2. Metoda celor mai mici pătrate

Fie f : [a, b] → **R** o funcţie. Fie x_0, x_1, …, x_n n+1 puncte distincte din intervalul [a, b] pentru care se cunosc valorile funcţiei $y_i = f(x_i)$ pentru orice i = 0,1,…n. Aproximarea funcţiei f printr-un polinom de interpolare nu este indicată în următoarele situaţii:

- când n este un număr foarte mare, ceea ce determină un volum mare de calcul pentru determinarea coeficienţilor de interpolare
- când valorile $y_i = f(x_i)$ nu sunt exacte.

În aceste situaţii se poate folosi aproximarea funcţiei prin metoda celor mai mici pătrate.

2.1. Caracterizarea elementelor de cea mai bună aproximare pe subspaţii Hilbert.

Definiţie. Fie (S, d) un spaţiu metric şi X o submulţime a sa. Fie x^0 un element al lui S. Se numeşte ***element de cea mai bună aproximare*** a lui x^0 pe X un element $p^0 \in X$ astfel încât

$$d(p^0, x^0) = \inf_{x\in X} d(x, x^0)$$

Reamintim că orice spaţiu pre-Hilbert H (spaţiu vectorial real sau complex înzestrat cu un produs scalar $< \cdot, \cdot >$) este în particular un spaţiu metric (distanţa d este definită prin $d(x,y) = \| x - y \| = \sqrt{\langle x-y, x-y\rangle}$ pentru orice x, $y \in H$). În acest caz dacă X o submulţime a lui H şi $x^0 \in H$, atunci un element $p^0 \in X$ este element de cea mai bună aproximare pentru x^0 pe X dacă

$$\left\|p^0 - x^0\right\| = \inf_{x\in X}\left\|x - x^0\right\| = \inf_{x\in X}\sqrt{\left\langle x - x^0, x - x^0\right\rangle}$$

Teoremă. Fie H un spaţiu pre-Hilbert (real sau complex), H_0 un subspaţiu vectorial al său şi $x^0 \in H$. Dacă există un element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0, atunci acesta este unic.

Demonstrație. Presupunem prin absurd că există $p^1 \neq p^2$ elemente de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0. Deoarece H_0 este subspațiu vectorial al lui H, rezultă că $p = \frac{1}{2}p^1 + \frac{1}{2}p^2 \in H_0$. Avem

$$||p-x^0||^2 = ||\frac{1}{2}p^1 + \frac{1}{2}p^2-x^0||^2 = \frac{1}{4}\ ||p^1 - x^0 + p^2 - x^0||^2 <$$

$$< \frac{1}{4}\ ||p^1 - x^0 + p^2 - x^0||^2 + \frac{1}{4}\ ||p^1 - x^0 - (p^2 - x^0)||^2$$

$$= \frac{1}{2}(||p^1 - x^0||^2 + ||p^2 - x^0||^2)$$

$$\leq ||p^1 - x^0||^2.$$

Deci $p \in H_0$ și $||p-x^0|| < ||p^1 - x^0||$, contradicție cu faptul că p^1 este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0. Rezultă că presupunerea este falsă, și în consecință elementul de cea mai bună aproximare este unic.

■

Teoremă. Fie H un spațiu pre-Hilbert, H_0 un subspațiu liniar al lui H și $x^0 \in H$. Un element $p^0 \in H_0$ este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0 dacă și numai dacă

$$p^0-x^0 \perp H_0 \text{ (sau echivalent, } < p^0-x^0, x> = 0 \text{ pentru orice } x \in H_0).$$

Demonstrație. Presupunem că $p^0-x^0 \perp H_0$ și demonstrăm că $p^0 \in H_0$ este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0. Dacă $p^0 = x^0$, atunci este evident că p^0 este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0. Presupunem că $p^0 \neq x^0$. Deoarece $< p^0-x^0, x> = 0$ pentru orice $x \in H_0$, atunci în particular, $<p^0-x^0, p^0> = 0$ și ca urmare $< p^0-x^0, p^0 - x> = 0$ pentru orice $x \in H_0$. Pentru un $x \in H_0$ oarecare, avem

$$||p^0-x^0||^2 = < p^0-x^0, p^0 -x^0> = < p^0 -x^0, p^0 - x + x - x^0>$$

$$= < p^0-x^0, p^0 - x> + < p^0 -x^0, x- x^0>$$

$$= < p^0-x^0, x- x^0> = |< p^0-x^0, x- x^0>| \leq ||p^0-x^0||\ ||x- x^0||.$$

Deci $||p^0-x^0||^2 \leq ||p^0-x^0||\ ||x- x^0||$ pentru orice $x \in H_0$. Împărțind inegalitatea cu

$$||p^0 -x^0|| > 0,$$

obținem

$$||p^0-x^0|| \leq ||x- x^0|| \text{ pentru orice } x \in H_0,$$

adică $p^0 \in X$ este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0.

Presupunem că $p^0 \in H_0$ este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0 şi demonstrăm că $<p^0-x^0, x> = 0$ pentru orice $x \in H_0$. Presupunem prin absurd că există $y^0 \in H_0$ astfel încât

$$<p^0-x^0, y^0> \neq 0.$$

Scriind $<p^0-x^0, y^0> = r(\cos\theta + i\sin\theta) = re^{i\theta}$ cu $r>0$ şi $\theta \in [0, 2\pi]$, rezultă că înlocuind y^0 cu $e^{i\theta}y^0 \in H_0$, putem presupune că există $y^0 \in H_0$ astfel încât

$$<p^0-x^0, y^0> > 0.$$

Pentru orice $\lambda > 0$, avem $p^0 - \lambda y^0 \in H_0$, deoarece H_0 este subspaţiu vectorial. În plus avem

$$\|p^0 - \lambda y^0 - x^0\|^2 = < p^0 - \lambda y^0 - x^0, p^0 - \lambda y^0 - x^0>$$
$$= < (p^0 - x^0) - \lambda y^0, (p^0 - x^0) - \lambda y^0>$$
$$= \| p^0 - x^0\|^2 - \lambda<y^0, p^0-x^0> -\lambda< p^0-x^0, y^0> + \lambda^2\| y^0\|^2$$
$$= \| p^0 - x^0\|^2 + \lambda(\lambda\| y^0\|^2 - 2 < p^0-x^0, y^0>)$$

În consecinţă pentru orice scalar λ cu proprietatea că

$$0 < \lambda < 2\frac{\left\langle p^0 - x^0, y^0 \right\rangle}{\left\| y^0 \right\|^2}$$

avem $\|p^0 - \lambda y^0 - x^0\|^2 < \| p^0 - x^0\|^2$ şi $p^0 - \lambda y^0 \in H_0$. Am obţinut astfel o contradicţie cu faptul că p^0 este element de cea mai bună aproximare a lui x^0 pe H_0. În consecinţă, presupunerea este falsă şi deci

$$<p^0 - x^0, x> = 0$$

pentru orice $x \in H_0$.

■

VI. 2.2. Aproximarea în medie prin metoda celor mai mici pătrate

Considerăm mulţimea funcţiilor definite pe intervalul [a, b],

$$\mathcal{F} := \{f : [a, b] \to \mathbf{R}\}$$

şi n+1 puncte distincte $x_0, x_1, \ldots, x_n$ din intervalul [a, b]. Spunem că funcţiile f şi g din această mulţime sunt egale aproape peste tot (şi vor fi identificate) dacă $f(x_i) = g(x_i)$ pentru orice i = 0,1,…, n. Mai precis,

$$f \sim g \Leftrightarrow f(x_i) = g(x_i) \text{ pentru orice } i = 0,1,\ldots, n,$$

defineşte o relaţie de echivalenţă pe $\mathcal{F}$. Notăm

$$[f] = \{g: f \sim g\} = \{ g : [a, b] \to \mathbf{R},\ f(x_i) = g(x_i) \text{ pentru orice } i = 0,1,\ldots, n\}$$

clasa de echivalenţă a lui f. Notăm cu cu H mulţimea claselor de echivalenţă relativ la relaţia de echivalenţă de mai sus. H poate fi înzestrat cu o operaţie de grup abelian după cum urmează:

$$[f] + [g] := [h], \text{ unde } h : [a, b] \to \mathbf{R},\ h(x) = f(x) + g(x) \text{ pentru orice } x\in [a, b].$$

Arătăm că definiţia nu depinde de reprezentanţi. Fie $f_1 \sim f_2$, $g_1 \sim g_2$ şi pentru i=1,2 fie $h_i:[a,b]\to\mathbf{R}$, $h_i(x) = f_i(x) + g_i(x)$ pentru orice $x\in [a, b]$. Avem

$$h_1(x_j) = f_1(x_j) + g_1(x_j) = f_2(x_j) + g_2(x_j) = h_2(x_j)$$

pentru orice j = 0,1,…, n. Ca urmare $h_1 \sim h_2$, adică $[h_1] = [h_2]$. Evident operaţia definită mai sus este asociativă şi comutativă. Dacă notăm

$$o: [a, b] \to \mathbf{R},\ o(x) = 0 \text{ pentru orice } x\in [a, b],$$

atunci [o] este element neutru. Pentru orice [h], [-h] este simetricul faţă de +, unde

$$-h: [a, b] \to \mathbf{R},\ (-h)(x) = -h(x) \text{ pentru orice } x\in [a, b].$$

De asemenea H poate fi înzestrat cu o operaţie externă de înmulţire cu scalari reali după cum urmează:

$$\alpha[f] := [h], \text{ unde } h : [a, b] \to \mathbf{R},\ h(x) = \alpha f(x) \text{ pentru orice } x\in [a, b].$$

Este uşor de observat că definiţia nu depinde de reprezentanţi. H înzestrat cu cele două operaţii definite mai sus devine spaţiu vectorial.

Fie p o funcţie cu următoarele proprietăţi:

- $p(x_i) > 0$
- $\sum_{i=0}^{n} p(x_i) = 1.$

Dacă $f_1 \sim f_2$ şi $g_1 \sim g_2$ atunci

$$\sum_{i=0}^{n} p(x_i) f_1(x_i) g_1(x_i) = \sum_{i=0}^{n} p(x_i) f_2(x_i) g_2(x_i).$$

Introducem următorul produs scalar pe H

$$<[f], [g]> = \sum_{i=0}^{n} p(x_i)f(x_i)g(x_i)$$

Funcția p(x) este o ***funcție pondere*** introdusă în ipoteza că aproximările $f(x_i)$ sunt diferite ca ordin de mărime. Relativ la produsul scalar introdus, norma lui [f] este definită prin

$$\|[f]\|^2 = \sum_{i=0}^{n} p(x_i)f^2(x_i).$$

În cele ce urmează convenim să desemnăm o clasă de echivalență [f] printr-un reprezentant al ei f.

Fie $\varphi_0, \varphi_1, \ldots\varphi_m$ un sistem de m+1 funcții liniar independente definite pe [a,b], cu $m \le n$. Convenim să numim spațiul generat de ele spațiul polinoamelor generalizate şi să-l notăm H_m. Deci un ***polinom generalizat*** $F \in H_m$ este de forma

$$F(x) = \sum_{i=0}^{m} c_i\varphi_i(x).$$

Aproximarea în medie prin metoda celor mai mici pătrate a unui element $f \in H$ presupune determinarea elementului de cea mai bună aproximare F_0 a lui f pe H_m. Conform definiției elementul F_0 de cea mai bună aproximare a lui f pe H_m trebuie să satisfacă condiția

$$\sum_{i=0}^{n} p(x_i)(f(x_i) - F_0(x_i))^2 = \inf_{F \in H_m} \sum_{i=0}^{n} p(x_i)(f(x_i) - F(x_i))^2$$

Determinarea coeficienților c_j ai polinomului generalizat F_0 cu ajutorul acestei relații este dificilă. Se foloseşte caraterizarea elementului de cea mai bună aproximare dată în secțiunea precedentă. Mai precis $F_0 \in H_m$ este element de cea mai bună aproximare a lui f pe H_m dacă şi numai dacă $<f - F_0, \varphi> = 0$ pentru orice $\varphi \in H_m$. Deoarece $\{\varphi_0, \varphi_1, ..., \varphi_m\}$ este o bază a lui H_m, pentru ca $F_0 \in H_m$ să fie element de cea mai bună aproximare a lui f pe H_m este suficient ca

$$<f - F_0, \varphi_j> = 0 \text{ pentru orice } j = 0, 1, 2\ldots m,$$

ceea ce revine la

$$<f, \varphi_j> = c_0<\varphi_0, \varphi_j> + c_1<\varphi_1, \varphi_j> + \ldots + c_m<\varphi_m, \varphi_j>, \; j = 0, 1,\ldots,m.$$

Notăm

$$a_{ij} = <\varphi_i, \varphi_j> = \sum_{k=0}^{n} p(x_k)\varphi_i(x_k)\varphi_j(x_k)$$

$$b_j = \langle f, \varphi_j \rangle = \sum_{k=0}^{n} p(x_k) f(x_k) \varphi_j(x_k)$$

Pentru determinarea coeficienților c_j ai polinomului generalizat F_0 se rezolvă sistemul

$$\begin{cases} c_0 a_{00} + c_1 a_{10} + \ldots + c_m a_{m0} = b_0 \\ c_0 a_{01} + c_1 a_{11} + \ldots + c_m a_{m1} = b_1 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ c_0 a_{0m} + c_1 a_{1m} + \ldots + c_m a_{mm} = b_m \end{cases}$$

Determinantul acestui sistem fiind un determinant Gramm (elementele sale sunt produse scalare) este diferit de zero, deoarece sistemul de funcții $\varphi_0, \varphi_1, \ldots \varphi_m$ este un sistem liniar independent.

Dacă $\varphi_j(x) = x^j$, $j = 0, 1, \ldots, m$, $m \le n$, şi $p \equiv \frac{1}{n+1}$, atunci

$$F_0(x) = \sum_{i=0}^{m} c_i x^i .$$

iar sistemul anterior devine

$$\begin{cases} c_0(n+1) + c_1 \sum_{i=0}^{m} x_i + \ldots + c_m \sum_{i=0}^{m} x_i^m = \sum_{i=0}^{m} f(x_i) \\ c_0 \sum_{i=0}^{m} x_i + c_1 \sum_{i=0}^{m} x_i^2 + \ldots + c_m \sum_{i=0}^{m} x_i^{m+1} = \sum_{i=0}^{m} x_i f(x_i) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ c_0 \sum_{i=0}^{m} x_i^m + c_1 \sum_{i=0}^{m} x_i^{m+1} + \ldots + c_m \sum_{i=0}^{m} x_i^{2m} = \sum_{i=0}^{m} x_i^m f(x_i) \end{cases}$$

Acest sistem este numit ***sistemul normal al lui Gauss***.

Limitări: Pentru determinarea coeficienților c_j ai polinomului generalizat F_0 se rezolvă sistemul $Ax = b$, cu $A = X^t X$ iar $b = X^t Y$, unde

$$X = \begin{pmatrix} \sqrt{p(x_0)}\,\varphi_0(x_0) & \sqrt{p(x_0)}\,\varphi_1(x_0) & \dots & \sqrt{p(x_0)}\,\varphi_m(x_n) \\ \sqrt{p(x_1)}\,\varphi_0(x_1) & \sqrt{p(x_1)}\,\varphi_1(x_1) & \dots & \sqrt{p(x_1)}\,\varphi_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{p(x_n)}\,\varphi_0(x_n) & \sqrt{p(x_n)}\,\varphi_1(x_n) & \dots & \sqrt{p(x_n)}\,\varphi_m(x_n) \end{pmatrix}$$

iar

$$Y = \begin{pmatrix} \sqrt{p(x_0)}\,f(x_0) \\ \sqrt{p(x_1)}\,f(x_1) \\ \dots \\ \sqrt{p(x_n)}\,f(x_n) \end{pmatrix}$$

Dacă funcțiile $\varphi_0, \varphi_1, \dots\varphi_m$ sunt liniar independente, atunci rang(X) = m+1 şi matricea A este pozitiv definită. Ca urmare există şi este unică o matrice inferior triunghiulară L cu elementele de pe diagonala principală pozitive astfel încât $A = LL^t$ (matricea L se numeşte factor Cholesky). Rezolvarea sistemului Ax=b revine la rezolvarea a două sisteme cu matrice triunghiulare: $Lz = b$, $L^t x = z$. O variantă mai lentă (volum de calcul mai mare), dar numeric mai stabilă, de rezolvare a sistemului Ax = b este dată de descompunerea QR a matricei A, adică de reprezentarea matricei A sub forma A = QR unde Q este o matrice ortogonală ($Q^tQ = I_{m+1}$) iar R o matrice superior triunghiulară. Atunci rezolvarea sistemului Ax=b este echivalentă cu rezolvarea sistemului $Rx = Q^t b$.

Dacă $A=X^tX$ nu este bine condiționată, atunci gradul de acuratețe al soluției furnizate de metoda celor mai mici pătrate poate fi foarte scăzut.