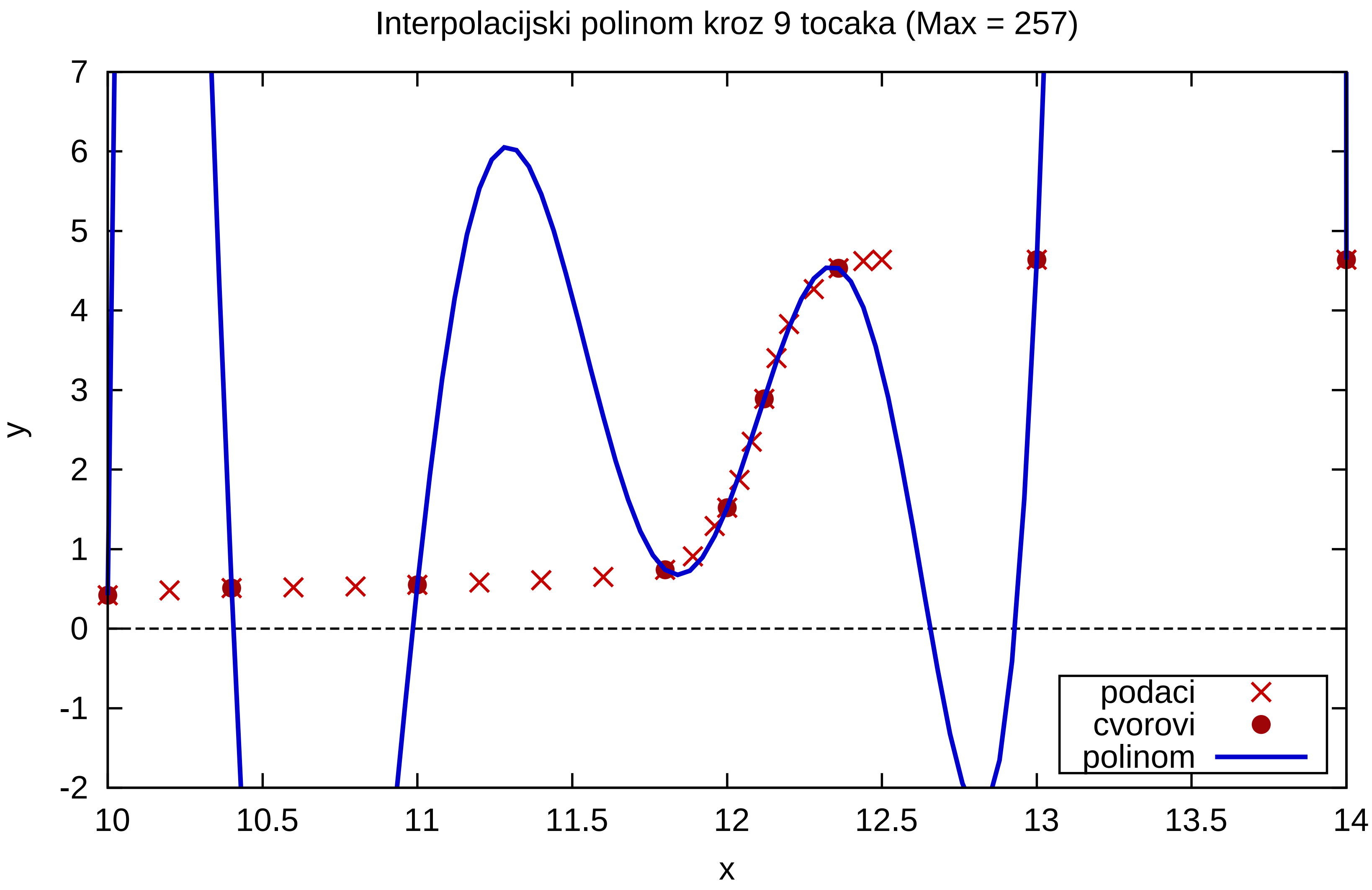
Kubični splajn — 6 čvorova



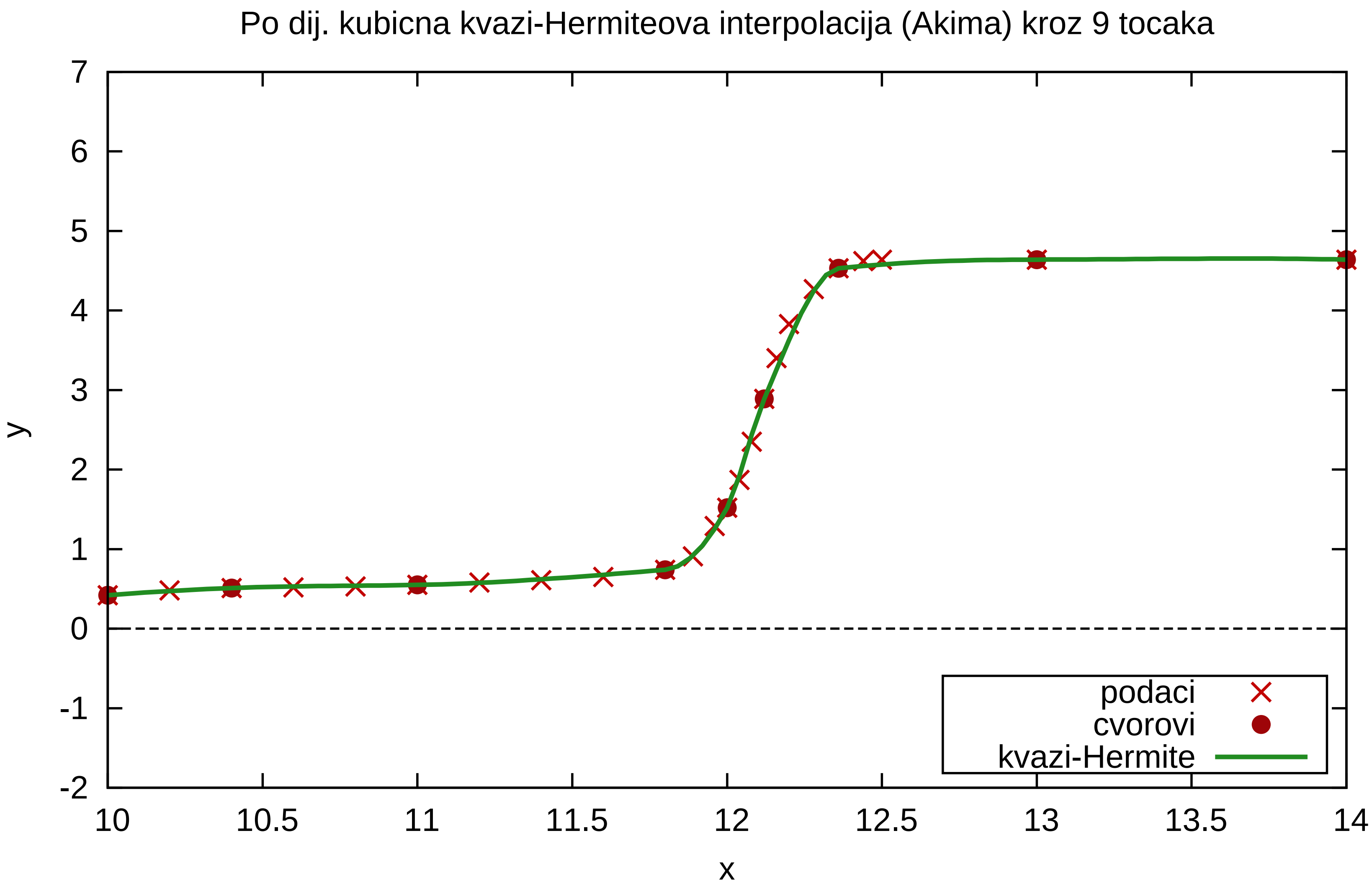
Sve tri interpolacije zajedno — 6 čvorova



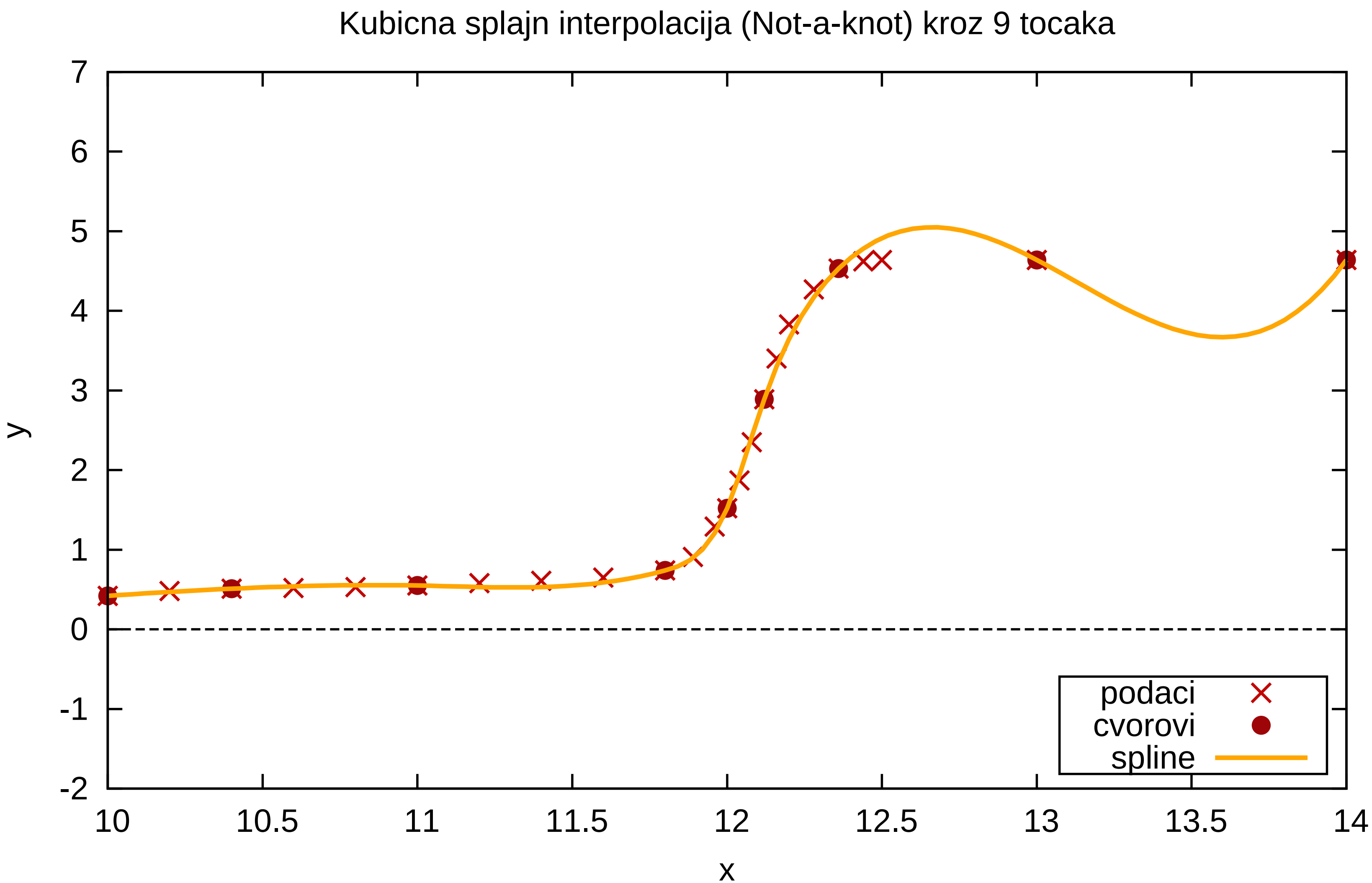
Polinom — 9 čvorova (lošije!)



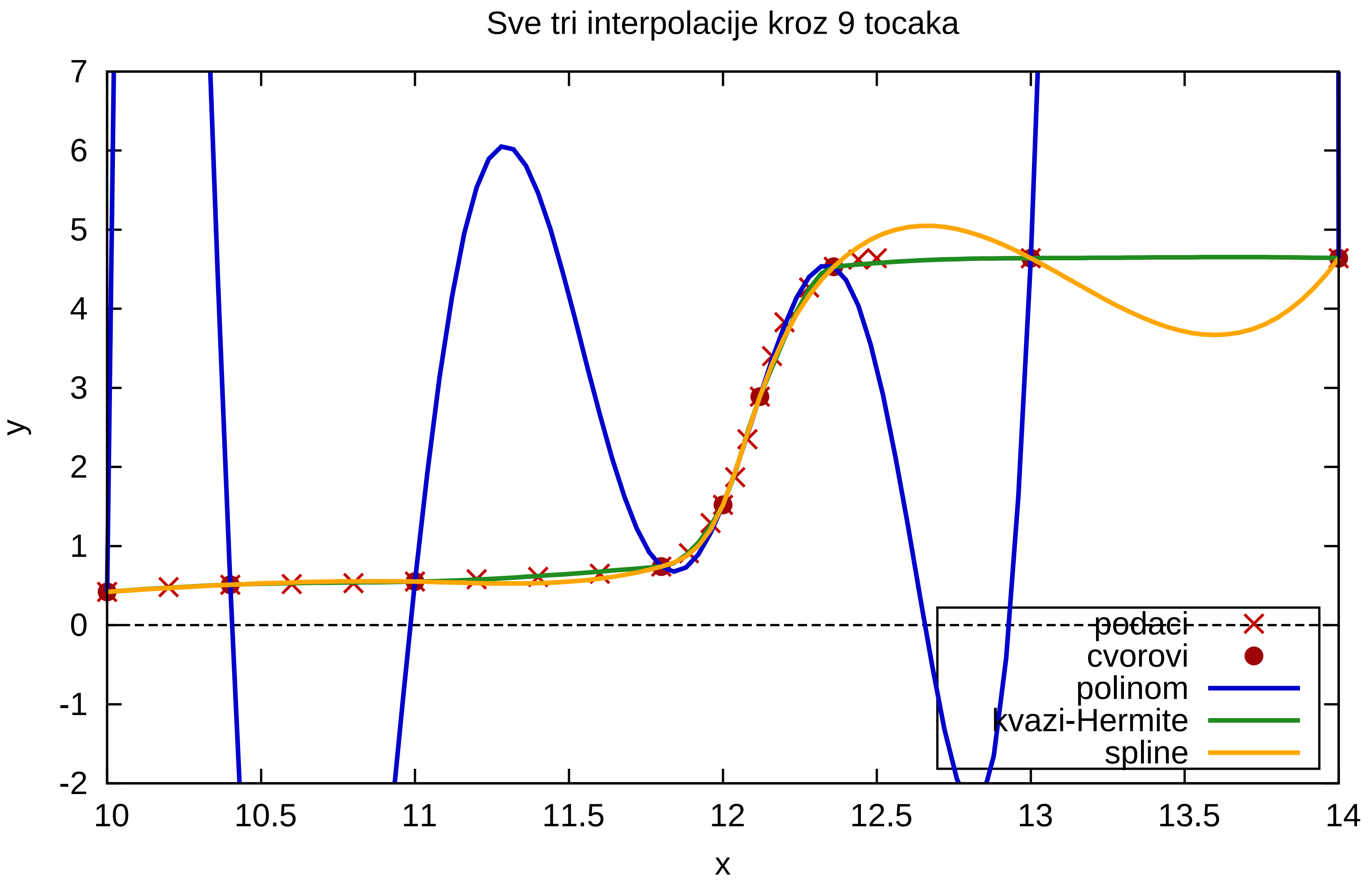
Akima — 9 čvorova



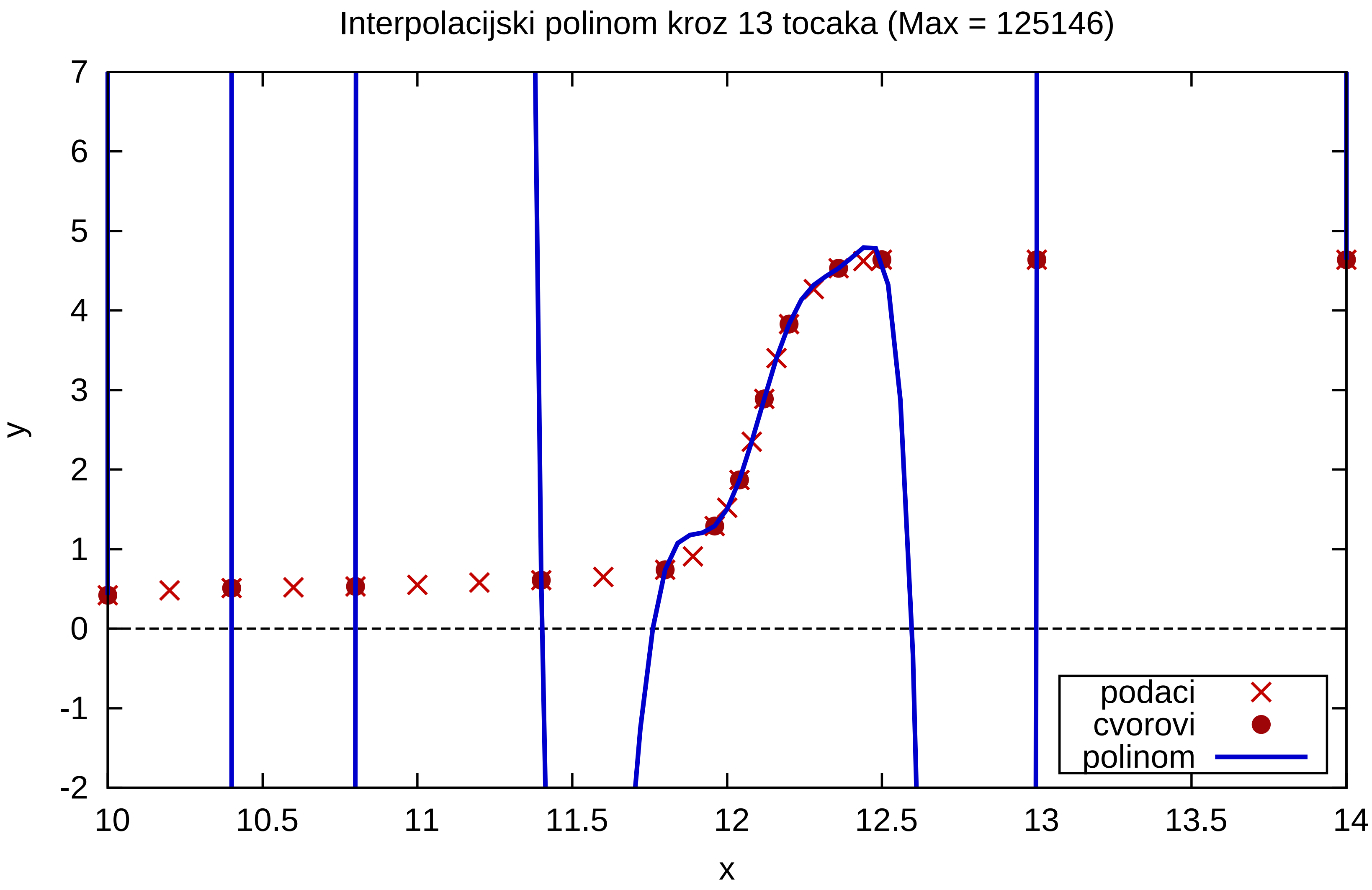
Kubični splajn — 9 čvorova



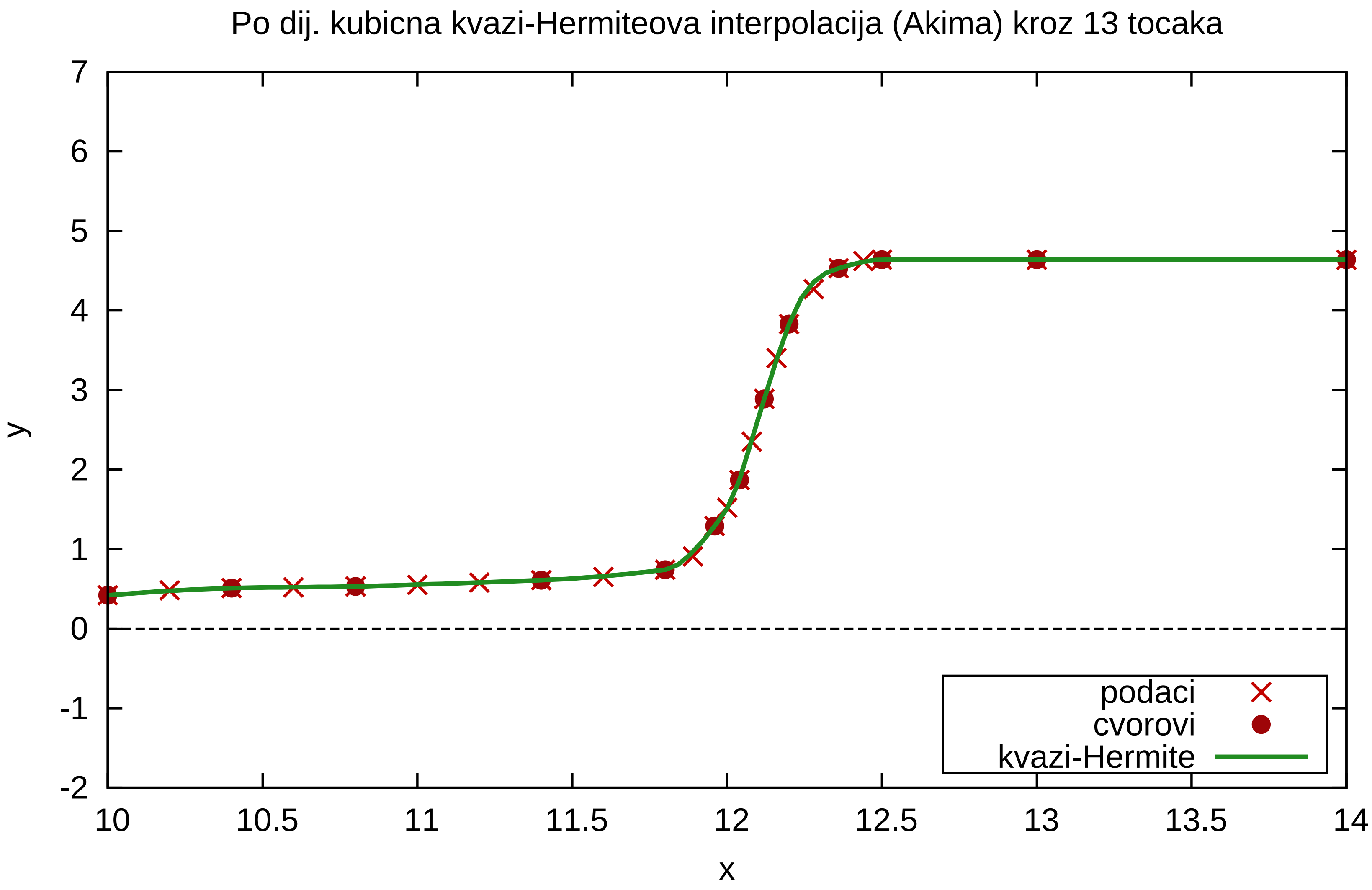
Sve tri interpolacije zajedno — 9 čvorova



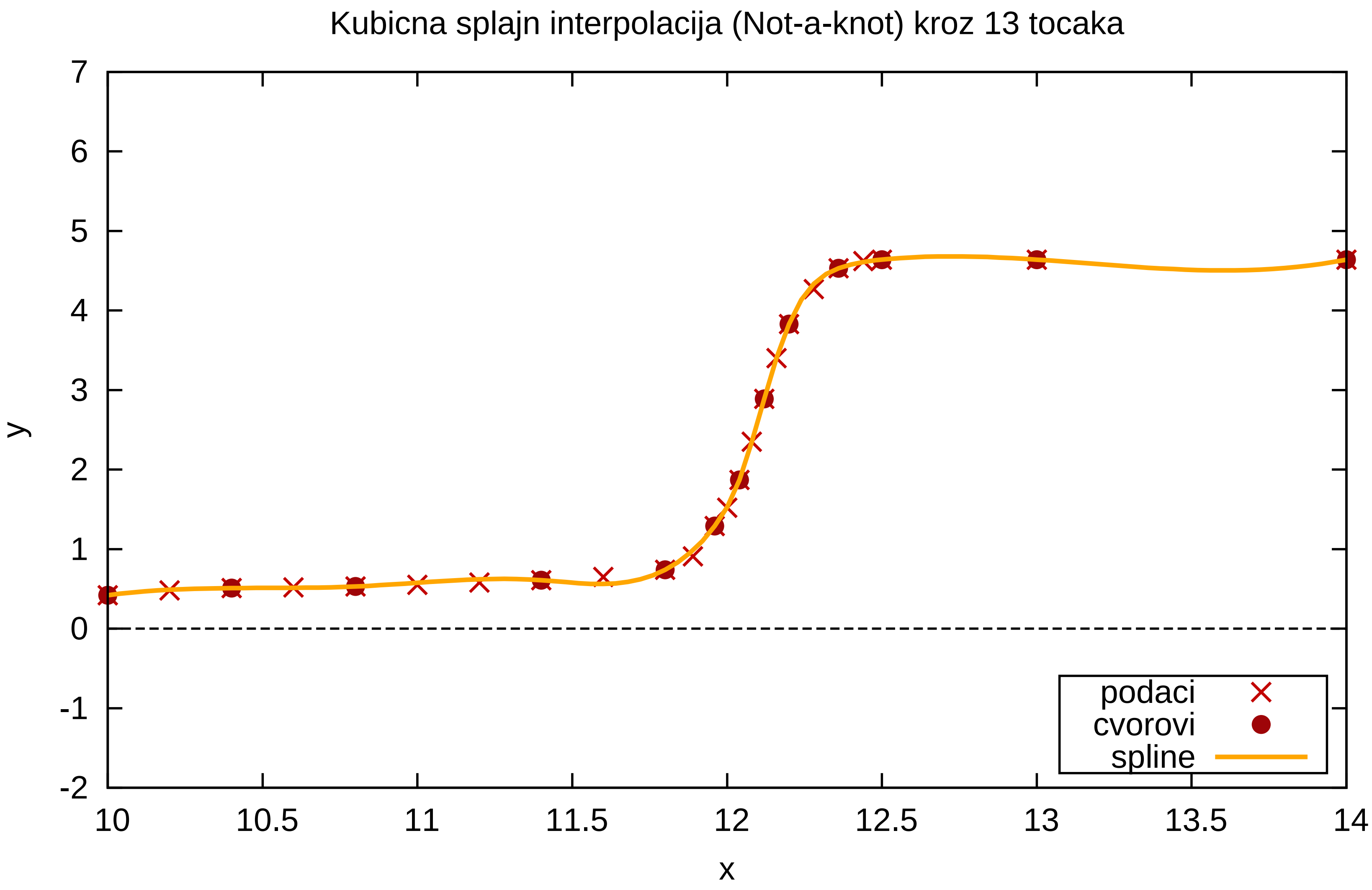
Polinom — 13 čvorova (još lošije!)



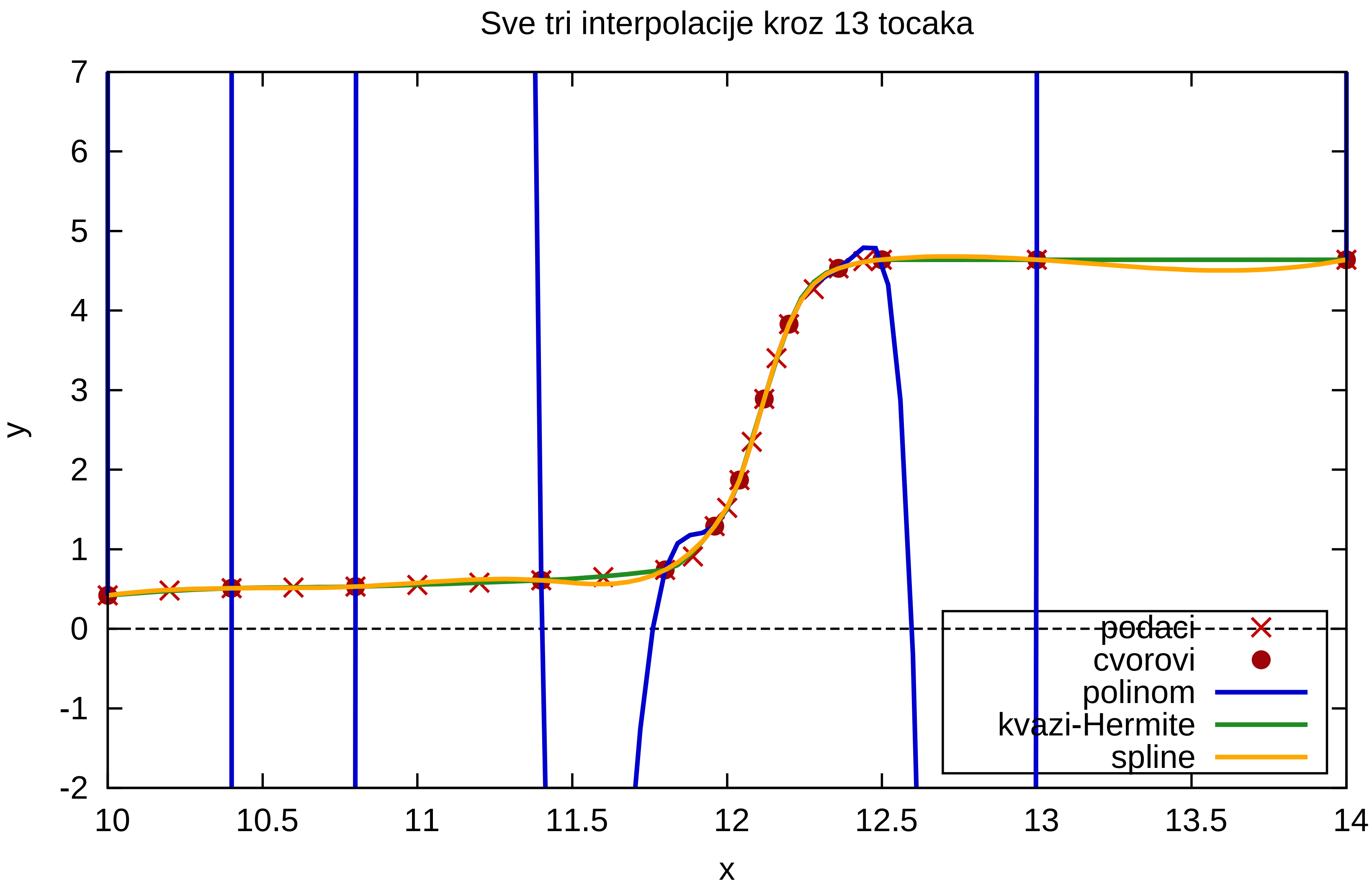
Akima — 13 čvorova



Kubični splajn — 13 čvorova



Sve tri interpolacije zajedno — 13 čvorova



Korekcija — dopuna izmjerenih podataka

Gdje je problem?

- Pred kraj podataka, na "ravnom" dijelu, imamo premalo izmjerenih točaka.
- Ponašanje y-vrijednosti je toliko očito, da se ne isplati raditi "gušća" mjerenja!

Međutim, za dobru aproksimaciju — tamo ipak fale podaci, koje bismo mogli uzeti kao točke za interpolaciju.

Kad je već tako "očito", nitko nam ne brani da tamo dodamo to što fali u originalnim mjerenjima.

- Zato, u okolini $x = 13$ — između 12.5 i 14, dodajemo još 6 točaka, sve s istom vrijednošću 4.64.

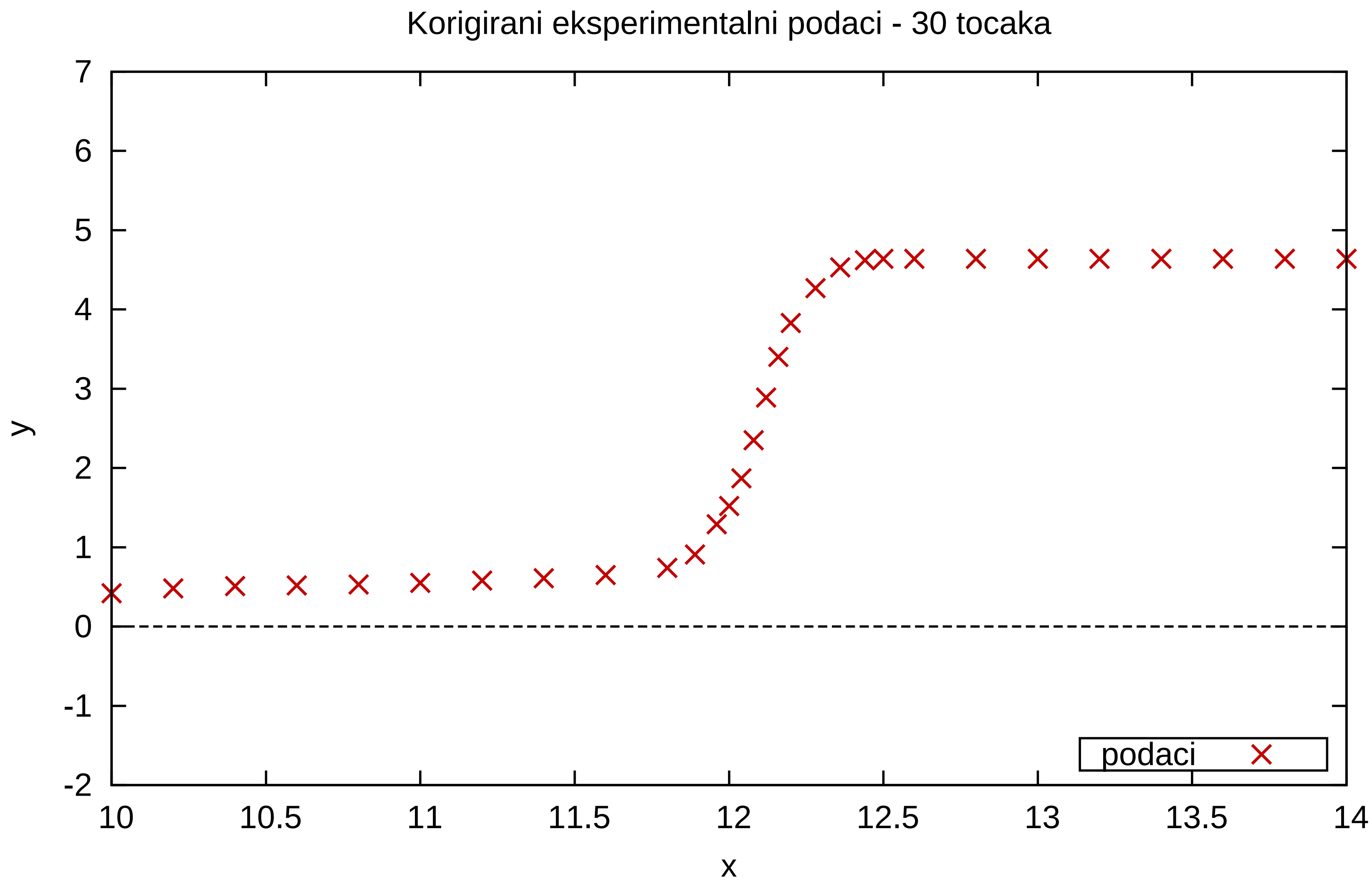
Tako dobivamo puno veći izbor čvorova za interpolaciju!

Korigirani izmjereni podaci — tablica

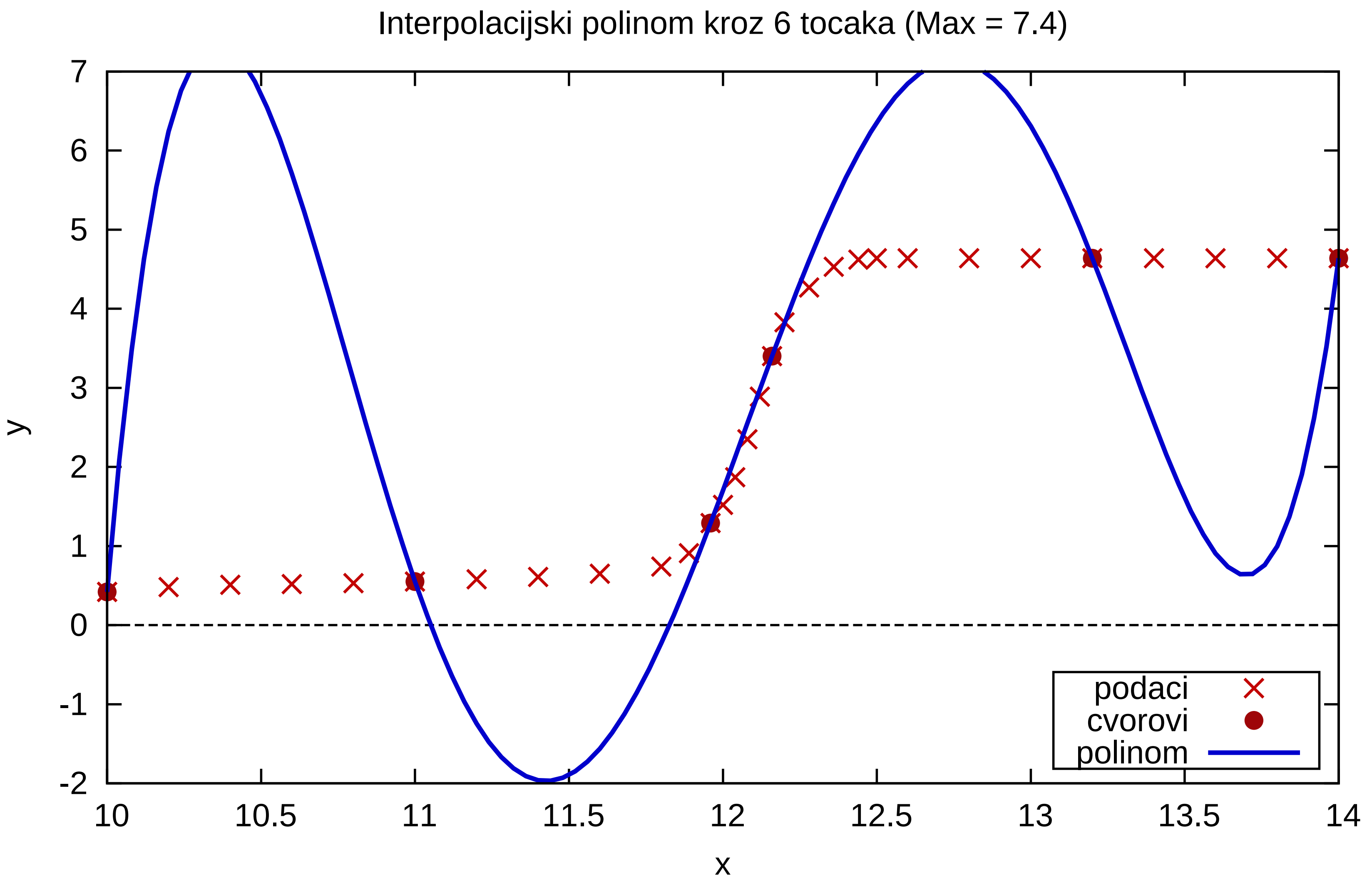
Korigirani eksperimentalno izmjereni podaci imaju 30 točaka:

k	x_k	y_k	k	x_k	y_k	k	x_k	y_k
1	10.00	0.42	11	11.89	0.91	21	12.44	4.62
2	10.20	0.48	12	11.96	1.29	22	12.50	4.64
3	10.40	0.51	13	12.00	1.52	23	12.60	4.64
4	10.60	0.52	14	12.04	1.87	24	12.80	4.64
5	10.80	0.53	15	12.08	2.35	25	13.00	4.64
6	11.00	0.55	16	12.12	2.89	26	13.20	4.64
7	11.20	0.58	17	12.16	3.40	27	13.40	4.64
8	11.40	0.61	18	12.20	3.83	28	13.60	4.64
9	11.60	0.65	19	12.28	4.27	29	13.80	4.64
10	11.80	0.74	20	12.36	4.53	30	14.00	4.64

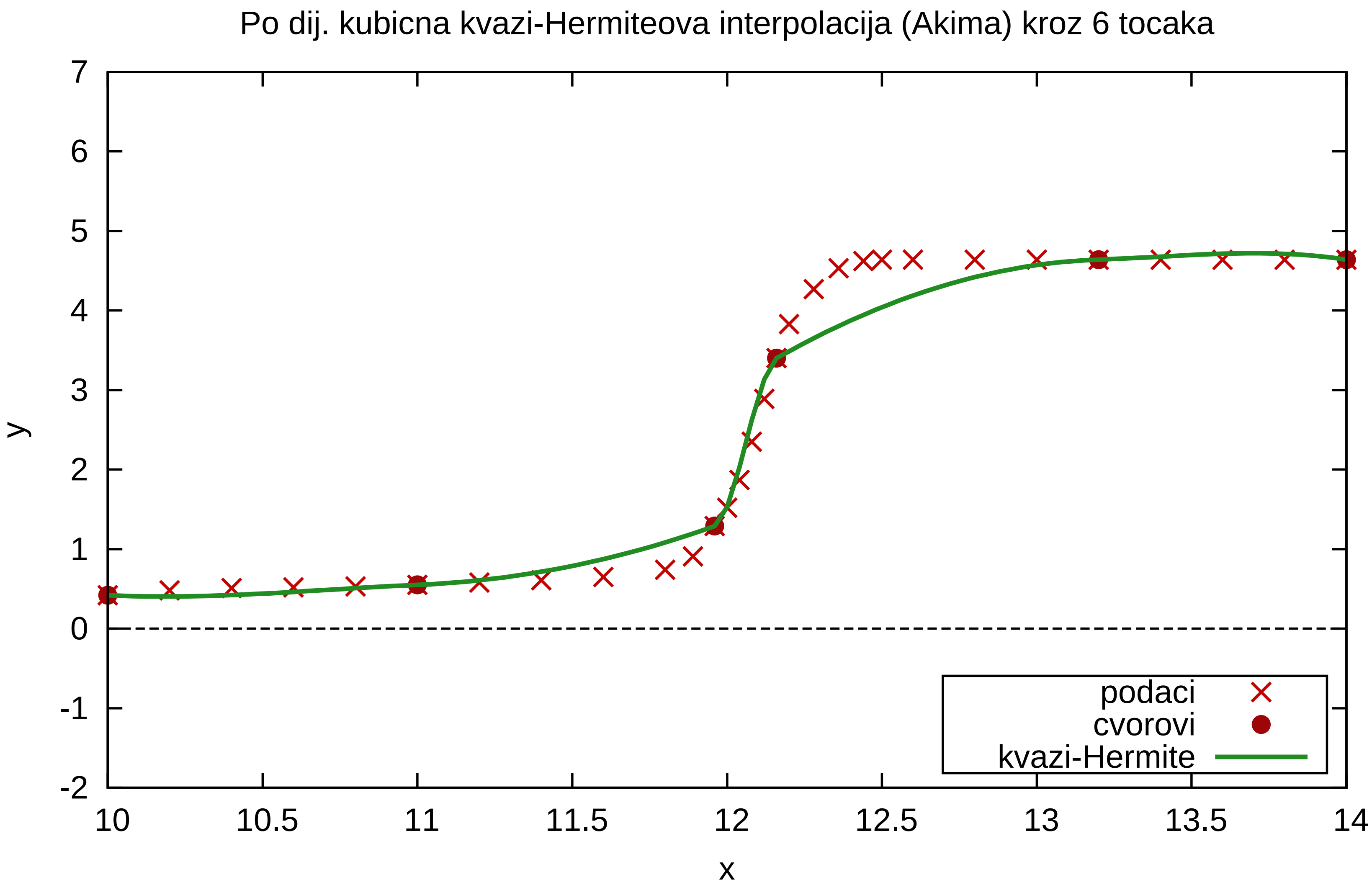
Korigirani (dopunjeni) izmjereni podaci



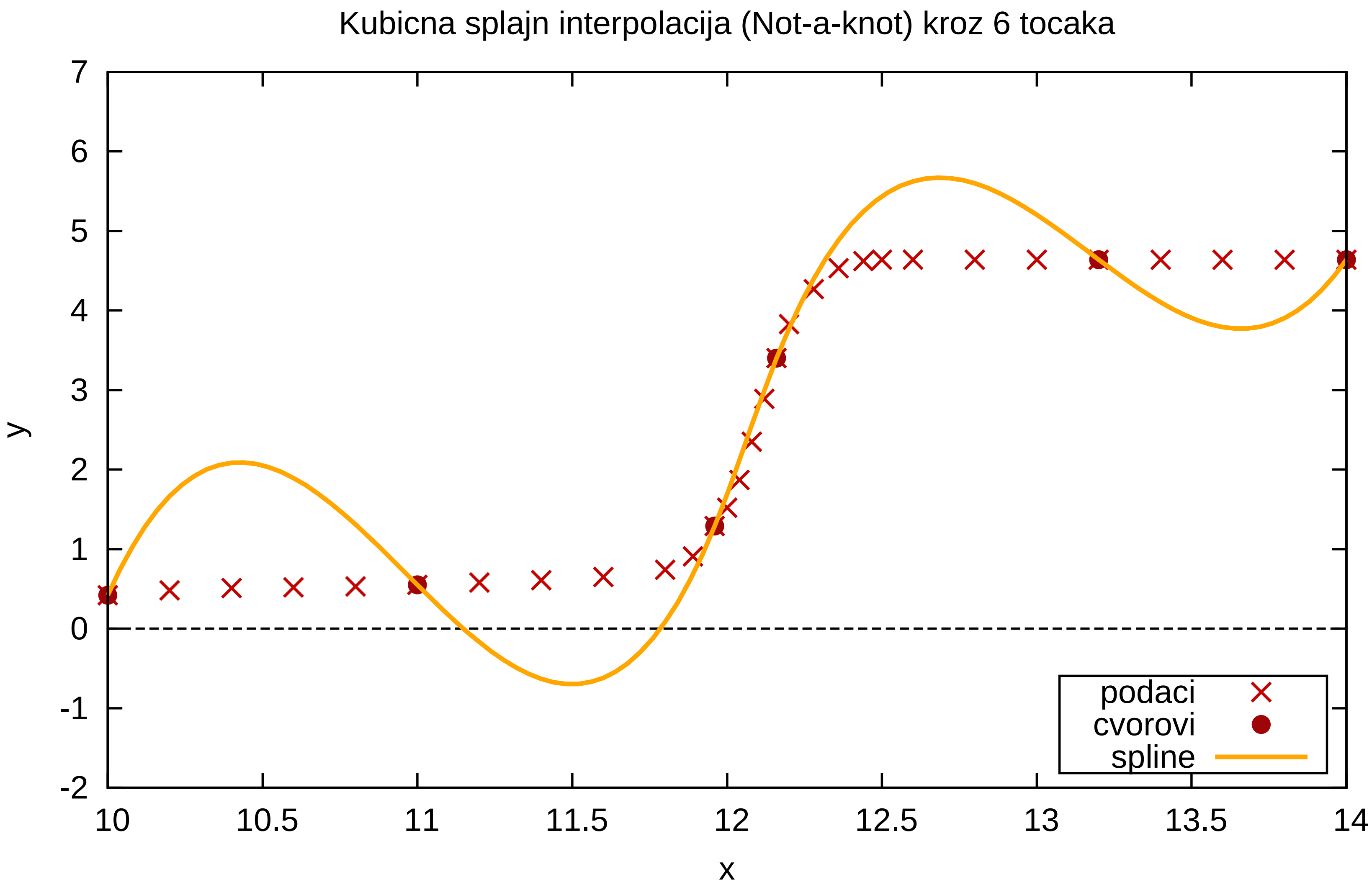
Polinom — 6 čvorova



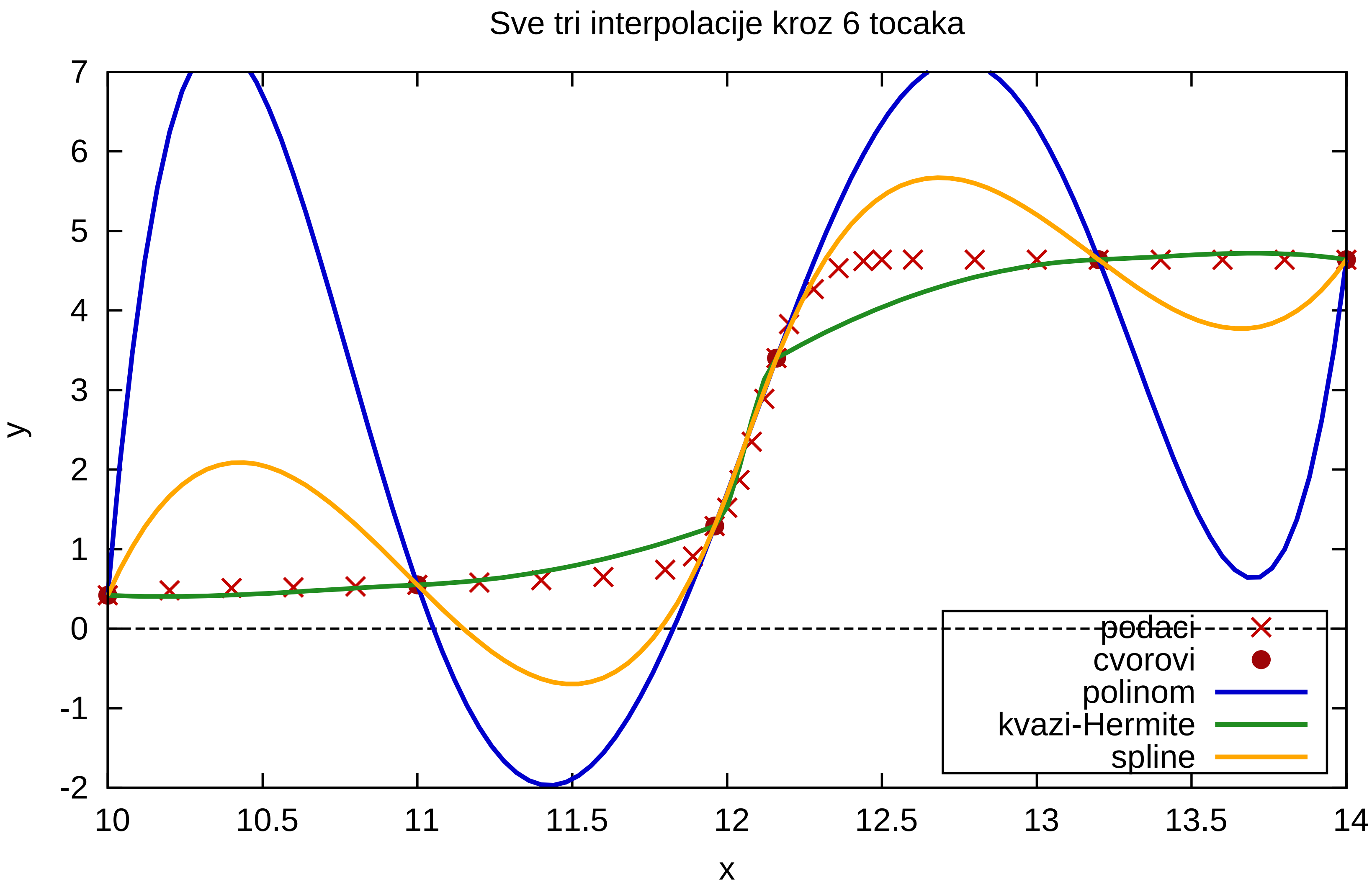
Akima — 6 čvorova



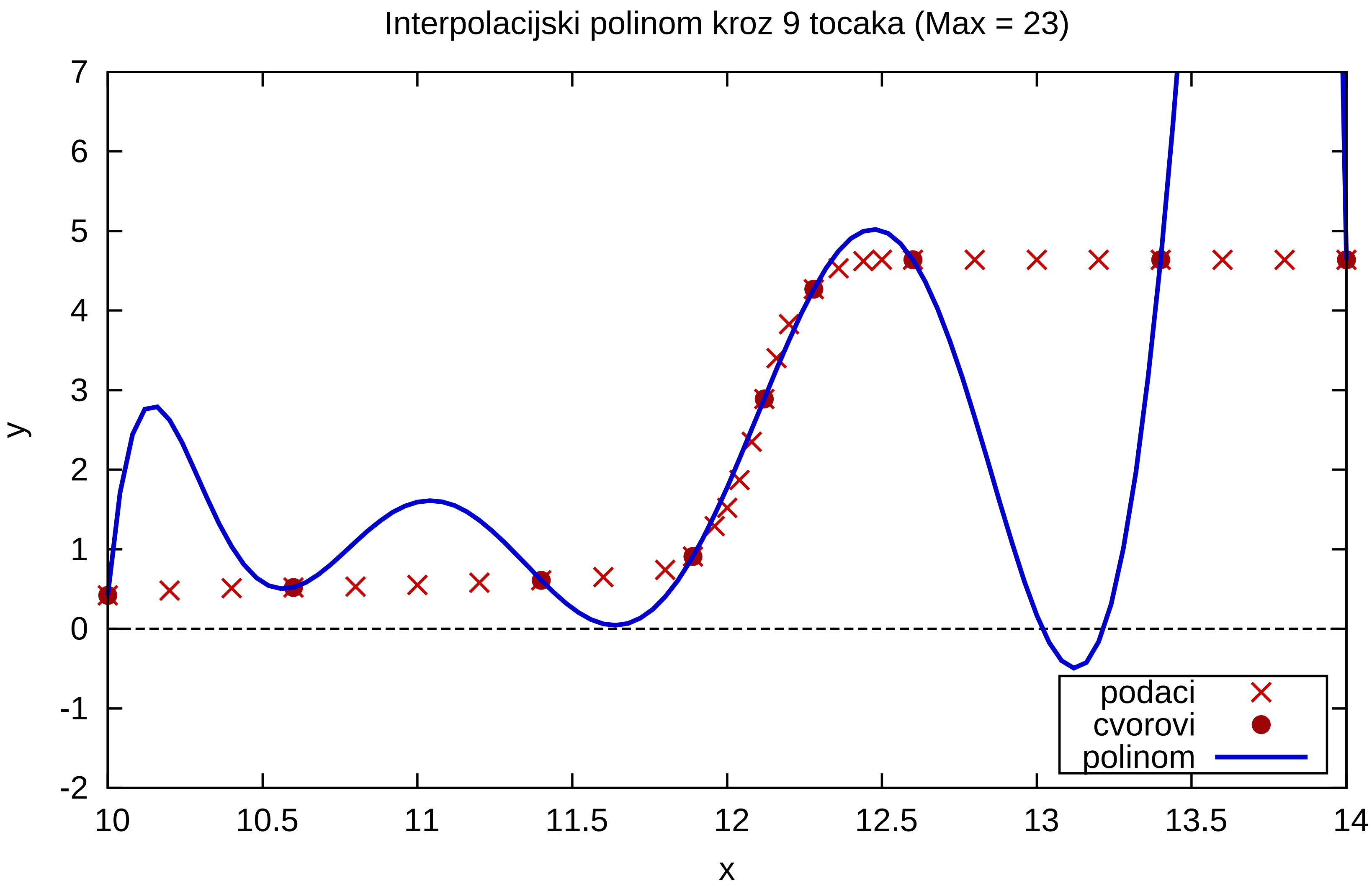
Kubični splajn — 6 čvorova



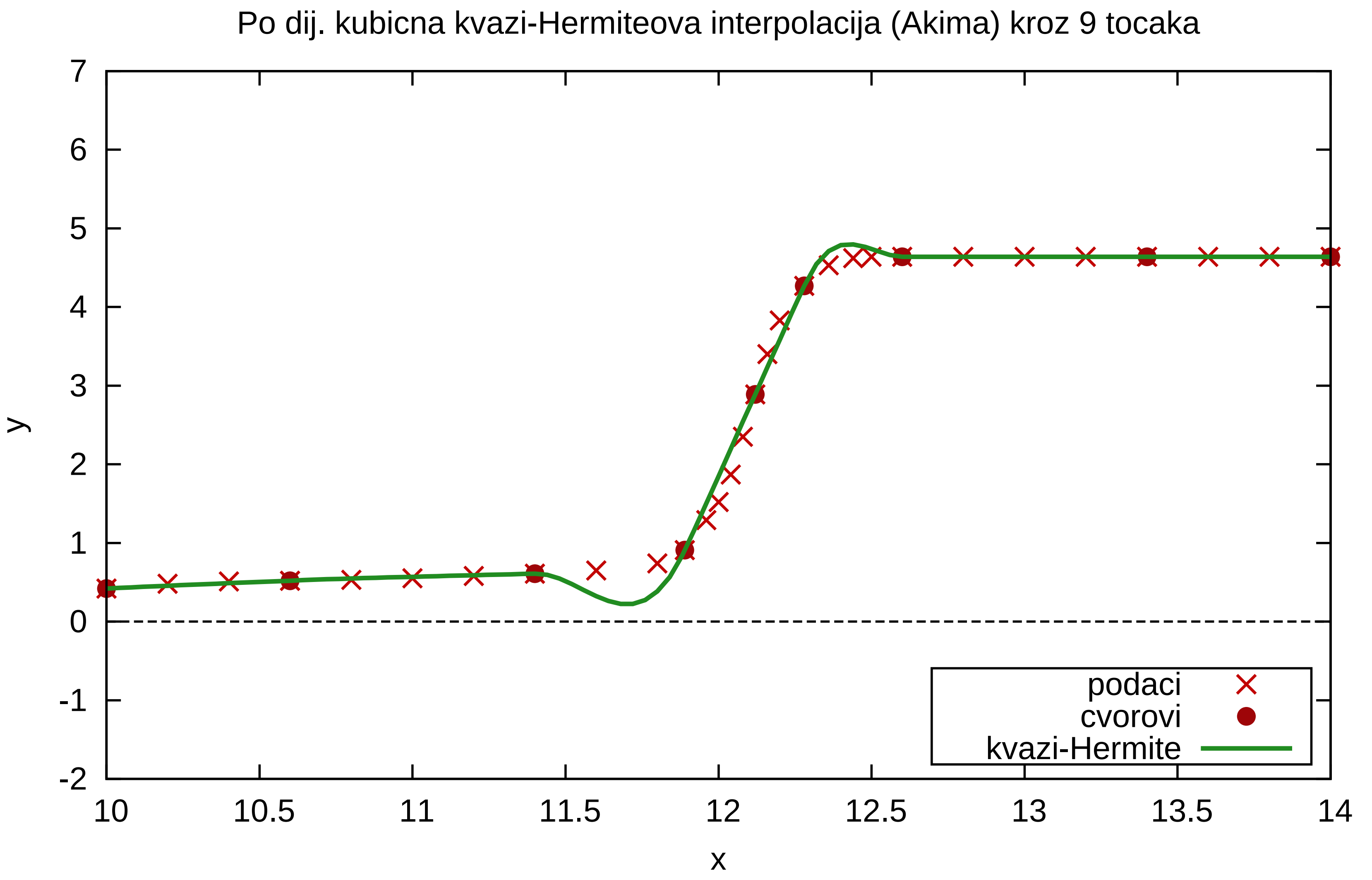
Sve tri interpolacije zajedno — 6 čvorova



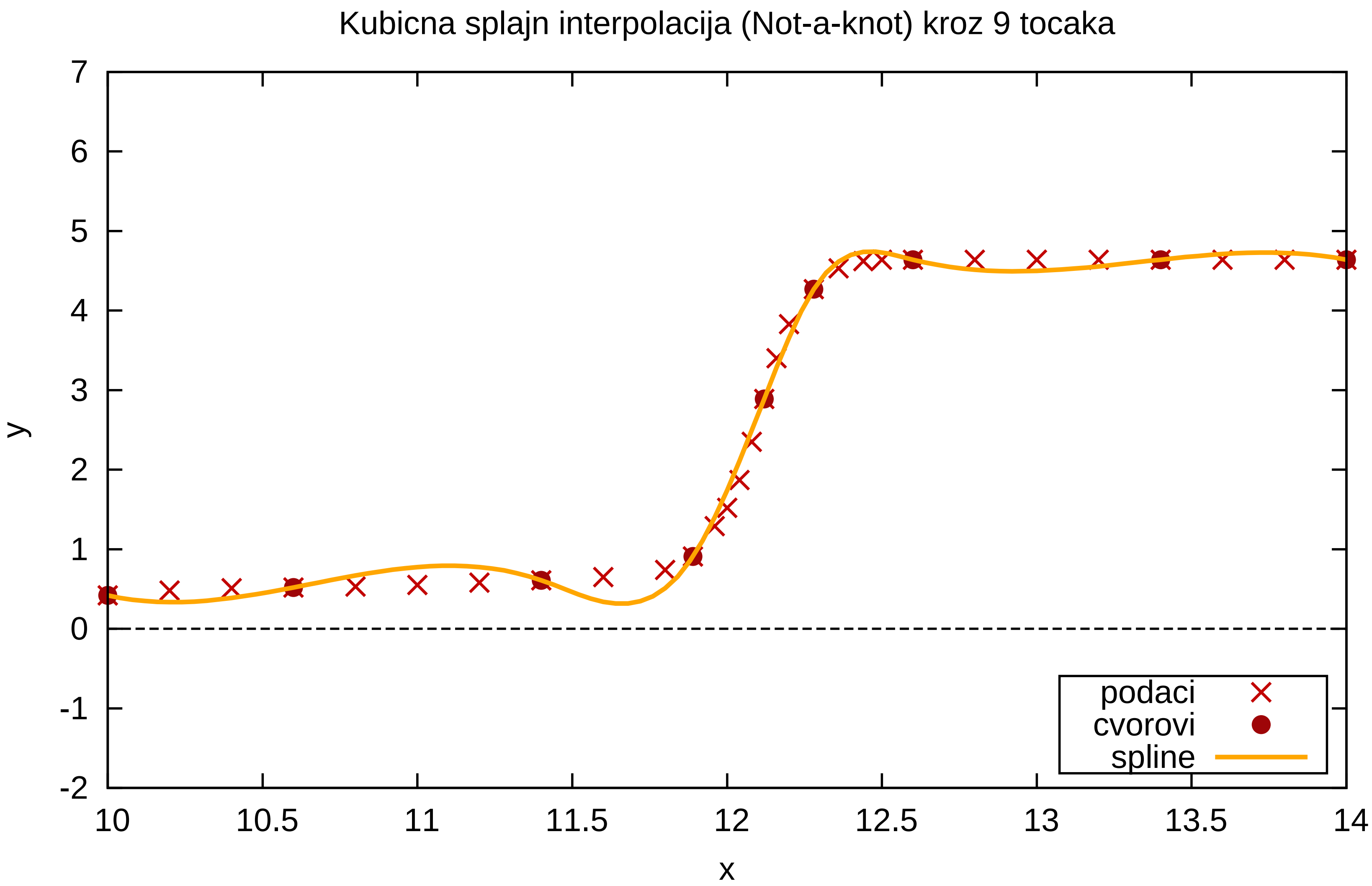
Polinom — 9 čvorova (lošije!)



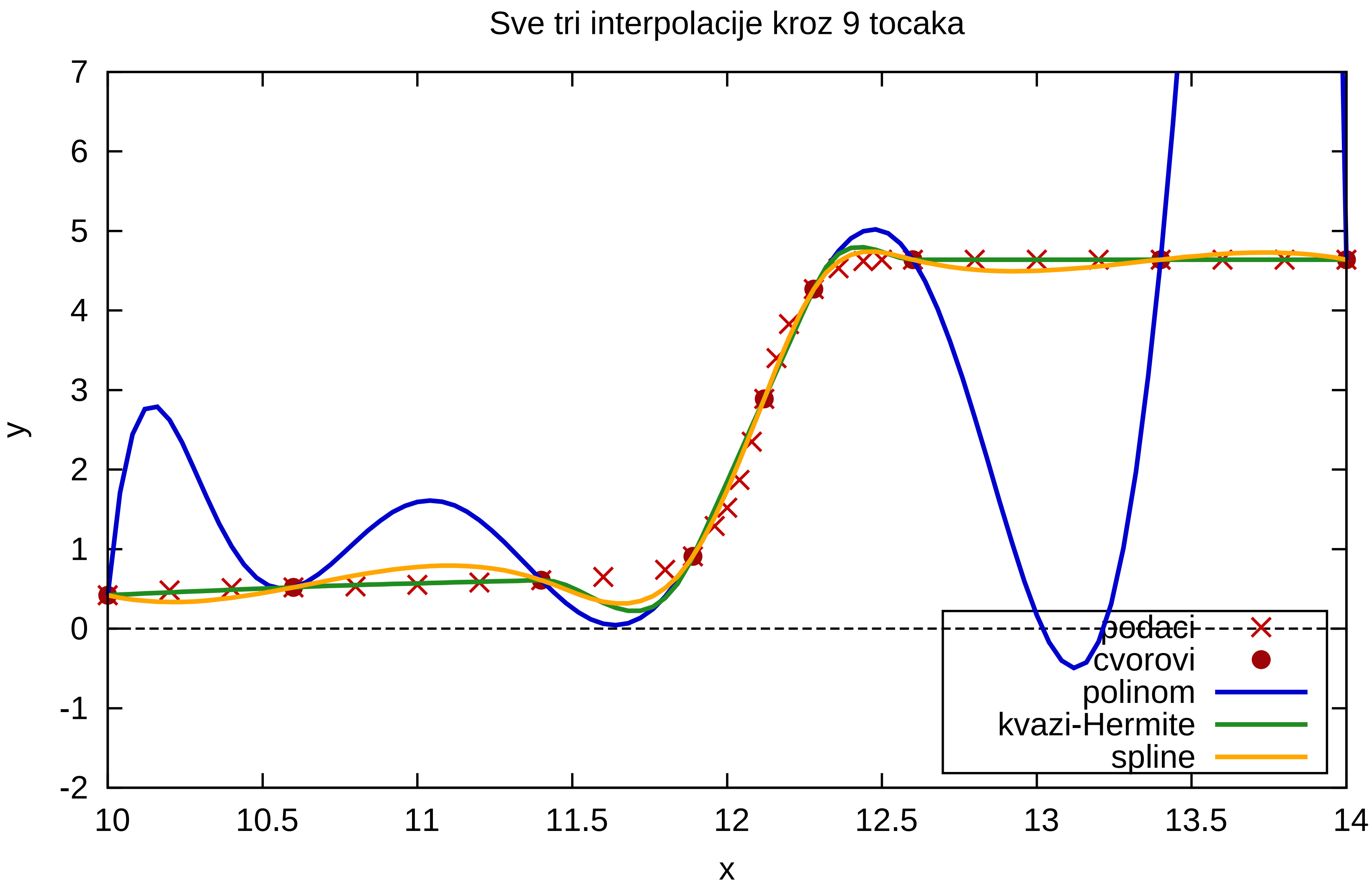
Akima — 9 čvorova



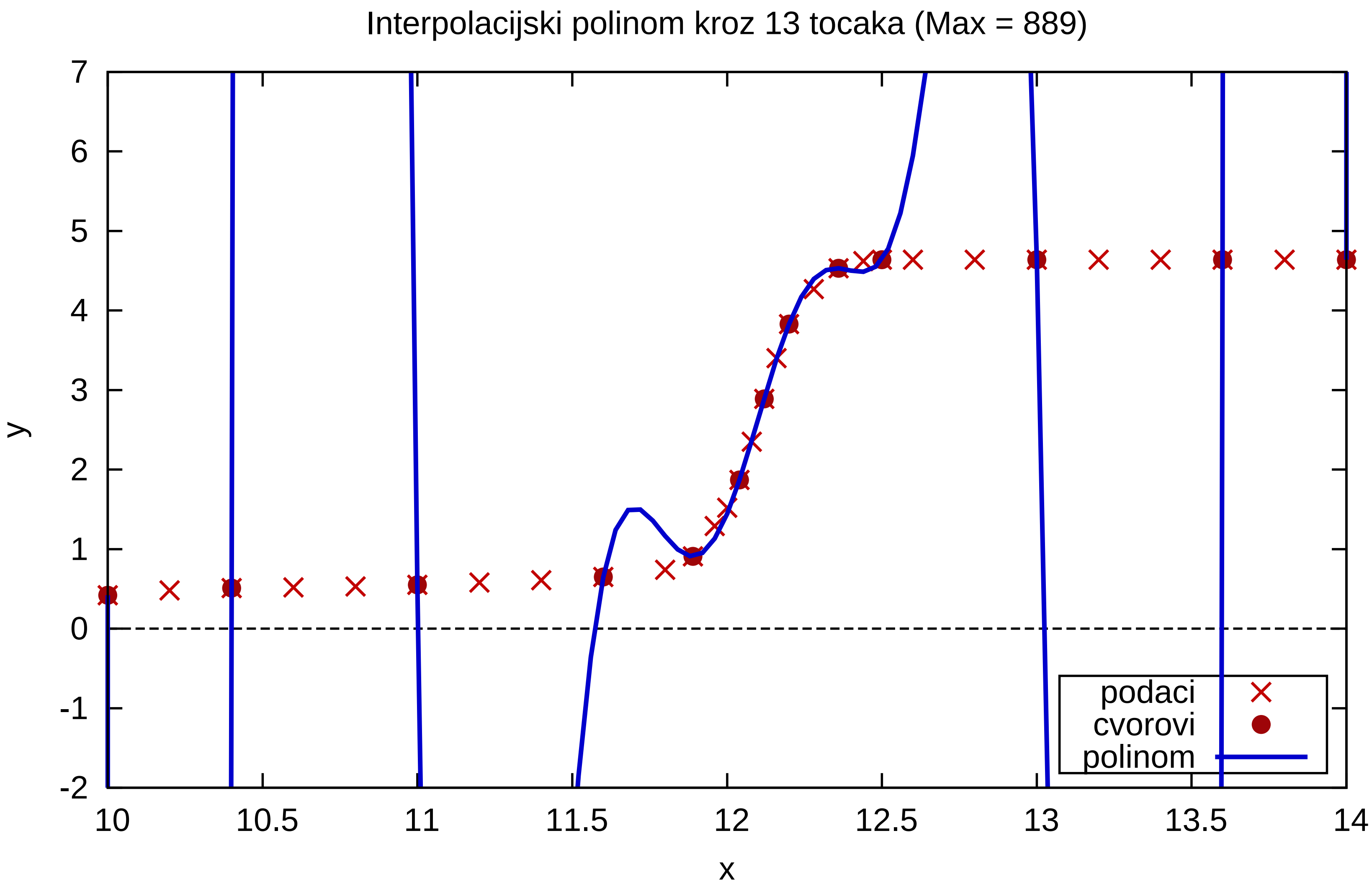
Kubični splajn — 9 čvorova



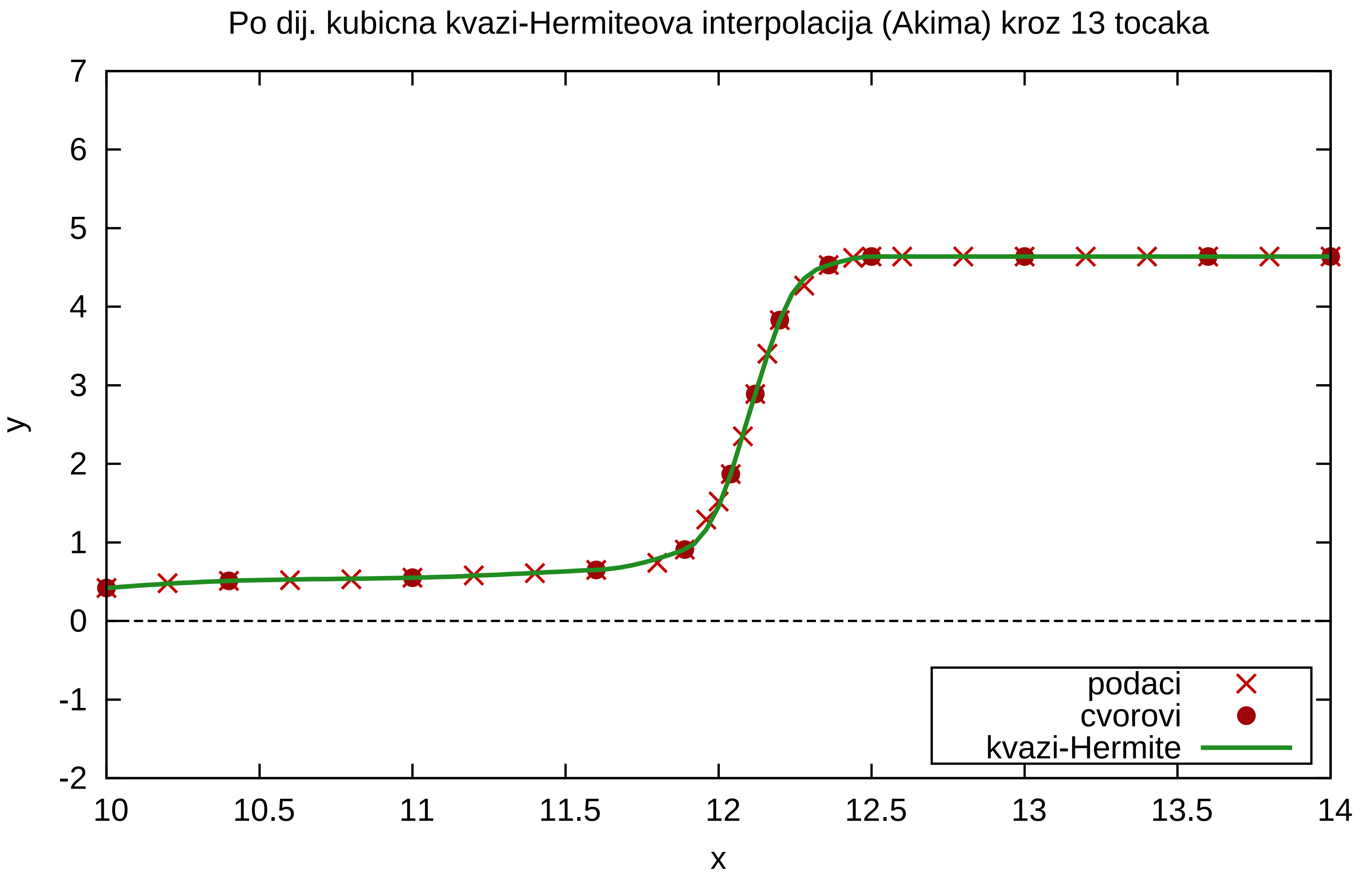
Sve tri interpolacije zajedno — 9 čvorova



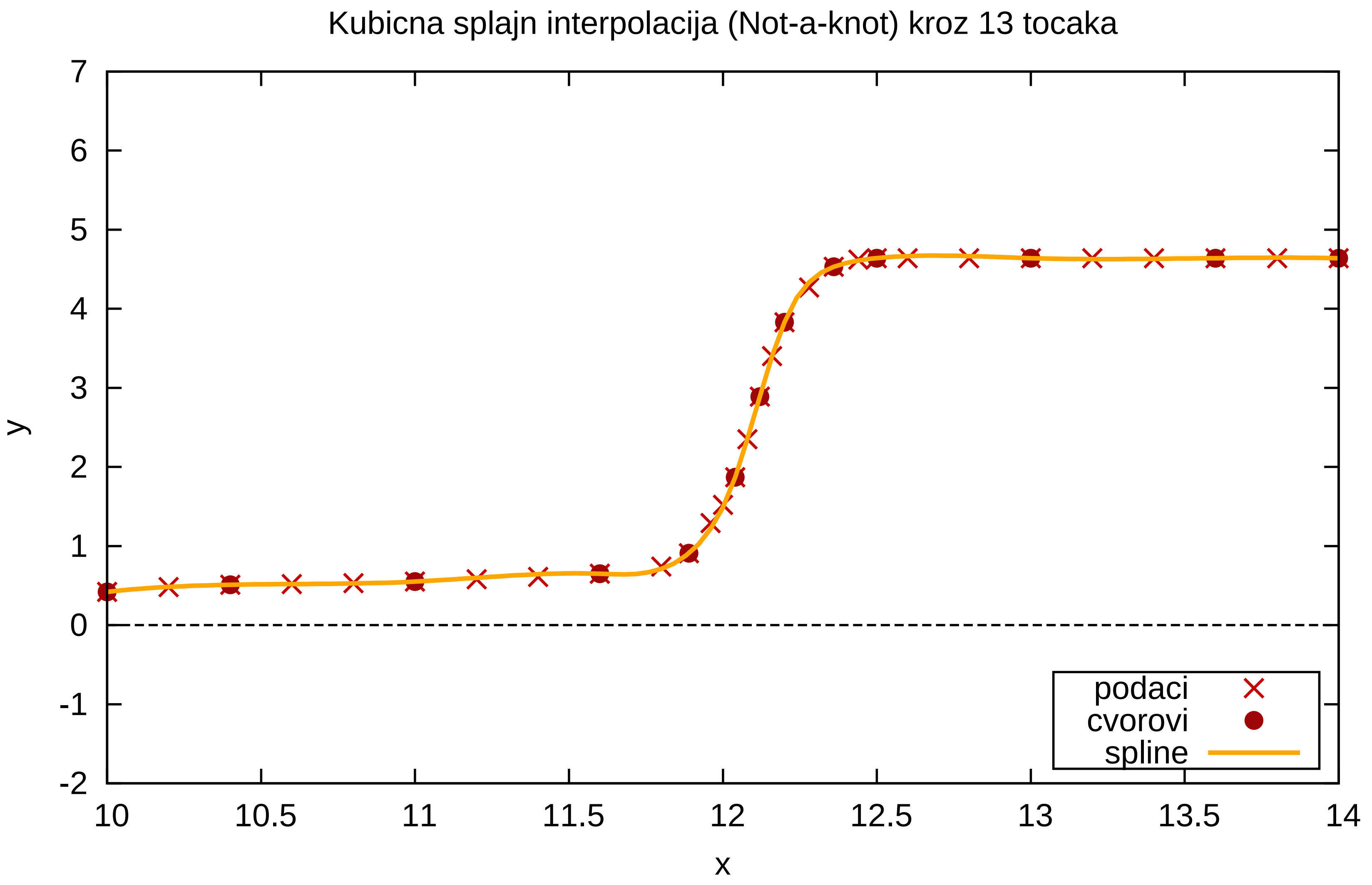
Polinom — 13 čvorova (još lošije!)



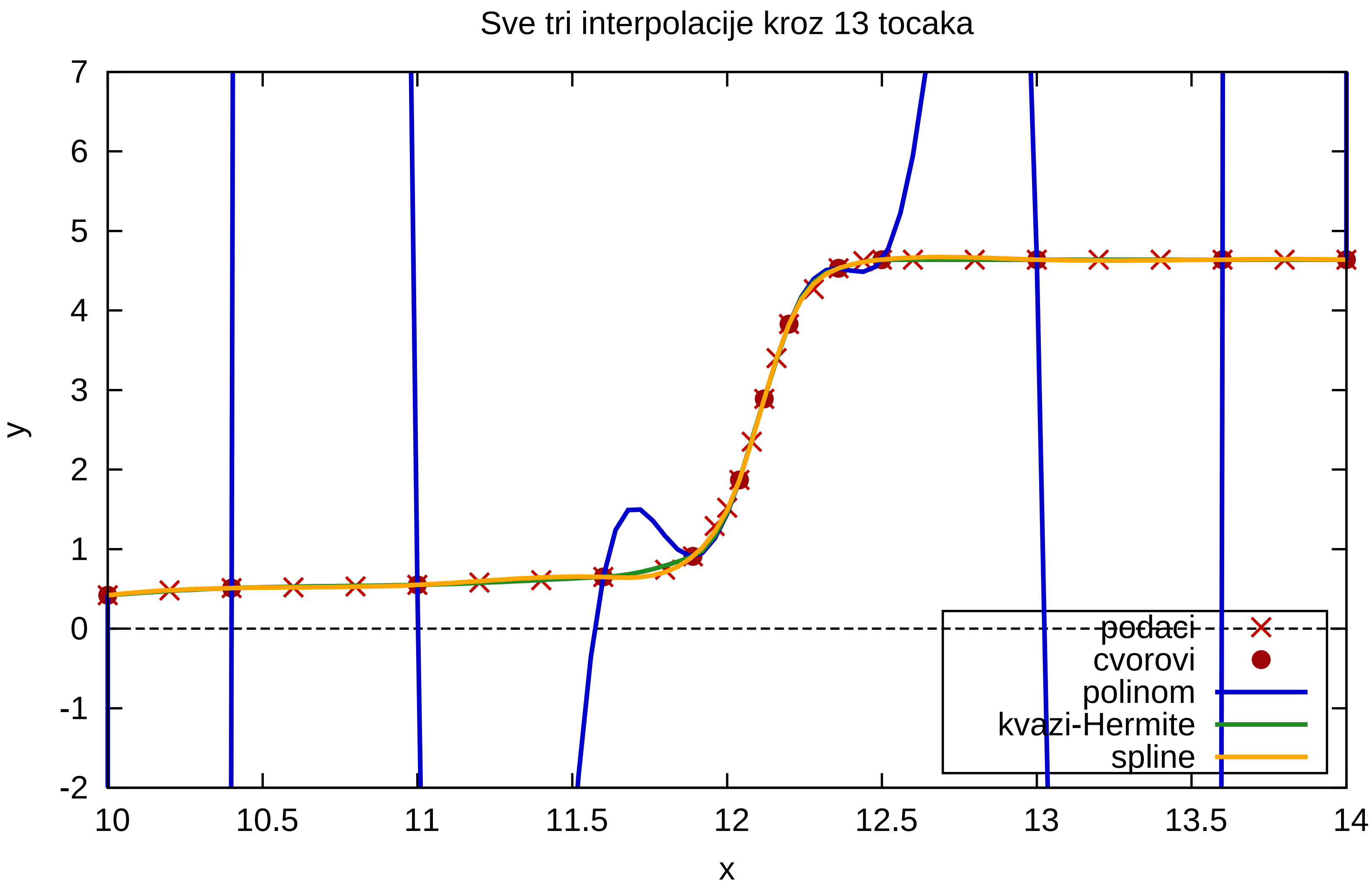
Akima — 13 čvorova



Kubični splajn — 13 čvorova



Sve tri interpolacije zajedno — 13 čvorova



Diskretni problem najmanjih kvadrata

Minimizacija 2*-norme vektora pogreške*

Neka je funkcija f

- zadana na diskretnom skupu točaka (čvorova) $x_0, \ldots, x_n$.

Uzmimo da točaka $x_0, \ldots, x_n$ ima mnogo više nego nepoznatih parametara $a_0, \ldots, a_m$ aproksimacijske funkcije φ, tj. $n \gg m$.

U diskretnoj metodi najmanjih kvadrata, aproksimacijska funkcija

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, \ldots, a_m)$$

određuje se tako da 2-norma vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije bude najmanja moguća, tj. minimizira se

$$S = \sum_{k=0}^{n} \big(f(x_k) - \varphi(x_k; a_0, \ldots, a_m)\big)^2 \to \min .$$

Sustav normalnih jednadžbi

Ovdje se S gleda kao funkcija nepoznatih parametara

$$S = S(a_0, \ldots, a_m) : \mathbb{R}^{m+1} \to \mathbb{R}.$$

Uočimo da uvijek vrijedi $S \geq 0$, bez obzira na to kakvi su parametri, jer se radi o zbroju kvadrata.

- Funkcija S se minimizira kao funkcija više varijabli $a_0, \ldots, a_m$.
- Pretpostavljamo da je S dovoljno glatka funkcija, kao funkcija parametara a_k, pa je nužni uvjet ekstrema

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \qquad k = 0, \ldots, m.$$

Ovaj pristup vodi na tzv. sustav normalnih jednadžbi.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Primjer. Zadane su točke $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, koje treba, po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata, aproksimirati pravcem

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x.$$

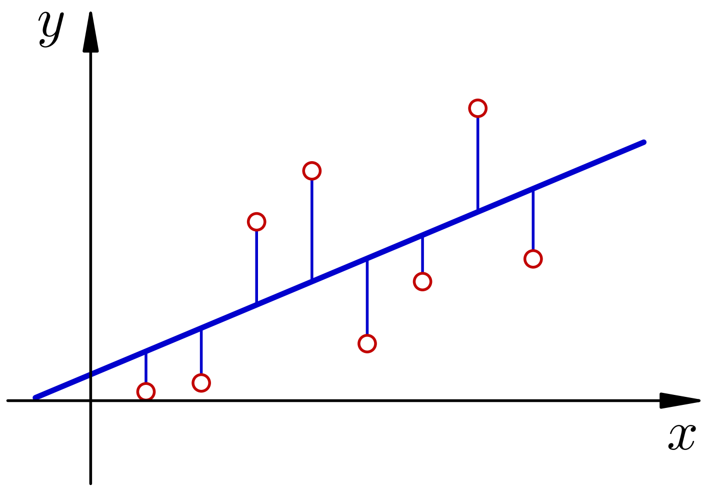
Suma kvadrata grešaka ove aproksimacije u čvorovima je (to je izraz kojeg minimiziramo)

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2$$

$$= \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika zadanih točaka u ravnini i pravca koji ih aproksimira:



Uočiti da se greška u svakoj točki "mjeri" u smjeru osi y, pa je

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Može se gledati i "okomita" udaljenost do pravca $\to$ problem "potpunih" najmanjih kvadrata (engl. "total least squares").

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Parcijalne derivacije po parametrima a_0 i a_1 su:

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k),$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k) x_k.$$

Dijeljenjem s -2 i sređivanjem po nepoznanicama a_0, a_1, dobivamo linearni sustav

$$a_0 (n+1) + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k = \sum_{k=0}^{n} f_k$$

$$a_0 \sum_{k=0}^{n} x_k + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k^2 = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k.$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Uvedemo li standardne skraćene oznake

$$s_\ell = \sum_{k=0}^{n} x_k^\ell, \quad t_\ell = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k^\ell, \quad \ell \geq 0,$$

onda linearni sustav možemo napisati kao

$$\begin{aligned} s_0 a_0 + s_1 a_1 &= t_0 \\ s_1 a_0 + s_2 a_1 &= t_1. \end{aligned}$$

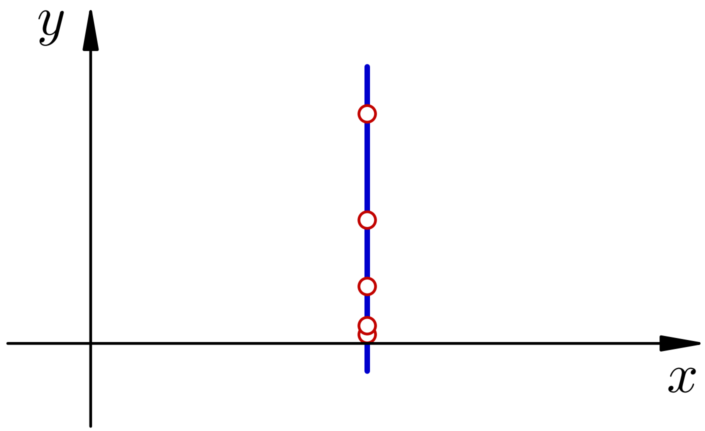
Matrica ovog sustava je regularna, uz uvjet da imamo barem dvije različite točke x_k. To je ekvivalentno (Gramova matrica) linearnoj nezavisnosti vektora

$$(1, 1, \ldots, 1)^T \quad \text{i} \quad (x_0, x_1, \ldots, x_n)^T.$$

U tom slučaju, postoji jedinstveno rješenje sustava.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika situacije u kojoj problem najmanjih kvadrata za pravac nema rješenja, s tim da je $n \geq m = 1$, tj. imamo barem dvije točke podataka:



Ako imamo više različitih podataka u jednoj jedinoj točki x_0,

- aproksimacijski pravac (očito) postoji i jedinstven je,
- ali je okomit na x-os (jednadžba je $x = x_0$),
- pa njegova jednadžba nema oblik $y = a_0 + a_1 x$.

Minimalnost rješenja?

Je li dobiveno rješenje zaista minimum?

- To nije teško pokazati, korištenjem drugih parcijalnih derivacija — dovoljan uvjet minimuma je pozitivna definitnost Hesseove matrice (v. kasnije, za opći slučaj).

Provjera je li to minimum, može i puno lakše, jer se radi o zbroju kvadrata. Onda,

- S predstavlja paraboloid s otvorom prema gore, u varijablama a_0, a_1, tj. nad (a_0, a_1)-ravninom,
- pa je očito da takav paraboloid ima minimum.

Zbog toga se nikad ni ne provjerava je li dobiveno rješenje minimum za S.

Najmanji kvadrati za polinome

Za funkciju φ mogli bismo uzeti i polinom višeg stupnja,

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m.$$

Međutim, tu postoji opasnost — za malo veće m $(m \approx 10)$

- dobiveni sustav je (skoro sigurno) vrlo loše uvjetovan,
- pa dobiveni rezultati mogu biti jako pogrešni.

U praksi se to nikada direktno ne radi (na ovaj način), čim je $m \geq 2, 3$.

Ako se koriste aproksimacije polinomima viših stupnjeva,

- onda se to radi korištenjem tzv. ortogonalnih polinoma (vidjeti kasnije).

Najmanji kvadrati za opće linearne funkcije

Linearni model diskretnih najmanjih kvadrata je potpuno primjenjiv na opću linearnu funkciju

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x),$$

gdje su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ poznate (zadane) funkcije.

Zadatak. Zadane su točke $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, koje treba, po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata, aproksimirati funkcijom oblika

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x).$$

Rješenje. Ide sasvim analogno (pogledati u skripti).

Što s nelinearnim funkcijama?

Što ako φ nelinearno ovisi o parametrima?

- Dobivamo nelinearni sustav jednadžbi, koji se relativno teško rješava.
- Problem postaje ozbiljan optimizacijski problem, koji se može približno rješavati.
- Metode koje se najčešće koriste su metode pretraživanja ili Levenberg–Marquardt metoda.

Postoji i drugi pristup.

- Katkad se jednostavnim transformacijama problem može transformirati u linearni problem najmanjih kvadrata.
- Rješenja lineariziranog i nelinearnog problema nisu jednaka, jer je i greška (nelinearno) transformirana!

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Primjer. Zadane su točke $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, koje, po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata, treba aproksimirati funkcijom oblika

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x}.$$

Uočite da φ nelinearno ovisi o parametru a_1.

Direktni pristup problemu vodi na minimizaciju

$$\begin{aligned} S = S(a_0, a_1) &= \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k})^2 \to \min . \end{aligned}$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Parcijalnim deriviranjem po varijablama a_0 i a_1 dobivamo

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k})\, e^{a_1 x_k},$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k}) a_0\, x_k e^{a_1 x_k}.$$

To je nelinearan sustav jednadžbi, kojeg ne znamo riješiti!

S druge strane, ako logaritmiramo relaciju

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x},$$

dobivamo

$$\ln \varphi(x) = \ln(a_0) + a_1 x.$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Moramo logaritmirati još i zadane vrijednosti funkcije f u točkama x_k. Uz supstitucije

$$h(x) = \ln f(x), \quad h_k = h(x_k) = \ln f_k, \quad k = 0, \ldots, n,$$

i

$$\psi(x) = \ln \varphi(x) = b_0 + b_1 x,$$

gdje je

$$b_0 = \ln a_0, \quad b_1 = a_1,$$

dobivamo linearni problem najmanjih kvadrata

$$\begin{aligned} \widetilde{S} = \widetilde{S}(b_0, b_1) &= \sum_{k=0}^{n} (h_k - \psi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^{n} (h_k - b_0 - b_1 x_k)^2 \to \min . \end{aligned}$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Grafički, to je pravac u tzv. lin–log skali. Iz rješenja b_0 i b_1, lako izlaze a_0 i a_1

$$a_0 = e^{b_0}, \quad a_1 = b_1.$$

Napomene uz linearizaciju:

- Pri linearizaciji smo pretpostavili da je $f_k > 0$, da bismo mogli logaritmirati.
- Ovako dobiveno rješenje uvijek daje pozitivan a_0, tj. linearizirani $\varphi(x)$ će uvijek biti veći od 0.
- Kad su neki $f_k \leq 0$, korištenjem translacije svih podataka treba dobiti $f_k + \text{translacija} > 0$, pa onda linearizirati.
- Pokušajte korektno formulirati takvu linearizaciju!
- Ako su svi $f_k < 0$, onda napravimo supstituciju $f \mapsto -f$.

Tipične linearizacije — opća potencija

Kratki pregled nekih funkcija koje se često koriste i njihovih standardnih linearizacija u problemu najmanjih kvadrata.

(a) Funkcija

$$\varphi(x) = a_0 x^{a_1}$$

linearizira se logaritmiranjem (u nekoj izabranoj bazi)

$$\psi(x) = \log \varphi(x) = \log(a_0) + a_1 \log x,$$

$$h_k = \log f_k, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Uvedimo oznake

$$b_0 = \log(a_0), \quad b_1 = a_1.$$

Tipične linearizacije — opća potencija

Linearizirani problem najmanjih kvadrata glasi

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(b_0, b_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - b_0 - b_1 \log(x_k))^2 \to \min,$$

Grafički, to odgovara pravcu u tzv. log–log skali.

U ovom slučaju, da bismo mogli provesti linearizaciju,

- mora biti i $x_k > 0$ i $f_k > 0$.

Tipične linearizacije — 1 / linearna funkcija

(b) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$$

linearizira se na sljedeći način

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x,$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

(c) Funkciju

$$\varphi(x) = \frac{x}{a_0 + a_1 x}$$

možemo linearizirati na više načina.

1. način:

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 \, \frac{1}{x} + a_1,$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 \, \frac{1}{x_k} - a_1)^2 \to \min\,.$$

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

2. način:

$$\psi(x) = \frac{x}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x,$$

$$h_k = \frac{x_k}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Tipične linearizacije — još jedan primjer

(d) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}}$$

linearizira se stavljanjem

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 e^{-x},$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 - a_1 e^{-x_k})^2 \to \min .$$

Primjer

Primjer. Uvaženi znanstvenik dr. Zurić, Ulica astronoma 69, dobio je ideju da se Zemlja giba oko Sunca po eliptičnoj orbiti, sa Suncem u jednom fokusu.

Nakon niza opažanja i mjerenja (uz dosta računa), dobio je slijedeće podatke

x [°]	0	45	90	135	180
r [10^6 km]	147	148	150	151	152

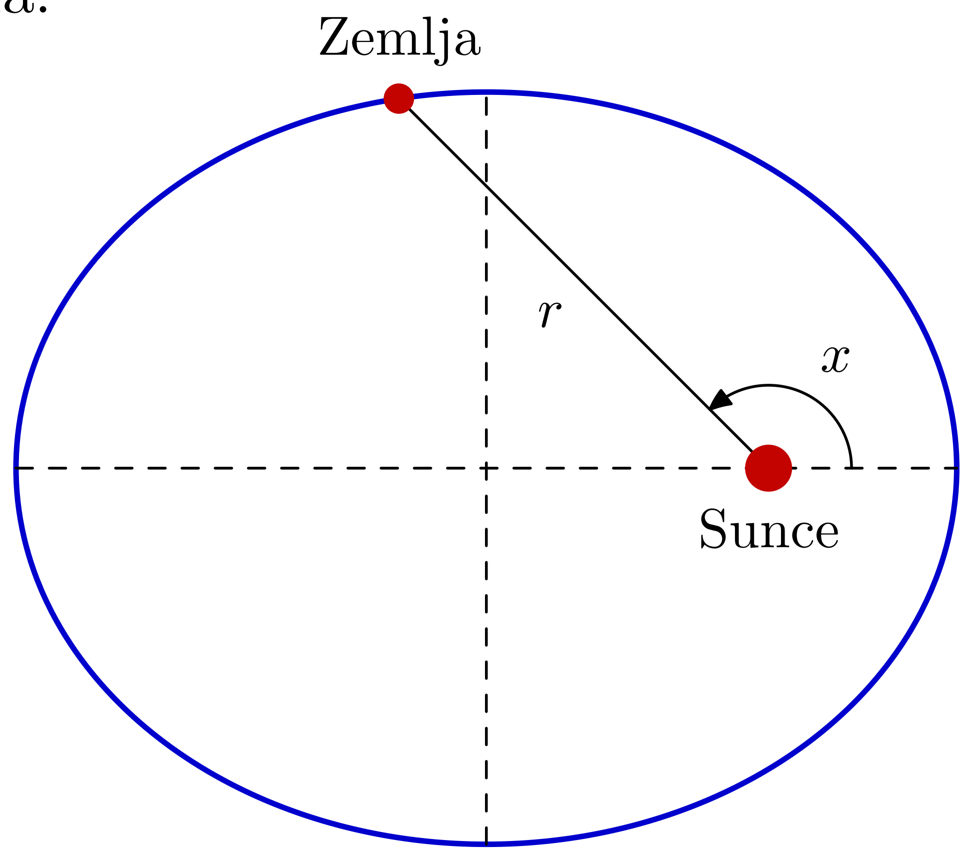
,

u kojima je

- r udaljenost od Zemlje do Sunca (u 10^6 km),
- a x je kut između spojnice Zemlja–Sunce i glavne osi elipse (u stupnjevima). [radijani $= \pi \cdot$ stupnjevi$/180$]!

Zemlja na elipsi oko Sunca

Skica problema:



Podsjetnik: Ako elipsa ima veliku os a i malu os b, onda je $e = \sqrt{a^2 - b^2}$ i $\varepsilon = e/a$.

Primjer (nastavak)

Dr. Zurić, naravno, zna da se elipsa može opisati jednadžbom

$$r(x) = \frac{\rho}{1 + \varepsilon \cos x},$$

gdje je ε ekscentricitet elipse, a ρ je tzv. “srednja” udaljenost elipse od fokusa.

Pomognite mu da nađe ρ i ε, diskretnom linearnom metodom najmanjih kvadrata, nakon preuređenja ove jednadžbe.

Rješenje. Pomnožimo jednadžbu s nazivnikom funkcije, pa dobivamo

$$r(1 + \varepsilon \cos x) = \rho,$$

odnosno,

$$-\varepsilon\, r \cos x + \rho = r.$$

Primjer (nastavak)

Relaciju $-\varepsilon\, r \cos x + \rho = r$ gledamo kao funkciju oblika

$$au + b = v,$$

gdje je

$$u = r \cos x, \quad v = r, \quad a = -\varepsilon, \quad b = \rho.$$

Zatim se primijeni linearna metoda najmanjih kvadrata za pravac, s nepoznatim koeficijentima a i b.

Prema tome, treba minimizirati

$$S = \sum_{i=0}^{4} (v_i - a u_i - b)^2 \to \min .$$

Primjer (nastavak)

Deriviranjem izlazi

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=0}^{4} (v_i - a u_i - b) u_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=0}^{4} (v_i - a u_i - b) = 0.$$

Nakon sređivanja, uz $n + 1 = 5$, dobivamo linearni sustav

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{4} u_i^2 & \sum_{i=0}^{4} u_i \\ \sum_{i=0}^{4} u_i & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{4} u_i v_i \\ \sum_{i=0}^{4} v_i \end{bmatrix}.$$

Primjer (nastavak)

Kad se radi “na ruke”, traženi podaci se obično slože u tablicu

i	$v_i = r_i$	$u_i = r_i \cos x_i$	u_i^2	$u_i v_i$
0	147	147	21609	21609
1	148	104.6518036	10952	15488.46693
2	150	0	0	0
3	151	−106.7731240	11400.5	−16122.74172
4	152	−152	23104	−23104
$\sum$	748	−7.1213204	67065.5	−2129.27479

Brojevi na dnu tablice su poznati elementi linearnog sustava.

Primjer (nastavak)

Linearni sustav za nepoznate koeficijente je

$$\begin{bmatrix} 67065.5 & -7.1213204 \\ -7.1213204 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2129.27479 \\ 748 \end{bmatrix}.$$

Rješenje tog sustava je

$$a = -1.58663722 \cdot 10^{-2}, \quad b = 149.5774021,$$

pa je

$$\varepsilon = 1.58663722 \cdot 10^{-2}, \quad \rho = 149.5774021.$$

Ove vrijednosti su vrlo blizu pravih, kad se sjetimo značenja:

- ε je ekscentricitet Zemljine orbite,
- ρ je "srednja" udaljenost od Zemlje do Sunca.

Izbor aproksimacijske funkcije

Kad smo jednom odabrali oblik aproksimacijske funkcije pitamo se — jesmo li dobro izabrali njezin oblik?

Kad nađemo aproksimaciju, moramo pogledati graf pogreške.

- Ako on "jednoliko" oscilira oko nule, i
- te oscilacije izgledaju kao "slučajne", a ne "sistematske",

onda je aproksimacijska funkcija dobro odabrana.

Bitno: Metoda najmanjih kvadrata uklanja slučajne greške (recimo, kod mjerenja). To joj je osnovna svrha u statistici!

- Postoji tzv. Gauss–Markovljev teorem koji opravdava metodu najmanjih kvadrata.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Primjer. Eksperimentalni podaci uzeti su tako da se egzaktne y-koordinate točaka na pravcu

$$y(x) = 4x + 3$$

za $x = 0, 1, \ldots, 100$, perturbiraju za

- uniformno distribuirani slučajni broj, između -1 i 1.

Tako se dobiju početni podaci (x_i, f_i), gdje je $x_i = i$, a

$$f_i = 4x_i + 3 + (\text{slučajna perturbacija između } -1 \text{ i } 1),$$

za $i = 0, \ldots, 100$.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Prvih nekoliko podataka izgleda ovako:

x_i	$y(x_i)$	f_i
0	3	3.48175795724697 3
1	7	7.90598744987789 0
2	11	11.93107009769001 5
3	15	15.49513187608454 9
4	19	18.68144135301999 8
5	23	22.98482020710819 4

Kad se metodom najmanjih kvadrata za pravac $\varphi(x) = ax + b$ izračunaju parametri, dobijemo

$$a = 3.99598, \quad b = 3.20791.$$

Primjer uklanjanja slučajne greške

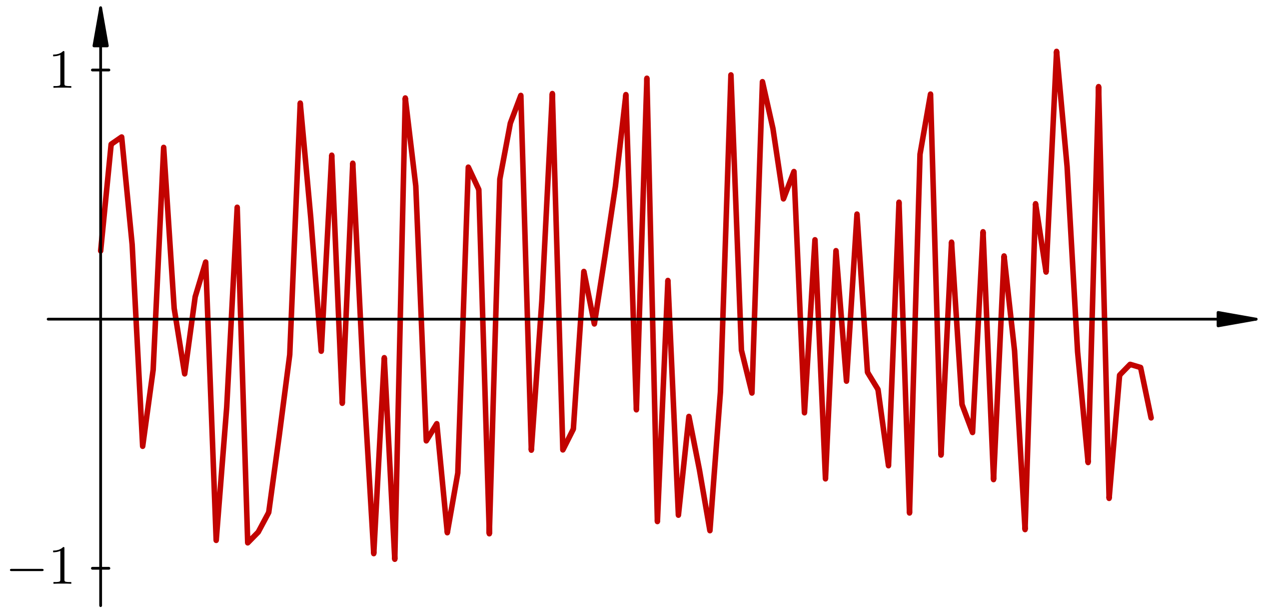
Pogledajmo što su aproksimacije $\varphi(x_i)$ za vrijednosti f_i u prvih nekoliko podataka:

x_i	$y(x_i)$	$\varphi(x_i)$
0	3	3.207905163100534
1	7	7.203881519200112
2	11	11.199857875299690
3	15	15.195834231399269
4	19	19.191810587498847
5	23	23.187786943598425

Uočite da su greške $\varphi(x_i)$ obzirom na $y(x_i)$ znatno manje nego polazne greške f_i obzirom na $y(x_i)$.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Pogledajmo kako se ponaša greška $f_i - \varphi(x_i)$ u svim točkama.



Greška izgleda skoro kao slučajna uniformna funkcija između -1 i 1, što znači da smo uklonili slučajnu grešku.

Krivac za "skoro" = "slučajni" brojevi imaju sistematsku grešku na početku (uglavnom su > 0) i zato je b prevelik!

Demo primjeri

Diskretnom metodom najmanjih kvadrata aproksimiraju se

- izmjereni podaci za viskoznost 40% etilnog alkohola, u ovisnosti o temperaturi.

Primjer pokazuje način izbora aproksimacijske funkcije i

- različita rješenja, ako problem lineariziramo, ili ako ga ne lineariziramo
(rješenja nelinearnih problema = Nelder–Mead metoda).

- `NM\07_F\07_GPT\MLS_ETIL\00_etil.plt`

Cijeli demo je na sljedećim stranicama.

Primjer izbora funkcije — etil

Demo primjer — viskoznost “votke”

Promatramo kako ovisi

- viskoznost 40% etilnog alkohola o temperaturi.

Treba naći:

- “zgodan” oblik aproksimacijske funkcije i
- parametre za dobru aproksimaciju.

Za aproksimaciju koristimo metodu najmanjih kvadrata.

Ovaj primjer pokazuje:

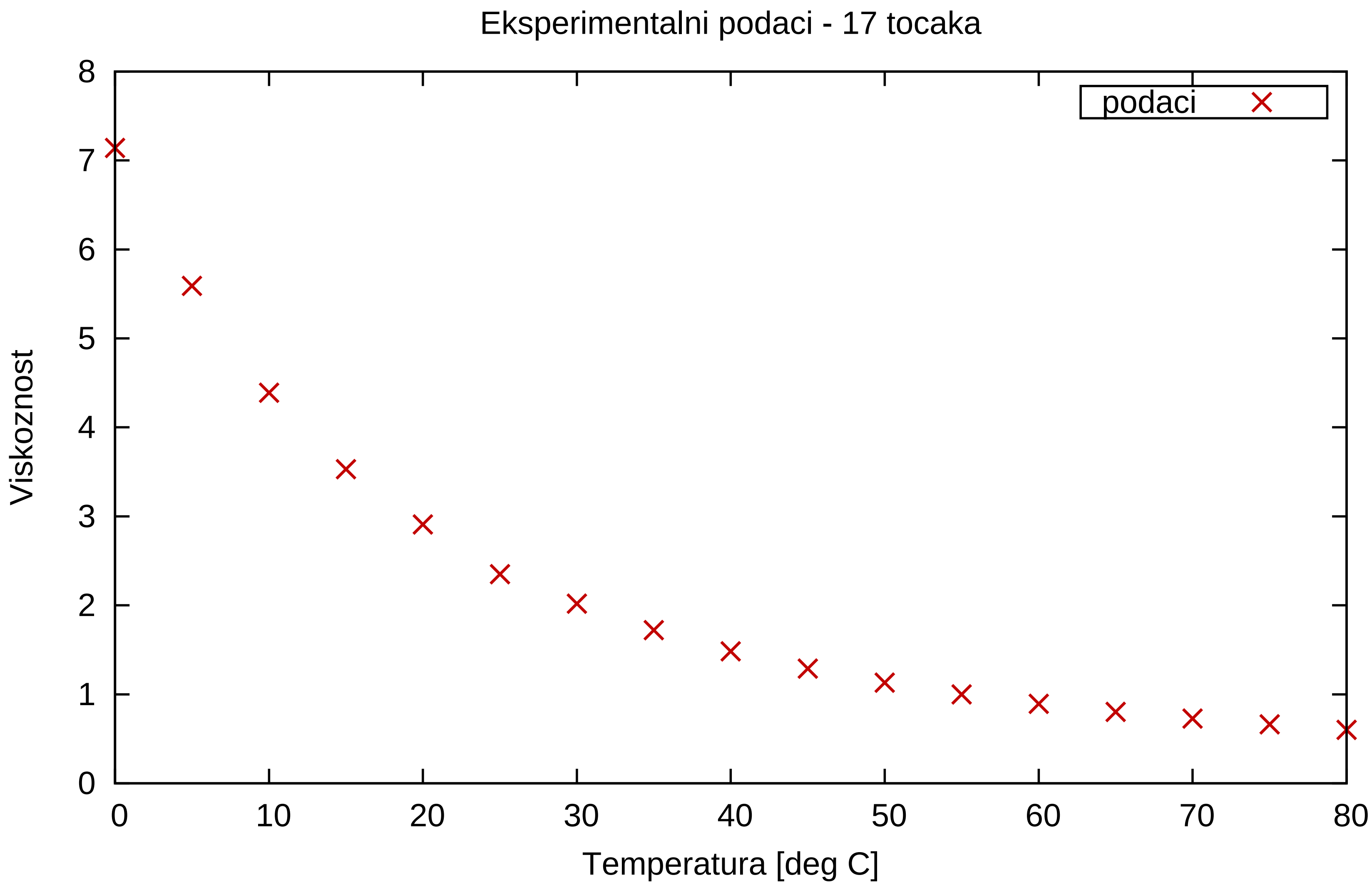
- način izbora aproksimacijske funkcije,
- i različita rješenja — koja dobivamo kad problem linealiziramo, odnosno, kad ga ne lineariziramo.

Eksperimentalno izmjereni podaci — tablica

Eksperimentalno su izmjereni sljedeći podaci (17 točaka):

Temperatura	Viskoznost
0	7.14
5	5.59
10	4.39
15	3.53
20	2.91
25	2.35
30	2.02
35	1.72
40	1.482
45	1.289
50	1.132
55	0.998
60	0.893
65	0.802
70	0.727
75	0.663
80	0.601

Eksperimentalno izmjereni podaci — slika



Prva aproksimacija — oblik i parametri

Izmjereni podaci imaju

- "eksponencijalno" padajući oblik, a ne polinomni!

Nelinearni model:

$$f(x) = e^{ax+b}$$

ima parametre

$$a = -3.848637 \cdot 10^{-2}, \quad b = 1.911946\,.$$

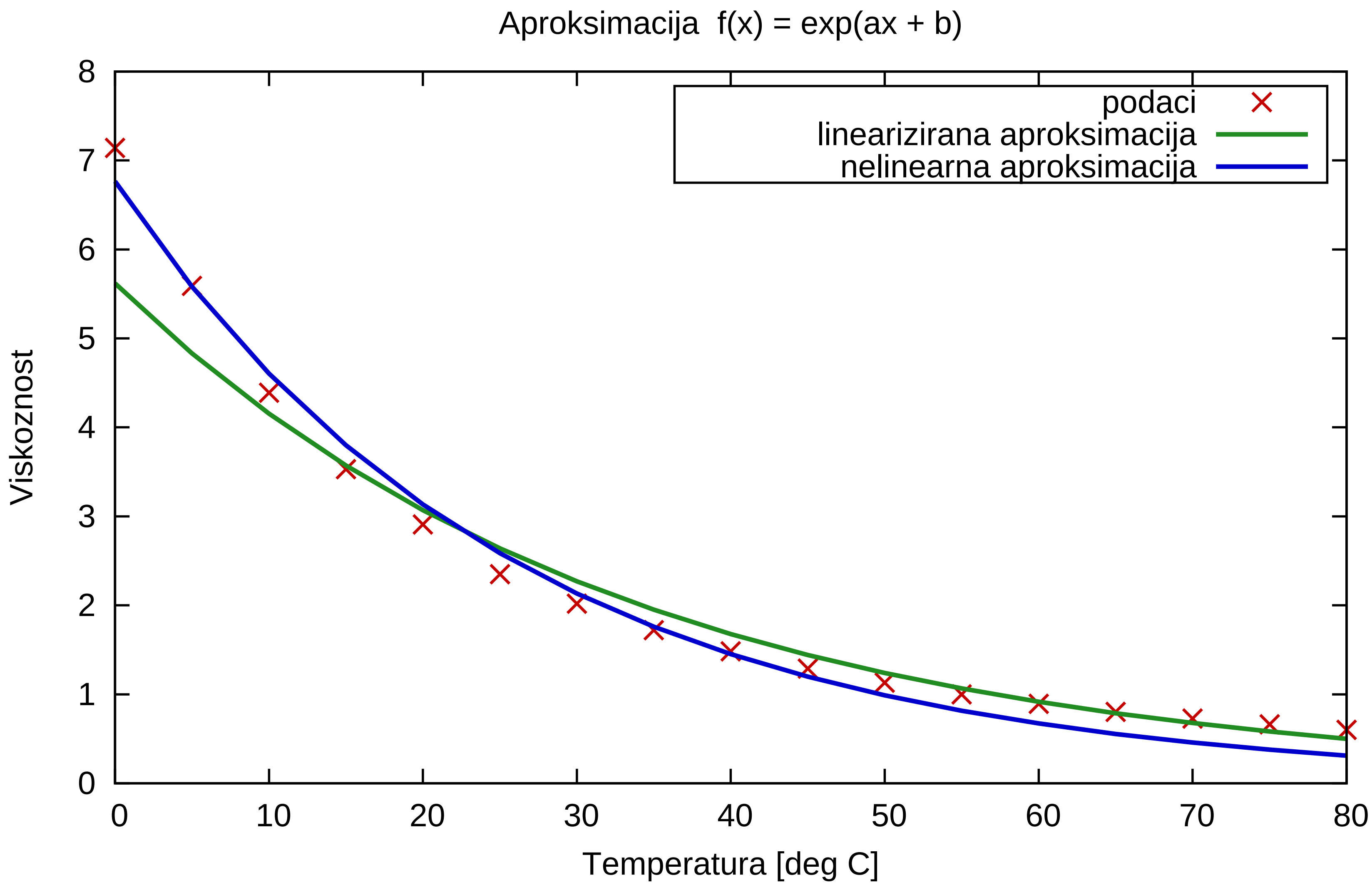
Linearizirani model:

$$\ln f(x) = ax + b$$

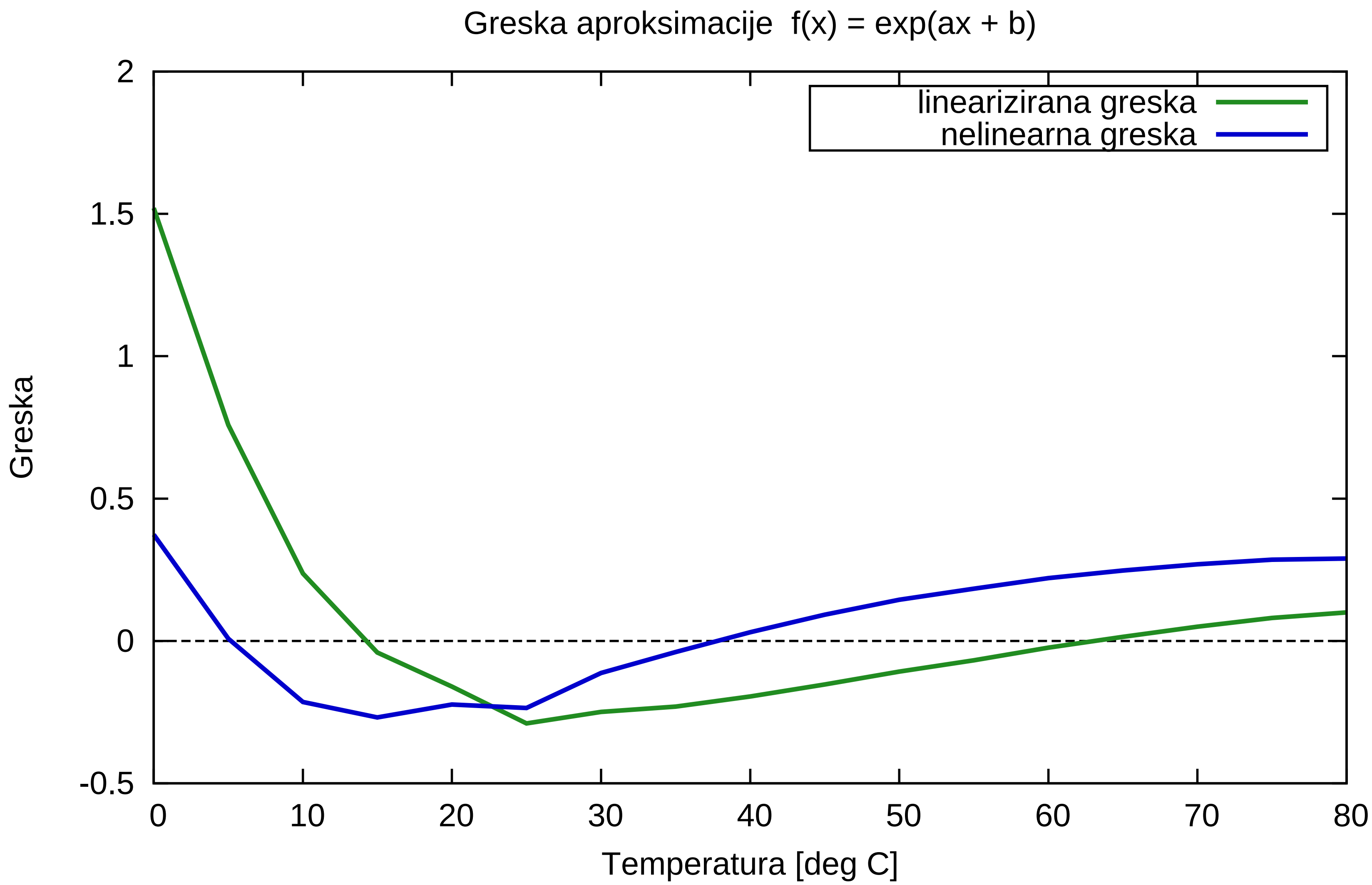
ima parametre

$$a = -3.022676 \cdot 10^{-2}, \quad b = 1.726233\,.$$

Prva aproksimacija



Greške prve aproksimacije



Druga aproksimacija — oblik i parametri

Dobivene greške nisu "slučajne", pa nismo baš pogodili oblik.

- Ponašanje upućuje na "popravak" kvadratnim članom.

Nelinearni model:

$$f(x) = e^{ax^2+bx+c}$$

ima parametre

$$a = 2.487568 \cdot 10^{-4}, \quad b = -4.977411 \cdot 10^{-2}, \quad c = 1.962208\,.$$

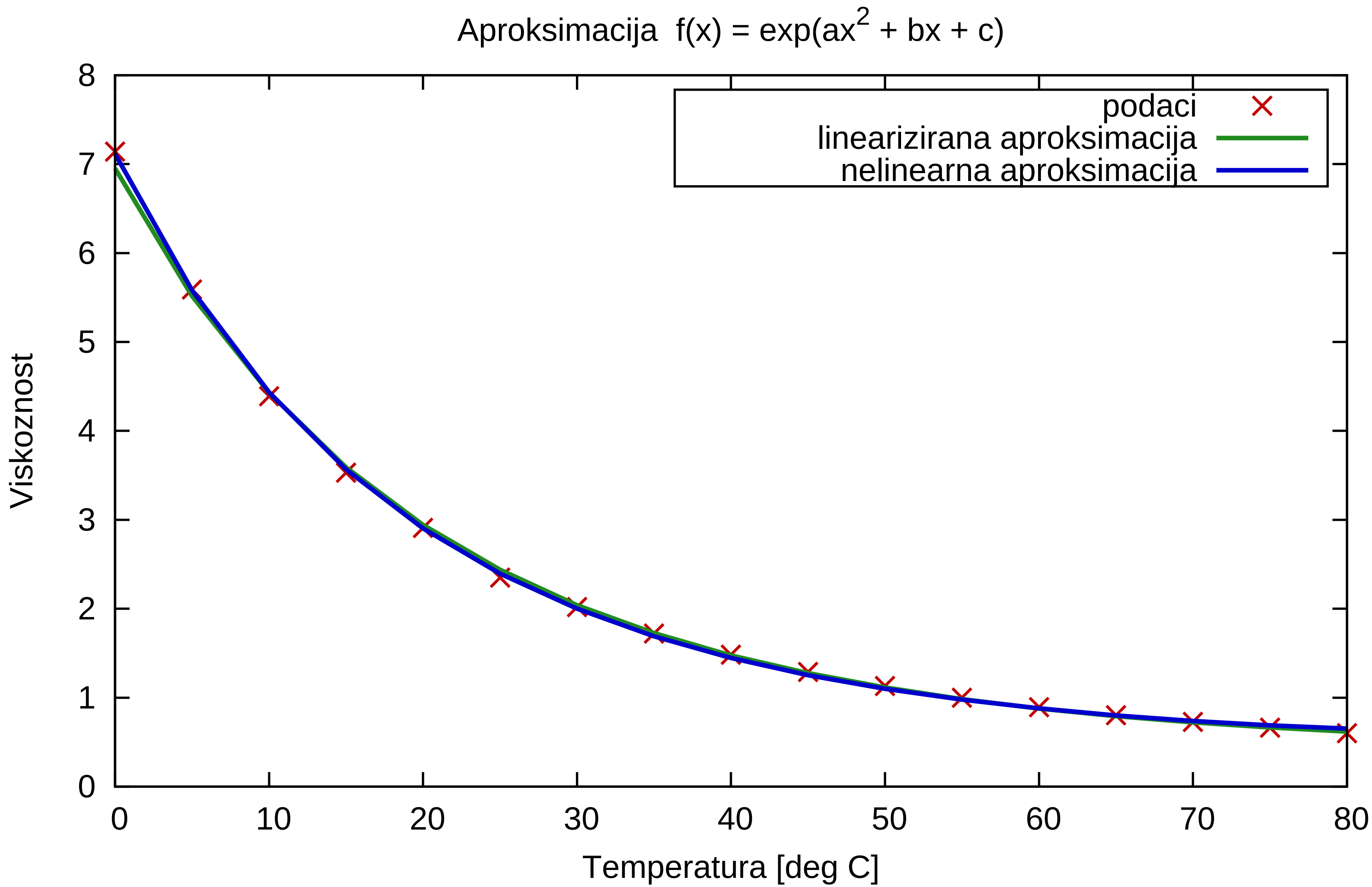
Linearizirani model:

$$\ln f(x) = ax^2 + bx + c$$

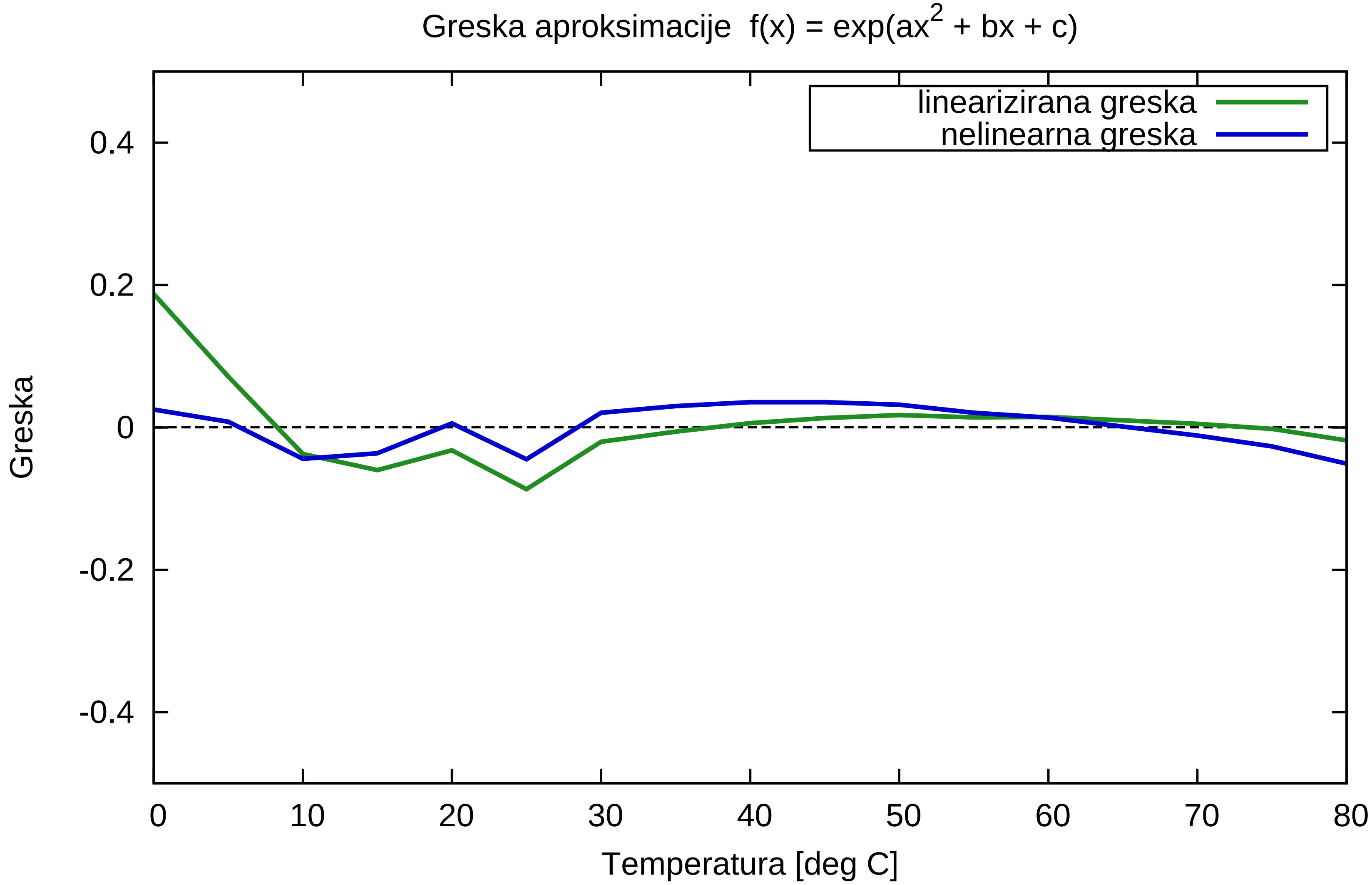
ima parametre

$$a = 2.128853 \cdot 10^{-4}, \quad b = -4.725758 \cdot 10^{-2}, \quad c = 1.939119\,.$$

Druga aproksimacija



Greške druge aproksimacije



Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata

Matrična formulacija

Diskretni linearni problem najmanjih kvadrata najčešće se rješava u matričnom obliku.

Da bismo formirali matrični zapis linearnog problema najmanjih kvadrata, zgodno je preimenovati nepoznanice,

- tako da matricu,
- vektor desne strane i
- nepoznanice u linearnom sustavu

pišemo u uobičajenoj formi:

- standardno su nepoznanice $x_1, \ldots, x_m$,
- a ne $a_0, \ldots, a_m$.

Matrična formulacija — oznake

Pretpostavimo da skup podataka (t_k, y_k), za $k = 1, \ldots, n$, želimo aproksimirati linearnom funkcijom

$$\varphi(t) = x_1\varphi_1(t) + \cdots + x_m\varphi_m(t).$$

Funkcija φ je neka linearna kombinacija izabranih funkcija baze $\varphi_1, \ldots, \varphi_m$.

Želimo pronaći parametre x_j tako da zadani podaci (t_k, y_k) zadovoljavaju

$$y_k = \sum_{j=1}^{m} x_j\varphi_j(t_k), \quad k = 1, \ldots, n.$$

Primijetite da to nije uvijek moguće, jer je podataka, uobičajeno, znatno više nego parametara $(n \gg m)$.

Matrična formulacija — preodređeni sustav

Uz oznake

$$a_{kj} = \varphi_j(t_k), \quad b_k = y_k,$$

prethodne jednadžbe možemo napisati u matričnom obliku

$$Ax = b.$$

Oprez: ovdje je A matrica tipa $n \times m$, a ne $m \times n$, kao inače!

Budući da je matrica A "visoka i tanka" ($n \geq m$), imamo

- preodređen sustav linearnih jednadžbi.

Taj sustav ne mora uvijek imati rješenje, tj. može se dogoditi da je

$$r := b - Ax \neq 0, \quad \text{za svaki} \quad x \in \mathbb{R}^m.$$

Upravo to se, gotovo uvijek, i događa u praksi.

Matrična formulacija — min norme reziduala

Postavlja se pitanje: Što je onda "najbolje" rješenje x ovog sustava $Ax = b$? Prirodni odgovor:

- onaj vektor $x \in \mathbb{R}^m$ za kojeg dobivamo "najmanji" rezidual $r = r(x)$.

Naravno, "najmanji" se mjeri u nekoj normi na prostoru $\mathbb{R}^n$.

Najčešće, x određujemo tako da se minimizira Euklidska norma reziduala $r = b - Ax$, tj. tražimo rješenje problema

$$\min_x \|r\|_2 = \min_x \|Ax - b\|_2, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times m}, \quad b \in \mathbb{R}^n.$$

Problem "najmanjih kvadrata": minimizacija norme $\|Ax - b\|_2$ ekvivalentna je minimizaciji kvadrata norme $\|Ax - b\|_2^2$.

Komentar

Ako smo dobro izabrali bazne funkcije φ_j, onda je razumno pretpostaviti da su one linearno nezavisne na zadanim podacima, tj. stupci matrice A su linearno nezavisni, pa

- matrica A ima puni stupčani rang, tj. $\mathrm{rang}(A) = m$.

Pokazat ćemo da, uz taj uvjet, problem najmanjih kvadrata uvijek ima jedinstveno rješenje.

S druge strane, ako je $\mathrm{rang}(A) < m$, onda

- rješenje x sigurno nije jedinstveno,
- jer mu možemo dodati bilo koji vektor iz nul-potprostora od A, a da se rezidual ne promijeni.

Za početak, nećemo pretpostaviti nikakva specijalna svojstva matrice A, tj. tvrdnje u nastavku vrijede za bilo koji problem.

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Teorem. Skup svih rješenja problema $\min_x \|r\|_2$ označimo s

$$\mathcal{S} = \{\, x \in \mathbb{R}^m \mid \|Ax - b\|_2 = \min \,\}.$$

Tada je $x \in \mathcal{S}$, tj. x je rješenje problema najmanjih kvadrata, ako i samo ako vrijedi sljedeća relacija ortogonalnosti

$$A^T (b - Ax) = 0,$$

koju obično nazivamo sustav normalnih jednadžbi i pišemo u obliku

$$A^T A x = A^T b.$$

Napomena. Raniji pristup — minimizacijom norme vektora greške, daje baš ovaj sustav normalnih jednadžbi. Provjerite!

$A^T A$ je Gramova matrica skalarnih produkata stupaca od A.

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Dokaz. Pretpostavimo da je $x \in \mathcal{S}$, tj. da x minimizira normu reziduala. Treba pokazati da x zadovoljava sustav normalnih jednadžbi, odnosno, da za rezidual $r = b - Ax$ vrijedi $A^T r = 0$.

Pretpostavimo suprotno — da za rezidual r vrijedi

$$A^T r = z \neq 0.$$

Za $\varepsilon \in \mathbb{R}$, promatramo vektor $\hat{x} = x + \varepsilon z$. Njegov rezidual je

$$\hat{r} = b - A\hat{x} = b - Ax - \varepsilon Az = r - \varepsilon Az,$$

pa je

$$\begin{aligned} \|\hat{r}\|_2^2 &= \hat{r}^T \hat{r} = r^T r - \varepsilon r^T Az - \varepsilon (Az)^T r + \varepsilon^2 (Az)^T (Az) \\ &= \{A^T r = z\} = r^T r - 2\varepsilon z^T z + \varepsilon^2 (Az)^T (Az) \\ &= \|r\|_2^2 - 2\varepsilon \|z\|_2^2 + \varepsilon^2 \|Az\|_2^2. \end{aligned}$$

Rješenje problema najmanjih kvadrata

No, zbog $\|z\| > 0$, za dovoljno mali $\varepsilon > 0$ dobivamo da je

$$\|\hat{r}\|_2^2 = \|r\|_2^2 - 2\varepsilon\|z\|_2^2 + \varepsilon^2\|Az\|_2^2 < \|r\|_2^2,$$

što je kontradikcija s pretpostavkom da x minimizira rezidual.

Zaključujemo da mora biti $z = 0$, tj. da x zadovoljava sustav normalnih jednadžbi.

Obrat. Pretpostavimo da x zadovoljava normalne jednadžbe

$$A^T r = 0, \quad r = b - Ax.$$

Za bilo koji vektor $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$, njegov rezidual $\hat{r}$ ima oblik

$$\hat{r} = b - A\hat{x} = (r + Ax) - A\hat{x} = r - A(\hat{x} - x).$$

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Ako označimo $e = \hat{x} - x$, onda je $\hat{r} = r - Ae$, pa imamo

$$\begin{aligned}
\|\hat{r}\|_2^2 = \hat{r}^T\hat{r} &= (r - Ae)^T(r - Ae) \\
&= r^Tr - r^TAe - (Ae)^Tr + (Ae)^TAe \\
&= \|r\|_2^2 - (A^Tr)^Te - e^T(A^Tr) + \|Ae\|_2^2 = \{A^Tr = 0\} \\
&= \|r\|_2^2 + \|Ae\|_2^2 = \|r\|_2^2 + \|A(\hat{x} - x)\|_2^2.
\end{aligned}$$

Zbog $\|Ae\|_2^2 \geq 0$, odavde odmah slijedi da je

$$\|\hat{r}\| \geq \|r\|, \quad \text{za svaki} \quad \hat{x} \in \mathbb{R}^m,$$

pa x minimizira normu reziduala, tj. vrijedi $x \in \mathcal{S}$. ∎

Napomena. Trenutno, još uvijek ne znamo je li $\mathcal{S} \neq \emptyset$.

Struktura skupa svih rješenja

Iz zadnje relacije

$$\|\hat{r}\|_2^2 = \|r\|_2^2 + \|Ae\|_2^2 = \|r\|_2^2 + \|A(\hat{x} - x)\|_2^2$$

odmah dobivamo i preciznu strukturu skupa $\mathcal{S}$ svih rješenja problema najmanjih kvadrata.

Korolar. Neka je $x \in \mathcal{S}$. Onda je $\hat{x} \in \mathcal{S}$ ako i samo ako je $\hat{x} - x \in \mathcal{N}(A)$, tj. skup $\mathcal{S}$ je linearna mnogostrukost u $\mathbb{R}^m$.

Dokaz. Očito je $\hat{x} \in \mathcal{S}$, ako i samo ako vrijedi $\|\hat{r}\|_2 = \|r\|_2$. No, iz prethodne relacije vidimo da je to ekvivalentno s $Ae = A(\hat{x} - x) = 0$, odnosno, $\hat{x} - x \in \mathcal{N}(A)$. ∎

Usput (kao dodatak dokazu teorema), onda iz $\hat{r} = r - Ae$ slijedi $\hat{r} = r$, pa i $\hat{r}$ zadovoljava normalne jednadžbe.

Egzistencija rješenja — uvijek postoji!

Prethodni teorem, zapravo, kaže da je skup $\mathcal{S}$ rješenja problema minimizacije $\|r\|_2$ jednak skupu rješenja sustava normalnih jednadžbi

$$A^T A x = A^T b.$$

Odavde odmah slijedi egzistencija rješenja, tj. $\mathcal{S} \neq \emptyset$.

- Matrica $A^T A$ je simetrična i pozitivno semidefinitna, jer za svaki vektor $x \in \mathbb{R}^m$ vrijedi

$$x^T A^T A x = (x^T A^T)(A x) = (A x)^T (A x) = \|A x\|_2^2 \geq 0.$$

- Sustav normalnih jednadžbi uvijek ima rješenje, jer je

$$A^T b \in \mathcal{R}(A^T) = \mathcal{R}(A^T A)$$

(v. teorem Kronecker–Capelli). ■

Jedinstvenost rješenja

Dobivamo čak i jače — zaključak o jedinstvenosti rješenja.

Teorem. Problem najmanjih kvadrata ima jedinstveno rješenje, ako i samo ako vrijedi bilo koja od sljedećih tvrdnji:

- A ima puni stupčani rang, tj. vrijedi $\mathrm{rang}(A) = m$,
- stupci matrice A su linearno nezavisni,
- $A^T A$ je pozitivno definitna matrica.

Dokaz. Iz korolara o strukturi skupa $\mathcal{S}$ svih rješenja problema najmanjih kvadrata, vidimo da je

- skup $\mathcal{S}$ jednočlan, ako i samo ako
- matrica A ima trivijalan nul-potprostor $\mathcal{N}(A)$, tj. vrijedi $\dim \mathcal{N}(A) = 0$, odnosno, $x \neq 0 \Longrightarrow Ax \neq 0$.

Jedinstvenost rješenja

Trivijalnost $\mathcal{N}(A)$ ekvivalentna je sljedećim zaključcima.

1. tvrdnja — koristimo $\dim \mathcal{N}(A) = 0$.

- Iz teorema o rangu i defektu za matricu A, tipa $n \times m$, to je ekvivalentno s $\mathrm{rang}(A) = m$. Usput, onda je $n \geq m$.

2. i 3. tvrdnja — koristimo $x \neq 0 \Longrightarrow Ax \neq 0$.

- Po definiciji, stupci matrice A su linearno nezavisni, ako i samo ako za svaki $x \neq 0$ vrijedi $Ax \neq 0$.
- Znamo da je $A^T A$ simetrična i pozitivno semidefinitna. Onda je gornja implikacija ekvivalentna pozitivnoj definitnosti matrice $A^T A$, jer za $x \neq 0$ vrijedi

$$x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 > 0. \qquad \blacksquare$$

Karakterizacija jedinstvenog rješenja

Zadnja tvrdnja — preko pozitivne definitnosti matrice $A^T A$, odgovara činjenici da sustav normalnih jednadžbi

$$A^T A x = A^T b$$

ima jedinstveno rješenje, ako i samo ako je $A^T A$ regularna matrica (pozitivno definitna matrica je regularna).

U tom slučaju, jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata je

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b,$$

a pripadni rezidual najmanje 2–norme je

$$r = b - A(A^T A)^{-1} A^T b.$$

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Desna strana b može se napisati preko reziduala kao

$$b = Ax + r,$$

pri čemu je, očito, $Ax \in \mathcal{R}(A)$. Nadalje, iz sustava normalnih jednadžbi odmah vidimo da je

$$A^T(b - Ax) = A^T r = 0,$$

što znači da je $r \in \mathcal{N}(A^T)$. Na kraju, prisjetimo se da je

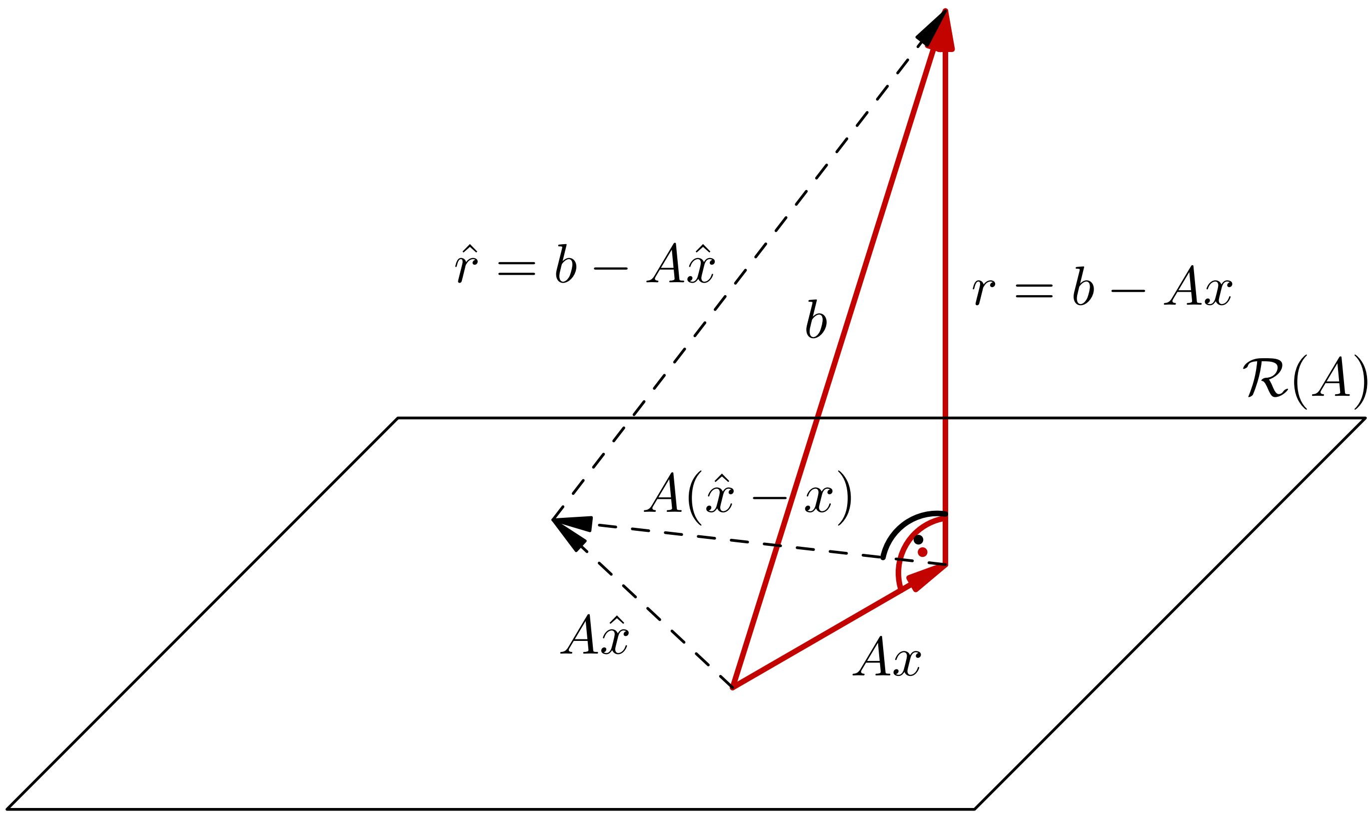
$$\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T) = \mathbb{R}^n,$$

pa vektor r mora biti okomit na Ax. To daje geometrijsku interpretaciju rješenja problema najmanjih kvadrata.

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Rješenje problema najmanjih kvadrata dobivamo

- ortogonalnom projekcijom vektora b na potprostor $\mathcal{R}(A)$.



Struktura skupa rješenja i linearni sustav

Označimo s $\mathcal{P}(b)$ ortogonalnu projekciju vektora b na $\mathcal{R}(A)$.

- Taj vektor $\mathcal{P}(b)$ je sigurno jedinstven (kao projekcija).

Prema slici, za rješenje x mora vrijediti $Ax = \mathcal{P}(b)$. Preciznije,

- sva rješenja $x \in \mathcal{S}$ problema najmanjih kvadrata su,
- upravo, sva rješenja linearnog sustava $Ax = \mathcal{P}(b)$.

Zato skup $\mathcal{S}$ ima istu strukturu — linearna mnogostrukost, kao i opće rješenje linearnog sustava s matricom A, s tim da

- ovdje znamo da je $\mathcal{S}$ neprazan, tj. postoji $x_0 \in \mathcal{S}$.

Analogno, jedinstvenost rješenja x svodi se na

- jedinstvenost rješenja linearnog sustava s matricom A, tj. trivijalnost nul-potprostora $\mathcal{N}(A)$.

Numeričke metode i jedinstvenost rješenja

Numeričke metode za računanje rješenja problema najmanjih kvadrata imaju smisla samo kad je

- objekt kojeg računamo jedinstven.

Znamo da linearni problem najmanjih kvadrata uvijek ima rješenje. Osim toga, rješenje je jedinstveno, ako i samo ako

- matrica A ima puni stupčani rang.

Sjetite se uvodnih komentara o izboru “baznih” funkcija φ_j.

U nastavku, tražimo efikasne i točne numeričke metode za računanje rješenja. Promatramo samo one probleme

- u kojima imamo garantiranu jedinstvenost rješenja.

Prije toga — završni komentar o jedinstvenosti.

Osiguranje jedinstvenosti u općem problemu

Ako matrica A nema puni rang po stupcima, tj. ako je $\text{rang}(A) < m$, onda

- rješenje problema najmanjih kvadrata nije jedinstveno.

U tom slučaju, jedinstvenost rješenja se dobiva dodatnim uvjetom — pored $\|Ax - b\|_2 \to \min$, još tražimo

- rješenje $x \in \mathcal{S}$ koje ima najmanju 2-normu, tj. dodatni uvjet je $\|x\|_2 \to \min$.

Geometrijska interpretacija:

- To rješenje je ortogonalna projekcija ishodišta, odnosno, nul-vektora na linearnu mnogostrukost $\mathcal{S} = x_0 + \mathcal{N}(A)$ (očito je jedinstveno).

Ovaj pristup ima smisla u primjenama, na pr., u statistici.

Jedinstveno rješenje — ponavljanje

Odsad nadalje, pretpostavljamo (ako drugačije nije rečeno) da matrica A ima puni stupčani rang. Posebno, to znači da

- A ima više redaka nego stupaca, $n \geq m$, i
- stupci od A su linearno nezavisni, $\mathrm{rang}(A) = m$.

Matrica $A^T A$ je pozitivno definitna, a iz sustava normalnih jednadžbi

$$A^T A x = A^T b$$

dobivamo jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Pripadni rezidual najmanje 2–norme je

$$r = b - A(A^T A)^{-1} A^T b.$$

Računanje rješenja problema najmanjih kvadrata

Treba još pronaći način kako jednostavno izračunati rješenje. Jasno je da se matrica $A^T A$ ne invertira, nego se rješava linearni sustav

$$A^T A x = A^T b.$$

Ovaj pozitivno definitni sustav normalnih jednadžbi možemo riješiti tako da iskoristimo faktorizaciju Choleskog za $A^T A$.

Prednosti/nedostaci ove metode = "množenje + Cholesky":

- ukupan broj aritmetičkih operacija za rješenje je $nm^2 + \frac{1}{3}m^3 + O(m^2)$, što je brzo,
- ali, rješavanje na ovaj način nije naročito točno.

Može se koristiti za mali broj parametara m, ako ne tražimo jako točno rješenje (često u praksi — za "mala" mjerenja).

Korištenje QR faktorizacije

Opet, neka A ima puni stupčani rang. Promatramo problem minimizacije

$$\|Ax - b\|_2 \to \min .$$

Prisjetite se, za proizvoljnu ortogonalnu matricu Q^T vrijedi da čuva skalarni produkt — onda i kvadrat norme, pa i normu.

Dakle, rješenje problema minimizacije možemo zapisati kao

$$\|Ax - b\|_2 = \|Q^T(Ax - b)\|_2 = \|Q^T Ax - Q^T b\|_2 \to \min .$$

Pitanje. Kako naći pogodan Q^T, tako da, iz problema ili "sustava" s matricom $Q^T A$, lako izračunamo rješenje x?

Odgovor. Korištenjem QR faktorizacije — tako da $Q^T A$ bude gornja trokutasta matrica R, tj. faktorizacijom $A = QR$!