

Data Smoothing - Oefening 5

Ruben Van Assche

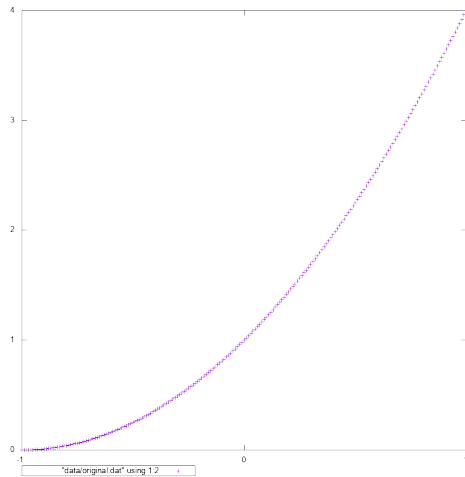
1 december 2017

1 Software

Doorheen deze opgave heb ik gebruik gemaakt van GSL¹. Alle functies in deze opgave gebruikt komen dan ook uit de `gsl_rng`, `gsl_linalg`, `gsl_sf_legendre` workspace.

2 Opgave

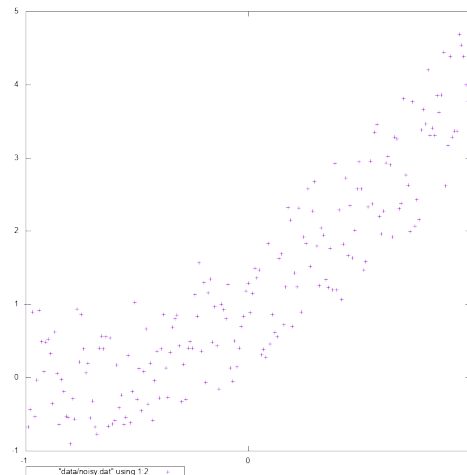
Het doel van deze opgave bestond er in om het polynomiale kleinste kwadraten model van graad 2 te berekenen. De x punten worden gegeven in het interval $[-1, 1]$ en worden voorgesteld door volgende functie : $x_i = -1 + \frac{i}{100}$ met $i = 0, \dots, 200$. De y punten door volgende functie : $y(x) = 1 + 2x + x^2$. Dit levert volgende plot op :



Een deel van de opgave was om ruis toe te voegen aan de datapunten. Deze ruis moest liggen in het interval $[-1, 1]$ en uniform verdeeld zijn. De functie die GSL hiervoor voorziet is `gsl_rng_uniform`, deze levert een waarde r op in interval $[0, 1)$. Het

¹<https://www.gnu.org/software/gsl/>

eerste wat gebeurt is het herschalen van r naar het interval $[-1, 1]$ d.m.v. volgende vergelijking : $r * 2 - 1$. Als random number generator koos ik voor `gsl_rng_mt19937`. Wanneer we de ruis optellen bij de gegenereerde punten bekomen we volgende plot:



Letterlijk een "wolk" van datapunten.

3 Opstellen kleinste kwadraten model

Zoals in de cursus wordt aangegeven zullen we bij het kleinste kwadraten model de l_2 norm van het residu ($r = y - A\lambda$) proberen te minimaliseren. Wanneer dit wordt uitgevoerd bij matrices bekomen we volgende formule:

$$(A^T A)\gamma = A^T y$$

Dit lineair systeem is zeer slecht geconditioneerd, dus het oplossen ervan zal geen betrouwbare oplossing geven. Een oplossing bestaat erin om gebruik

te maken van QR factorisatie, hierbij zal een decompositie van A in Q en R plaatsvinden. Waardoor d.m.v. volgende functie de minimale l_2 norm van het residu berekend kan worden:

$$\begin{aligned} \min \|Ax - y\|_2 &= \min \|Q^T Ax - Q^T y\|_2 \\ &= \sqrt{\sum_{i=n+1}^m (Q^T y)_i^2} \end{aligned}$$

GSL voorziet voor de decompositie de `gsl_linalg_QR_decomp` functie en voor het oplossen van het stelsel waarbij de l_2 norm van het residu wordt geminimaliseerd de `gsl_linalg_QR_lassolve` functie. Het polynomiale kleinste kwadraten model ziet er dan als volgt uit :

$$1 + \lambda_1 * x + \lambda_2 * x^2$$

Een kleine opmerking die gemaakt moet worden: in de cursus wordt gebruik gemaakt van Givens rotations voor de QR factorisatie. De functie `gsl_linalg_QR_decomp` in GSL maakt gebruik van Householder rotations. Ik heb alle libraries (Numerical Recipes, GAMS, Netlib) doorzocht naar een functie waarbij de QR factorisatie wordt uitgevoerd met een Givens rotation maar kon deze helaas niet vinden.

3.1 Originele punten

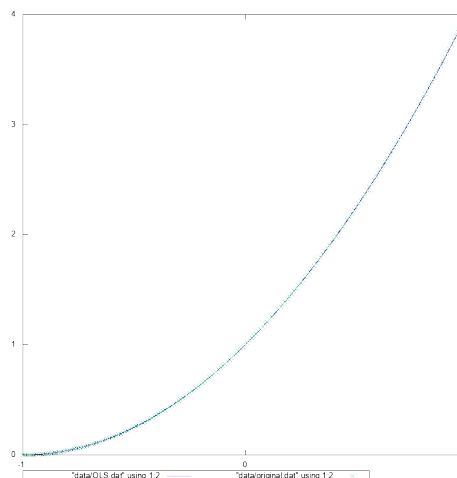
Als eerste bekijken we de originele punten (zonder ruis). Hiervoor gebruiken we het volgende model:

$$A\lambda = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{200} & x_{200}^2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_{200} \end{bmatrix}$$

Dit levert dan volgende vergelijking op:

$$1 + 2x + 1x^2$$

Wat natuurlijk exact hetzelfde is zoals gegeven, de l_2 norm van het residu is 7.26249e-15 wat natuurlijk te verwachten is gezien de functie hetzelfde is als de gegeven functie. Hetzelfde geldt voor de l_2 norm van de error welke 4.43742e-15 is. Een plot:



3.2 Noisy Punten

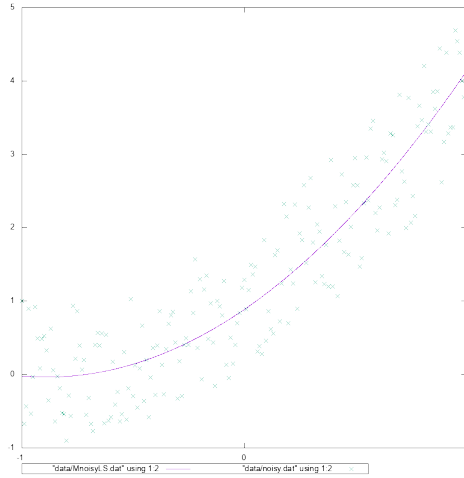
Laat ons opnieuw het model toepassen met als verschil dat deze keer gebruik wordt gemaakt van de punten y met ruis:

$$A\lambda = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{200} & x_{200}^2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_{200} \end{bmatrix}$$

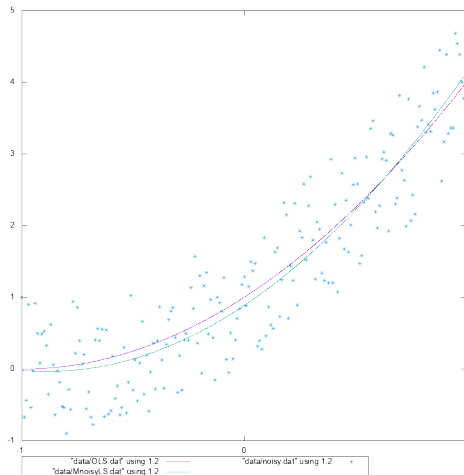
Dit levert een verschillende vergelijking op:

$$0.885437 + 2.07339x + 1.1688x^2$$

Wanneer we nu naar de l_2 norm van het residu kijken bekomen we 7.79653. Hierbij hebben we als y waarde in $r = y - A\lambda$ gebruik gemaakt van de punten zonder ruis, dit omdat we deze punten willen benaderen met het model. En niet de punten met ruis. De residu vector volledig staat achteraan. Zoals verwacht is natuurlijk de l_2 norm van de error groter geworden en is deze hier 1.24651. Wanneer dit wordt geplot zien we dat de functie mooi doorheen de wolk van punten gaat en dus probeert de l_2 norm van het residu te minimaliseren.



Als laatste is het misschien interessant om zowel de originele als de met ruis least squares approximation te plotten op één afbeelding:



3.3 Chebyshev Noisy Punten

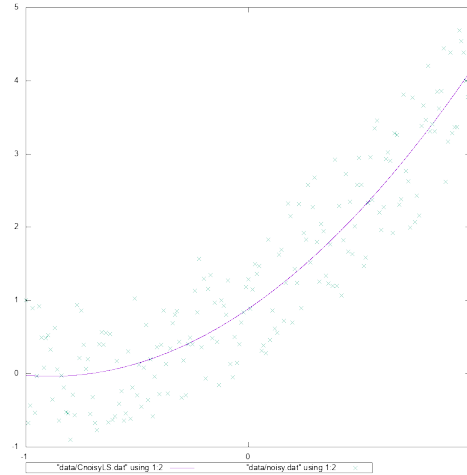
Wanneer we het conditiegetal van de matrix hierboven berekenen komt dit uit op 3.73049. Is er een mogelijkheid om dit kleiner te krijgen? Laat ons eens wisselen van basis! Wanneer we kiezen voor een Chebyshev basis kiezen ziet het model er als volgt uit:

$$A\lambda = \begin{bmatrix} 1 & T_1(x_0) & T_2(x_0^2) \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & T_1(x_{200}) & T_2(x_{200}^2) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_{200} \end{bmatrix}$$

Dit levert volgend polynoom op:

$$1.46984 + 2.07339x + 0.584399 * (2x^2 - 1)$$

Wat opvalt: het residu 7.79653 blijft hetzelfde als ook de error 1.24651. Dit zien we dan ook in de plot:



Wanneer er met meer precisie resultaten worden bekeken, zien we dat er minimale verschillen zijn tussen de residu's en errors. Het conditiegetal ligt wel iets lager : 1.91876.

3.4 Legendre Noisy Punten

Als laatste kijken we nog eens naar een model met de Legendre basis:

$$A\lambda = \begin{bmatrix} 1 & L_1(x_0) & L_2(x_0^2) \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & L_1(x_{200}) & L_2(x_{200}^2) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_{200} \end{bmatrix}$$

We verkrijgen het volgende polynoom:

$$1.27504 + 2.07339x + 0.779198 * 0.5 * (3x^2 - 1)$$

Het residu en de error blijven opnieuw hetzelfde (met minimale verschillen). Het conditiegetal is 2.21408. Wanneer we alle benaderingen op één afbeelding plotten zien we dat er maar 2 functies lopen: de originele functie met punten zonder ruis en dan de monomial, chebyshev en legendre basis beandering:

0.0887533,	0.087226,	0.0856649,	0.0840701,	0.0887533,	0.087226,	0.0856649,	0.0840701,
0.0824415,	0.0807792,	0.0790831,	0.0773533,	0.0824415,	0.0807792,	0.0790831,	0.0773533,
0.0755897,	0.0737923,	0.0719612,	0.0700963,	0.0755897,	0.0737923,	0.0719612,	0.0700963,
0.0681976,	0.0662652,	0.064299,	0.0622991,	0.0681976,	0.0662652,	0.064299,	0.0622991,
0.0602654,	0.058198,	0.0560968,	0.0539618,	0.0602654,	0.058198,	0.0560968,	0.0539618,
0.0517931,	0.0495906,	0.0473544,	0.0450844,	0.0517931,	0.0495906,	0.0473544,	0.0450844,
0.0427806,	0.0404431,	0.0380718,	0.0356667,	0.0427806,	0.0404431,	0.0380718,	0.0356667,
0.0332279,	0.0307554,	0.0282491,	0.025709,	0.0332279,	0.0307554,	0.0282491,	0.025709,
0.0231352,	0.0205276,	0.0178862,	0.0152111,	0.0231352,	0.0205276,	0.0178862,	0.0152111,
0.0125022,	0.00975958,	0.00698318,	0.00417303,	0.0125022,	0.00975958,	0.00698318,	0.00417303,
0.00132912,	-0.00154855,	-0.00445999,	-0.00740518,	0.00132912,	-0.00154855,	-0.00445999,	-0.00740518,
-0.0103841,	-0.0133968,	-0.0164433,	-0.0195235,	-0.0103841,	-0.0133968,	-0.0164433,	-0.0195235,
-0.0226375,	-0.0257853,	-0.0289668,	-0.032182,	-0.0226375,	-0.0257853,	-0.0289668,	-0.032182,
-0.0354311,	-0.0387139,	-0.0420304,	-0.0453807,	-0.0354311,	-0.0387139,	-0.0420304,	-0.0453807,
-0.0487648,	-0.0521826,	-0.0556342,	-0.0591195,	-0.0487648,	-0.0521826,	-0.0556342,	-0.0591195,
-0.0626386,	-0.0661915,	-0.0697781,	-0.0733985,	-0.0626386,	-0.0661915,	-0.0697781,	-0.0733985,
-0.0770526,	-0.0807405,	-0.0844622,	-0.0882176,	-0.0770526,	-0.0807405,	-0.0844622,	-0.0882176,
-0.0920068,	-0.0958297,	-0.0996864,	-0.103577,	-0.0920068,	-0.0958297,	-0.0996864,	-0.103577,
-0.107501,	-0.111459,	-0.115451,	-0.119476,	-0.107501,	-0.111459,	-0.115451,	-0.119476,
0.123536,	-0.127629			0.123536,	-0.127629		

4.3 Noisy Chebyshev Punten

0.0191613, 0.0217864, 0.0243778, 0.0269354,
0.0294592, 0.0319493, 0.0344056, 0.0368281,
0.0392169, 0.041572, 0.0438933, 0.0461808,
0.0484345, 0.0506545, 0.0528408, 0.0549933,
0.057112, 0.0591969, 0.0612481, 0.0632656,
0.0652493, 0.0671992, 0.0691154, 0.0709978,
0.0728464, 0.0746613, 0.0764424, 0.0781898,
0.0799034, 0.0815833, 0.0832293, 0.0848417,
0.0864202, 0.0879651, 0.0894761, 0.0909534,
0.0923969, 0.0938067, 0.0951827, 0.096525,
0.0978335, 0.0991082, 0.100349, 0.101556, 0.10273,
0.10387, 0.104975, 0.106048, 0.107086, 0.108091,
0.109062, 0.109999, 0.110902, 0.111772, 0.112608,
0.11341, 0.114178, 0.114913, 0.115614, 0.116281,
0.116914, 0.117513, 0.118079, 0.118611, 0.11911,
0.119574, 0.120005, 0.120402, 0.120765, 0.121094,
0.12139, 0.121652, 0.12188, 0.122075, 0.122235,
0.122362, 0.122456, 0.122515, 0.122541, 0.122532,
0.122491, 0.122415, 0.122306, 0.122162, 0.121985,
0.121775, 0.12153, 0.121252, 0.12094, 0.120594,
0.120215, 0.119802, 0.119355, 0.118874, 0.118359,
0.117811, 0.117229, 0.116613, 0.115964, 0.115281,
0.114563, 0.113813, 0.113028, 0.11221, 0.111358,
0.110472, 0.109552, 0.108599, 0.107612, 0.106591,
0.105536, 0.104448, 0.103325, 0.102169, 0.10098,
0.0997563, 0.0984991, 0.0972081, 0.0958834,
0.0945249, 0.0931326, 0.0917066, 0.0902468,

4.4 Noisy Legendre Punten

0.0191613, 0.0217864, 0.0243778, 0.0269354,
0.0294592, 0.0319493, 0.0344056, 0.0368281,
0.0392169, 0.041572, 0.0438933, 0.0461808,
0.0484345, 0.0506545, 0.0528408, 0.0549933,
0.057112, 0.0591969, 0.0612481, 0.0632656,
0.0652493, 0.0671992, 0.0691154, 0.0709978,
0.0728464, 0.0746613, 0.0764424, 0.0781898,
0.0799034, 0.0815833, 0.0832293, 0.0848417,
0.0864202, 0.0879651, 0.0894761, 0.0909534,
0.0923969, 0.0938067, 0.0951827, 0.096525,
0.0978335, 0.0991082, 0.100349, 0.101556, 0.10273,
0.10387, 0.104975, 0.106048, 0.107086, 0.108091,
0.109062, 0.109999, 0.110902, 0.111772, 0.112608,
0.11341, 0.114178, 0.114913, 0.115614, 0.116281,
0.116914, 0.117513, 0.118079, 0.118611, 0.11911,
0.119574, 0.120005, 0.120402, 0.120765, 0.121094,
0.12139, 0.121652, 0.12188, 0.122075, 0.122235,
0.122362, 0.122456, 0.122515, 0.122541, 0.122532,
0.122491, 0.122415, 0.122306, 0.122162, 0.121985,
0.121775, 0.12153, 0.121252, 0.12094, 0.120594,
0.120215, 0.119802, 0.119355, 0.118874, 0.118359,
0.117811, 0.117229, 0.116613, 0.115964, 0.115281,
0.114563, 0.113813, 0.113028, 0.11221, 0.111358,
0.110472, 0.109552, 0.108599, 0.107612, 0.106591,
0.105536, 0.104448, 0.103325, 0.102169, 0.10098,
0.0997563, 0.0984991, 0.0972081, 0.0958834,
0.0945249, 0.0931326, 0.0917066, 0.0902468,

0.0887533, 0.087226, 0.0856649, 0.0840701,
 0.0824415, 0.0807792, 0.0790831, 0.0773533,
 0.0755897, 0.0737923, 0.0719612, 0.0700963,
 0.0681976, 0.0662652, 0.064299, 0.0622991,
 0.0602654, 0.058198, 0.0560968, 0.0539618,
 0.0517931, 0.0495906, 0.0473544, 0.0450844,
 0.0427806, 0.0404431, 0.0380718, 0.0356667,
 0.0332279, 0.0307554, 0.0282491, 0.025709,
 0.0231352, 0.0205276, 0.0178862, 0.0152111,
 0.0125022, 0.00975958, 0.00698318, 0.00417303,
 0.00132912, -0.00154855, -0.00445999, -0.00740518,
 -0.0103841, -0.0133968, -0.0164433, -0.0195235,
 -0.0226375, -0.0257853, -0.0289668, -0.032182,
 -0.0354311, -0.0387139, -0.0420304, -0.0453807,
 -0.0487648, -0.0521826, -0.0556342, -0.0591195,
 -0.0626386, -0.0661915, -0.0697781, -0.0733985,
 -0.0770526, -0.0807405, -0.0844622, -0.0882176,
 -0.0920068, -0.0958297, -0.0996864, -0.103577,
 -0.107501, -0.111459, -0.115451, -0.119476, -
 0.123536, -0.127629