ภาคผนวก ค

การประมาณแบบกำลังสองน้อยที่สุดด้วยฟังก์ชันตั้งฉาก (ศิริพงษ์ ศรีพิพัฒน์, 2528)

ในที่นี้เราจะพิจารณาเฉพาะการประมาณแบบกำลังสองน้อยที่สุดในระบบไม่ต่อเนื่อง ผลของหลักเกณฑ์แบบกำลังสองน้อยที่สุด ทำให้ได้ระบบสมการนอร์มอล (normal function) ซึ่งก็จะพบเสมอว่าเมตริกซ์ของสัมประสิทธิ์ของระบบสมการมีลักษณะที่ทำให้เกิดภาวะไม่เหมาะสม ปัญหาเช่นนี้จะหมดไปถ้าใช้วิธีการประมาณแบบกำลังสองน้อยที่สุดด้วยฟังก์ชันตั้งฉาก

การประมาณแบบกำลังสองน้อยที่สุดในระบบไม่ต่อเนื่องของข้อมูลจำนวน n+1 ข้อมูลซึ่งมีค่าเป็น $f_0, f_1, \ldots, f_n$ คือการเลือกค่าของตัวแปรเสริม $a_0, a_1, \ldots, a_m$ ที่ทำให้

$$E(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{r=0}^{n} e_r^2 = \sum_{r=0}^{n} [f_r - F(x_r; a_0, a_1, \ldots a_m)]^2 \qquad (ค.1)$$

มีค่าน้อยที่สุด โดยที่ m<n

$F(x_r; a_0, a_1, \ldots, a_m)$ เป็นฟังก์ชันประมาณข้อมูล f_r

$E(a_0, a_1, \ldots, a_m)$ เป็นผลรวมค่ายกกำลังสองของความคลาดเคลื่อน $(f - F)$

โดยที่ $F(x)$ มีรูปแบบดังนี้

$$F(x) = a_0\phi_0(x) + a_1\phi_1(x) + \ldots + a_m\phi_m(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k \phi_k(x) \qquad (ค.2)$$

เพราะฉะนั้นค่าที่ต้องการคือค่าตัวแปรที่ทำให้

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = 0 \qquad , k = 0, 1, \ldots, m$$

จาก (ค.1) และ (ค.2)

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = -2\sum_{r=0}^{n}[f_r - F(x_r; a_0, a_1, ..., a_m)]\phi_k(x_k)$$

(ปราโมทย์ เดชะอำไพ, 2544)

ดังนั้นตัวแปรเสริมที่ต้องการคือ $a_0^*, a_1^*, ..., a_m^*$ ที่ทำให้

$$\sum_{r=0}^{n}[f_r - a_0^*\phi_0(x_r) - a_1^*\phi_1(x_r) - ... - a_m^*\phi_m(x_r)]\phi_k(x_k) = 0$$

โดยที่ k = 0, 1, …, m

จัดรูปใหม่ได้เป็น

$$a_0^*\sum_{r=0}^{n}\phi_k(x_r)\phi_0(x_r) + ... + a_m^*\sum_{r=0}^{n}\phi_k(x_r)\phi_m(x_r) = \sum_{r=0}^{n}\phi_k(x_r)f_r \qquad (ค.3)$$

จะได้ระบบสมการเป็น m+1 สมการ เรียกว่า ระบบสมการนอร์มอล และระบบสมการจะให้ผลเฉลย $a_0^*, a_1^*, ..., a_m^*$ ชุดเดียวไม่ว่าจะเลือกฟังก์ชันฐาน $\phi_k(x)$ เป็นอย่างไร

แม้ว่าระบบสมการนอร์มอล จะเป็นระบบสมการพีชคณิตเชิงเส้นที่อาจหาผลเฉลยได้โดยง่าย แต่ก็พบเสมอว่าแก้สมการของระบบสมการนอร์มอลอาจจะมีปัญหาค่าไม่เหมาะสม ปัญหาเช่นนี้จะหมดไปถ้าหากว่าฟังก์ชันมูลฐาน $\phi_k(x)$ ต่าง ๆ เป็นฟังก์ชันตั้งฉาก ซึ่งมีคุณสมบัติดังนี้

$$\sum_{r=0}^{n}\phi_j(x_r)\phi_k(x_r) = 0 \qquad , j \neq k \qquad (ค.4)$$

รูปแบบสมการ (ค.3) จะเปลี่ยนเป็น

$$\sum_{r=0}^{n}[\phi_k(x_r)]^2 a_k^* = \sum_{r=0}^{n}\phi_k(x_r)f_r \qquad , k = 0,1,...,m \qquad (ค.5)$$

ซึ่งสามารถหาค่าตัวแปรเสริม a_k^* ได้ทันที อย่างไรก็ดี งานที่ตามมาคือการหาฟังก์ชันตั้งฉาก $\phi_k(x)$

บทนิยาม ค-1 ผลคูณภายในของฟังก์ชัน *p(x)* และ *q(x)* ที่มีการถ่วงนำหนักในช่วง [a,b] ในระบบไม่ต่อเนื่องซึ่งเขียนแทนด้วย *<p,q>* คือ

$$< p,q >= \sum_{r=0}^{n} p(x_r)q(x_r)p(x_r) \qquad \text{(ค.6)}$$

โดยที่ฟังก์ชันถ่วงน้ำหนัก (weight function) *w(x)* มีค่าไม่เป็นลบในช่วง (a,b) และมี เงื่อนไขคือ ในระบบไม่ต่อเนื่อง จุดบนตาราง $x_0, x_1, \ldots, x_n$ อยู่ในช่วง [a,b]

จากนิยามผลคูณภายในเราสามารถพิสูจน์คุณสมบัติต่าง ๆ ต่อไปนี้ได้ คือ สำหรับฟังก์ชัน p(x), q(x), r(x) ที่ต่อเนื่องในช่วง [a,b] และค่าคงที่ α ใด ๆ

1. $<p,q> = <q,p>$
2. $<\alpha p,q> = \alpha <p,q>$
3. $<p,q+r> = <p,q> + <p,r>$

และเราสามารถกำหนดบทนิยามสำหรับฟังก์ชันตั้งฉากโดยทั่วไปได้ดังนี้

บทนิยาม ค-2 ฟังก์ชัน *p(x)* และ *q(x)* ตั้งฉากซึ่งกันและกันโดยมีฟังก์ชันถ่วงนำหนัก *w(x)* ในช่วง [a,b] ก็ต่อเมื่อ $<p,q> = 0$

ฟังก์ชันตั้งฉากที่กำหนดโดย (ค.4) ก็สอดคล้องกับบทนิยาม ค-2 นี้ โดยมี *w(x)* =1 ต่อไปในการพิจารณาฟังก์ชันตั้งฉากถ้าไม่มีการกำหนดฟังก์ชันถ่วงน้ำหนัก ให้ถือว่ามีค่าเป็น 1

ปัญหาการประมาณแบบกำลังสองน้อยที่สุด โดยใช้รูปแบบการคูณภายในมีดังนี้

f(x) เป็นฟังก์ชันที่กำหนดให้ในช่วง [a,b]

$F(x) = F(x; a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{k=0}^{m} a_k \phi_k(x)$ เป็นฟังก์ชันที่ใช้ประมาณ f(x)

$e(x) = f(x) - F(x)$

ต้องการหา $a_0, a_1, \ldots, a_m$ ที่ทำให้

$$E(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \; < e,e > \; = \; < f-F, f-F > \qquad \text{มีค่าน้อยที่สุด}$$

จากบทนิยาม ค-1 จะได้ $<f-F,f-F> = <f,f> - 2<f,f> + <F,F>$

และ f ไม่ขึ้นกับ a_k ดังนั้น

$$\frac{\partial E}{\partial a_k} = -2 < f, \frac{\partial F}{\partial a_k} > +2 < F, \frac{\partial F}{\partial a_k} >$$

$$= -2 < f, \phi_k > +2 < F, \phi_k > \qquad , k = 0,1,...,m$$

ผลเฉลยที่ต้องการคือ $a_0^*, a_1^*, ..., a_m^*$ ที่ทำให้

$$<F, \phi_k> = <f, \phi_k> \qquad , \quad k=0,1,...,m$$

ซึ่งก็คือระบบสมการนอร์มอล

$$< \phi_0, \phi_k > a_0^* + < \phi_{10}, \phi_k > a_1^* + < \phi_{m0}, \phi_k > a_m^* =< f, \phi_k > \qquad (ค.7)$$

$$k = 0,1,...,m$$

ถ้า $\phi_0, \phi_1, ..., \phi_m$ เป็นฟังก์ชันตั้งฉากซึ่งกันและกัน นั่นคือ

$$<\phi_j, \phi_k> = 0 \quad , \qquad j \neq k$$

ระบบสมการ (ค.7) จะเปลี่ยนเป็น

$$< \phi_k, \phi_k > a_k^* =< f, \phi_k >$$

ทำให้ได้ $$a_k^* = \frac{< f, \phi_k >}{A_k} \qquad , \quad k = 0,1,...,m \qquad (ค.8)$$

โดยมี $A_k = <\phi_k, \phi_k>$

ฟังก์ชันที่ต้องการคือ

$$F(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k \phi_k(x) \qquad (ค.9)$$

ในระบบไม่ต่อเนื่อง $$a_k^* = \frac{\sum_{r=0}^{n} f(x_r)\phi(x_r)}{\sum_{r=0}^{n} [\phi_k(x_r)]^2} \qquad k = 0,1,\ldots,m \qquad (ค.10)$$

วิธีการสร้างพหุนามตั้งฉาก การหาพหุนามตั้งฉาก $p_k(x)$ ในช่วงที่กำหนด เรามีกระบวนวิธีของกราม-ชมิตต์ (Gram - schmidt process) ที่ใช้สร้างพหุนามตั้งฉาก ตั้งแต่ดีกรีศูนย์ และเพิ่มดีกรีของพหุนามทีละหนึ่งเรื่อยไป แต่ในทางปฏิบัติเราพบว่าการสร้างพหุนามตั้งฉากโดยกระบวนวิธีนี้มีปริมาณงานและความยุ่งยากมาก จึงได้พยายามลดขั้นตอนวิธีด้วยการใช้ความสัมพันธ์เวียนบังเกิดที่เชื่อมโยงระหว่างพหุนามที่มีดีกรีเรียงกันสามพหุนาม และมีผลซึ่งสรุปได้ดังนี้

กำหนดให้ $p_k(x)$ เป็นพหุนามตั้งฉากดีกรี k , k = 0, 1, …, m ที่มีสัมประสิทธิ์ของ x^k เป็นหนึ่ง

เราจะได้ $$p_0(x) = 1$$
$$p_1(x) = (x-B_0)\, p_0(x)$$

และ $$p_{k+1}(x) = (x-B_k)\, p_k(x) - C_k\, p_{k-1}(x) \qquad (ค.11)$$
$$k = 1, 2, \ldots, m-1$$

โดยมี $$B_k = \frac{< xp_k, p_k >}{A_k} \qquad ,k = 0,1,\ldots,m$$

และ $$C_k = \frac{A_k}{A_{k-1}} \qquad ,k = 1,2,\ldots,m$$

ส่วน A_k ก็คือ $A_k = <p_k,p_k>$, $k = 0, 1, \ldots, m$