

Progetto di fine corso

Christian Mancini

21 settembre 2023

Sommario

L'obiettivo del progetto è quello di riprodurre a scopo didattico tutte le procedure necessarie per approssimare dati in 2D con una curva nel piano tramite le B-Spline utilizzando i minimi quadrati. Verranno anche fornite le implementazioni delle B-Spline e delle HB-Spline in Python.

Tutti i codici sorgenti mostrati in questa relazione sono reperibili alla seguente repository [GitHub](https://github.com/cMancio00/B-Spline) al seguente link: <https://github.com/cMancio00/B-Spline>

1 Introduzione

L'approssimazione è il processo di costruzione di una curva che coincida il più possibile con dei dati soggetti ad errore casuale. Queste tecniche vengono usate come alternativa all'interpolazione, dove si vuole un'esatta corrispondenza con alcuni punti dati. Ci sono delle situazioni in cui è conveniente usare tecniche di approssimazione, ad esempio:

1. visualizzazione dei dati
2. rappresentazione di una funzione dove non sono disponibili dati
3. sintetizzare relazioni tra variabili

Ci sono vari campi che utilizzano tecniche di approssimazione ad esempio la *modellazione statistica*, *machine learning* e *statistical learning*, ma con obiettivi diversi. Il nostro obiettivo è quello di fornire un'approssimazione il più possibile precisa di dati generati da funzioni generatrici, soggetti ad errori casuali. Non ci interessa quindi l'interpretazione dei risultati ottenuti. Nel seguito useremo i dati generati casualmente mostrati in tabella 1.

2 Approssimazione

Spesso ci ritroviamo a dover risolvere un sistema di equazioni lineari **sovradeterminato**, ovvero con più equazioni che incognite, in cui la matrice dei coefficienti ha rango massimo. Ciò che vogliamo risolvere è quindi:

$$\underline{Ax} = \underline{b} \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n} \quad m \gg n \equiv \text{rank}(A) \quad (1)$$

Tabella 1: Dati generati.

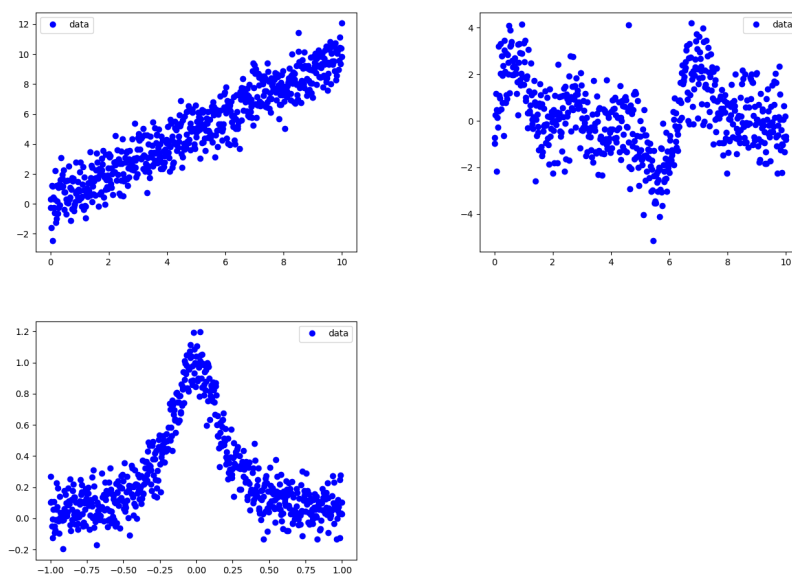


Tabella 2: Funzioni generatrici utilizzate: $y = x + \varepsilon$, $\sin 2x + \sin 3x + \varepsilon$, $\frac{1}{1+25x^2} + \varepsilon$ ($\varepsilon \sim N(0, 0.1)$)

Questo sistema lineare ammette soluzione se e solo se $\underline{b} \in \text{range}(A)$. Dato che $\underline{b} \in \mathbb{R}^m$, mentre $\dim(\text{range}(A)) = \text{rank}(A) = n < m$, allora non ammette soluzione in senso classico. Possiamo però ricercare il vettore \underline{x} , in modo che minimizzi il seguente vettore detto *residuo*:

$$\underline{r} = \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix} = A\underline{x} - \underline{b} \quad (2)$$

Per fare ciò dobbiamo quindi ricercare \underline{x} che minimizzi la seguente quantità:

$$\sum_{i=1}^m = \|\underline{r}\|_2^2 = \|A\underline{x} - \underline{b}\|_2^2 \quad (3)$$

Questa è la soluzione ai **minimi quadrati**. Facendo ciò, il sistema lineare $A\underline{x} = \underline{b} + \underline{r}$, ammette soluzione.

Un modo efficiente per risolvere questo problema è fattorizzando la matrice A . Una fattorizzazione conveniente è la fattorizzazione QR .

Teorema 1 (Fattorizzazione QR). *Data la matrice A , esistono le matrici:*

1. $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$, ortogonale,
2. $\hat{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, triangolare superiore

Tali che

$$A = QR = Q \begin{pmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Osservazione.

$$Q^T A = R = \begin{pmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} (n) \\ (m-n) \end{matrix} \quad (5)$$

Lemma 2.

$$Q^T \underline{b} = \begin{pmatrix} \underline{c} \\ \underline{d} \end{pmatrix} \begin{matrix} (n) \\ (m-n) \end{matrix} \quad (6)$$

Utilizzando questa fattorizzazione possiamo ridurre il problema:

$$\begin{aligned} \|A\underline{x} - \underline{b}\| &= \|Q^T A\underline{x} - Q^T \underline{b}\| \quad (\text{la norma 2 non viene modificata da una matrice ortogonale}) \\ &= \|\hat{R}\underline{x} - \underline{c}\| + \|\underline{d}\| \quad (\text{per l'osservazione 2 e per il lemma 2}) \end{aligned}$$

Ci siamo dunque ricondotti a dover risolvere il seguente sistema lineare:

$$\hat{R}\underline{x} = \underline{c} \quad (7)$$

Tale sistema ha soluzione in tempo lineare, essendo \hat{R} una matrice triangolare superiore. La fattorizzazione QR , se si utilizza il metodo di *Householder*, richiede $\approx \frac{2}{3}n^2(3m - n)$ flops. La funzione `qr` della libreria **numpy**, implementa la fattorizzazione con il metodo di *Householder*.

Per quanto riguarda il nostro problema, possiamo utilizzare una forma della matrice A più conveniente. Scelta una base qualsiasi è possibile costruirsi la matrice A che assume nomi diversi in base ai campi. Ad esempio può essere chiamata matrice *dei coefficienti, di costruzione, di design*. Dato che utilizzeremo le basi delle B-spline, essa prende il nome di **matrice di collocazione**.

Definizione 2.1 (matrice di collocazione). *La matrice di collocazione A è definita nel seguente modo:*

$$A \equiv \begin{pmatrix} N_{0,k}(x_0) & \cdots & N_{n,k}(x_0) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ N_{0,k}(x_m) & \cdots & N_{n,k}(x_m) \end{pmatrix} \quad (8)$$

Dove

- $N_{i,k}$ è la i -esima B-spline di ordine k
- $x_0 \cdots x_m$ sono le ascisse di valutazione
- $x_0 = t_{k-1}$, $x_m = t_{n+1}$ e \underline{t} è il vettore esteso dei nodi
- $n + 1 = \dim(\mathbb{S}_{m,\tau})$

I dati sono contenuti nel vettore \underline{b} di dimensione $m \times 2$ (nel caso bidimensionale). Il vettore delle incognite \underline{x} equivale ai punti di controllo di de Boor, una volta trovati dobbiamo costruire una curva B-spline seguendo la definizione:

Definizione 2.2 (Curva B-Spline).

$$\underline{X}(t) = \sum_{i=0}^n x_i N_{i,k}(t) \quad (9)$$

con $t \in [t_{k-1}, t_{n+1}]$

3 Esempi

Iniziamo a vedere qualche esempio di approssimazione di funzione su dati generati casualmente. Gli esempi sono presi dal [Notebook Jupyter](#) della repository.

3.1 Approssimazione di una retta

Mostriamo inizialmente l'esempio più semplice, ovvero l'approssimazione di una retta. Cominciamo importando le librerie necessarie e creando una base B-Spline e una base gerarchica.

Listing 1: Dichiarazione della base

```

1
2 from Curve.Fitting import Model
3 from HB_Spline import HB_Spline
4 from B_Spline import B_Spline
5 import numpy as np
6 from matplotlib import pyplot as plt
7
8 np.random.seed(1304)
9
10 base = B_Spline(
11     knots=np.linspace(0,10,5+1),
12     order=3
13 )
14
15 hb = HB_Spline(base)

```

Nell'esempio è stata creata una base di ordine 3 con nodi uniformi. Il dominio dei nodi può essere arbitrario. In tutti gli esempi verrà fatto coincidere con il dominio dei dati solo per comodità nella rifinitura. Passiamo ora alla generazione dei dati. Per scopi di riproducibilità è stato impostato un seme. Per evitare problemi di dimensionalità il numero di dati equivale al numero di elementi nel vettore delle **ascisse di valutazione**. Un altro metodo potrebbe essere quello di scegliere in maniera equiprobabile dei dati da quelli generati.

Listing 2: Creazione e fit del modello

```

1 samples = np.shape(
2     base.compute_base().get_collocation_matrix()
3 )[1]
4
5 x = np.linspace(0, 10, samples)
6 y = x + np.random.normal(0, 1, samples)
7
8 data = np.matrix([x, y]).T

```

A questo punto possiamo creare il modello passando la base gerarchica (che non essendo rifinita equivale alla B-Spline madre) e i dati che abbiamo generato.

Listing 3: Plot dei risultati

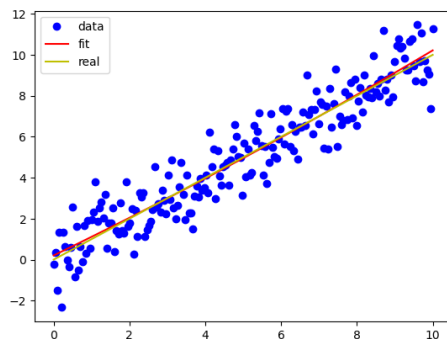
```

1 model = Model(
2     base=hb,
3     data=data
4 ).fit()
5
6 model.plot()
7 plt.plot(x, x, "y-", label="real")
8 plt.legend(loc="best")

```

Otteniamo l'output come mostrato in figura [1](#)

Figura 1: Approssimazione di una retta



3.2 Approssimare una somma di seni

Vediamo adesso l'approssimazione di una figura più complessa. Procediamo a dichiarare la base e generare i dati come mostrato nel listato 4.

Listing 4: Generazione somma di seni

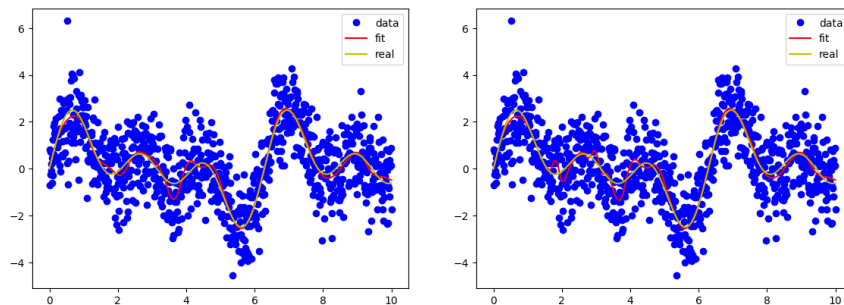
```
1 base = B_Spline(  
2     knots=np.linspace(0,10,30+1),  
3     order=3  
4 )  
5  
6 hb = HB_Spline(base)  
7  
8 samples = np.shape(  
9     base.compute_base().get_collocation_matrix()  
10 ) [1]  
11  
12 x = np.linspace(0, 10, samples)  
13 y_real = np.sin(x) + np.sin(2 * x) + np.sin(3 * x)  
14 y = y_real + np.random.normal(0, 1, samples)  
15  
16 data = np.matrix([x, y]).T
```

Eseguendo il codice mostrato nel listato 5, otteniamo il grafico di output mostrato nella figura a sinistra della tabella 3.

Listing 5: Fit somma di seni

```
1 model = Model(  
2     base=hb,  
3     data=data  
4 ).fit()  
5  
6 model.plot()  
7 plt.plot(x, y_real, "y-", label="real")
```

Tabella 3: Fit della funzione $\sin(2x) + \sin(3x) + \varepsilon$.
Overfitting nella figura a destra in (2, 4).



8 `plt.legend(loc="best")`

Dalla figura a sinistra in tabella 3, possiamo notare che nell'intervallo (2, 4) non c'è un buon adattamento. Tuttavia se proviamo a raffinare, otteniamo un risultato peggiore. Eseguendo il listato 6 otteniamo la figura a destra in tabella 3

Listing 6: Overfitting nella somma di seni

```
1 model.refine((2,4))
2 model.plot()
3 plt.plot(x, y_real, "y-", label="real")
4 plt.legend(loc="best")
```

Osservazione. La curva che è in overfitting in figura ?? ha un **MSE** più basso rispetto alla curva che non è in overfitting in figura ??, infatti si ha un migliore adattamento ai dati, che però sono rumorosi, e ci si allontana dalla vera funzione generatrice $\sin(2x) + \sin(3x)$. I due MSE sono riportati in tabella ??.

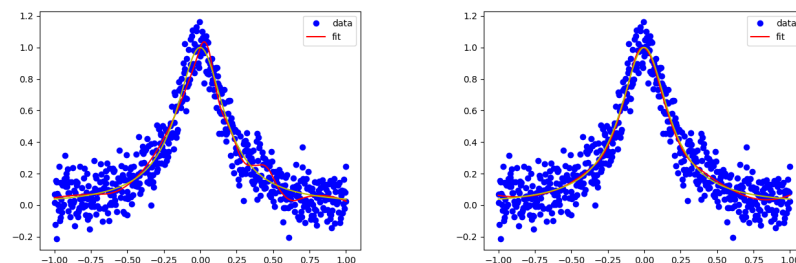
Overfitting	Non Overfitting
1.0197649870617647	1.027356972130468

3.3 La funzione di Runge

Abbiamo scelto di approssimare la funzione di Runge per vedere se si presenta il fenomeno di Runge.

Definizione 3.1 (Fenomeno di Runge). *Il fenomeno di Runge è un problema relativo all'interpolazione polinomiale su nodi equispaziati con polinomi di grado elevato. Esso consiste nell'aumento di ampiezza dell'errore in prossimità degli estremi dell'intervallo.*

Tabella 4: Rifinitura automatica(sinistra). Rifinitura manuale(destra)



Nel nostro caso abbiamo nodi equidistanti, ma grado basso. Non ci aspettiamo il verificarsi di tale fenomeno.

Mostriamo adesso i plot delle approssimazioni di tale funzione con rifinitura a mano negli intervalli $(-0.25, 0.25)$ e successivamente in $(-0.1, 0.1)$ e con rifinitura automatica basandosi su MSE per la scelta degli intervalli da rifinire. I risultati sono mostrati nella tabella 4. In tabella ?? sono rappresentati gli MSE per entrambe le versioni. Con il metodo manuale si ottiene un MSE minore e un maggior adattamento visivo alla vera curva.

Automatico	Manuale
0.010646661450860125	0.00981932028930905

Tabella 5: MSE per l'approssimazione della funzione di Runge

4 Counclusionone

Nella teoria dei modelli statistici non parametrici, le B-spline non vengono utilizzate per via del grande incremento di nodi e di basi che si vanno a creare utilizzando una griglia Tensore-Prodotta. Hanno quindi ripiegato sulle P-spline. Le HB-spline risolvono in maniera più efficiente lo stesso problema, tuttavia si perde la partizione dell'unità. Questa proprietà è importante anche per evitare overfitting prematuri, quindi utilizzare le versioni troncate delle HB-spline, chiamate THB-spline, potrebbe risolvere i problemi di overfitting, visti negli esempi. Altra cosa da rivedere è il criterio per la rifinitura automatica. Avendo scelto come *funzione di loss* MSE, ed essendo esso una norma \mathbf{L}^2 , ciò che minimizza tale norma è la media. Proponiamo quindi di usare i quattro punti con maggiore contributo per MSE e usare come range di rifinitura il punto medio tra i primi 2 e il punto medio tra gli ultimi due. Le norme \mathbf{L}^0 e \mathbf{L}^1 , minimizzate rispettivamente da moda e mediana, non sono usate in quasi nessun campo applicativo.

Viene utilizzata in presenza di outliers la norma \mathbf{L}^1 , ma richiede molti più dati per avere la stessa precisione della norma \mathbf{L}^2 .

Elenco delle figure

1	Approssimazione di una retta	6
---	--	---

Elenco delle tabelle

1	Dati generati.	2
2	Funzioni generatrici utilizzate: $y = x + \varepsilon$, $\sin 2x + \sin 3x + \varepsilon$, $\frac{1}{1+25x^2} + \varepsilon$ ($\varepsilon \sim N(0, 0.1)$)	2
3	Fit della funzione $\sin(2x) + \sin(3x) + \varepsilon$. Overfitting nella figura a destra in (2, 4).	7
4	Rifinitura automatica(sinistra). Rifinitura manuale(destra) . . .	8
5	MSE per l'approssimazione della funzione di Runge	8

Listings

1	Dichiarazione della base	5
2	Creazione e fit del modello	5
3	Plot dei risultati	5
4	Generazione somma di seni	6
5	Fit somma di seni	6
6	Overfitting nella somma di seni	7