Zbornik gozdarstva in lesarstva, Ljubljana, 28, 1986, str. 5—16

Oxf. 561-015.5
Math. Subj. Class. (1980) 92A90

Izvleček:

CEDILNIK, A.:
OPTIMALNA APROKSIMACIJA RASTNIH FUNKCIJ

V sestavku so izpeljane obstoj, enoličnost in metoda določevanja točkovne rastne funkcije, za katero je vsota kvadratov odklonov od danih podatkov minimalna.

Abstract:

CEDILNIK, A.:
OPTIMAL APPROXIMATION OF GROWTH FUNCTIONS

In the article we deduce the existence, the uniqueness and a method of determination of a pointwise growth function, for which the sum of squares of declination to a given data is minimal.

Dr. Anton CEDILNIK, dipl. mat., docent
Biotehniška fakulteta, VTOZD za gozdarstvo
61000 Ljubljana, Večna pot 83, YU

KAZALO

1. UVOD

Osnovni problem je znan: dani tabeli $(x_k, y_k)_{k=1,\ldots,N}$ iščemo rastno funkcijo, ki se točkam te tabele najbolj prilega (v tem članku se bomo pri merilu za najboljše prilagajanje omejili na princip najmanjših kvadratov). V ta namen navadno izberemo kakšno analitično funkcijo z nekaj spremenljivimi parametri, te pa potem določimo z običajnimi metodami.

Ob tem postopku imamo lahko vsaj tri ugovore:

1. Če izvzamemo nekaj šibkih poskusov določitve biološko utemeljene rastne funkcije (npr. Backmann, Poletaev), uporabljamo za aproksimiranje rasti pač funkcije z ugodnimi matematičnimi lastnostmi za tehniko prilagajanja. V kakšni meri pa potem taka funkcija opisuje, recimo, rast drevesa in v kakšni le samo sebe, je vprašanje.
2. Analitična funkcija ima lastnost, da je njen potek v celoti določen že s potekom na kakršnem koli poljubno majhnem intervalu. Če torej trdimo, da rast neke količine podaja analitična funkcija, v resnici trdimo, da ta količina raste popolnoma neodvisno od zunanjih vplivov, da je torej izključno genetsko določena. Pri drevesih (rast višine, debeline, temeljnice, lesne mase itd.) je taka trditev brez dvoma napačna.
3. Povrhu vsega pa imamo na razpolago numerične metode, ki nam neposredno iz tabelarično podane funkcije čisto zadovoljivo izločijo zahtevane rezultate, če je funkcija le tabelirana dovolj nagosto (pri drevesih recimo za vsako leto). Zaradi tega analitičnost rastne funkcije pri obravnavi rasti ni tako pomembna prednost, kot se na prvi pogled zdi.

Zato je smiselno iskati tabelarično funkcijo, ki se čim bolj prilagaja danim podatkom, torej funkcijo, ki je določena le pri tistih vrednostih neodvisne spremenljivke, kjer so podane tudi empirično dobljene vrednosti odvisne spremenljivke.

V nadaljevanju bomo pokazali še na eno pomembno dejstvo, ki tabelarični funkciji daje prednost pred analitično. Dokazali bomo, da za kakršne koli podatke vedno obstaja ena in ena sama tabelarično podana rastna funkcija, ki ima od vseh rastnih funkcij do danih točk najmanjšo vsoto kvadratov odklonov. Drugače povedano — vedno obstaja najboljša, in to ena sama, aproksimacija s tabelarično funkcijo.

Da ta izrek v splošnem ne velja za analitične funkcije, lahko zelo preprosto preverimo. Recimo, da imamo take podatke:

X	Y
0	0
1	0
2	1

Tabela 1

Te točke že določajo rastno funkcijo in njena vsota kvadratov odklonov od podatkov je seveda 0. Če naj bo neka analitična rastna funkcija prav tako ustrezna, mora iti skozi vse tri točke. Ker mora biti naraščajoča, pa je med prvo in drugo točko nujno konstantna. Toda potem je konstantna povsod in ne gre skozi tretjo točko.

2. METODA NAJBOLJŠE APROKSIMACIJE

Podatke, vmesne rezultate in iskano aproksimacijo tabelirajmo tako kot v tabeli 2.

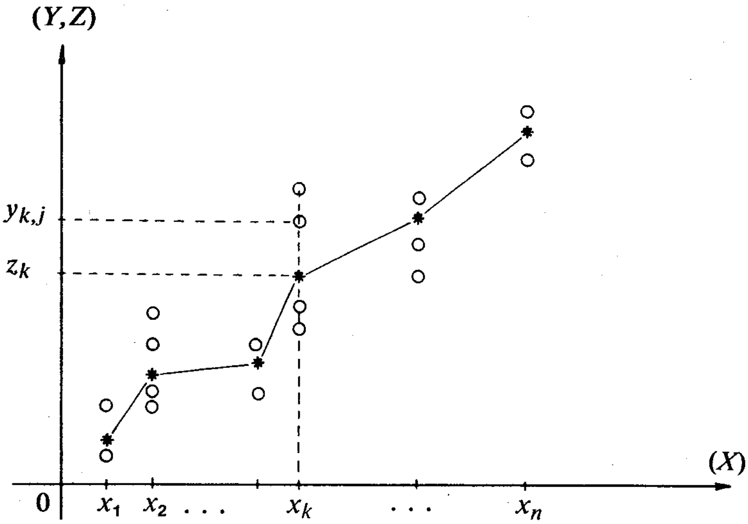
X	Y	S	Q	$\bar{Y}$	Z
x_1	$y_{1,1}, y_{1,2}, \ldots, y_{1,s_1}$	s_1	q_1	$\bar{y}_1$	z_1
x_2	$y_{2,1}, y_{2,2}, \ldots, y_{2,s_2}$	s_2	q_2	$\bar{y}_2$	z_2
.	...	.	.	.	.
.	...	.	.	.	.
.	...	.	.	.	.
x_n	$y_{n,1}, y_{n,2}, \ldots, y_{n,s_n}$	s_n	q_n	$\bar{y}_n$	z_n

Tabela 2

V stolpcu X so abscise podanih točk. Velja naj:

$x_1 < x_2 < \ldots < x_n \quad (n \geq 2)$

$y_{k,j}$ $(j = 1, \ldots, s_k)$ so izmerki količine Y pri abscisi x_k, $s_k \geq 1$. Števila $y_{k,j}$ so lahko poljubna realna števila, tudi enaka.



Slika 1: Ponazoritev podatkov in rezultata

$$q_k = \sum_{j=1}^{s_k} y_{k,j} \qquad (k=1,\ldots,n) \tag{1}$$

V stolpcu $\overline{Y}$ so povprečne ordinate točk z isto absciso:

$$\overline{y}_k = q_k/s_k \qquad (k=1,\ldots,n) \tag{2}$$

Stolpec Z pa predstavlja iskano aproksimacijo točk $(x_k, y_{k,j})$.
Ker je Z rastna funkcija, mora veljati:

$$0 \leq z_1 \leq z_2 \leq \ldots \leq z_n \tag{3}$$

Za funkcijo Z zahtevamo: Vsota kvadratov razlik med vrednostmi Z in Y pri istih x_k mora biti minimalna. Iščemo torej tak Z, da bo minimalen izraz:

$$D = \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{s_k} (z_k - y_{k,j})^2 = \sum_{k=1}^{n} [s_k z_k^2 - 2q_k z_k + \sum_{j=1}^{s_k} y_{k,j}^2] =$$

$$= 2f(Z) + \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{s_k} y_{k,j}^2 , \tag{4}$$

kjer je $f(Z) = - \sum_{k=1}^{n} q_k z_k + ½ \sum_{k=1}^{n} s_k z_k^2.$ (5)

Očitno je D minimalen natanko takrat, ko je minimalen izraz $f(Z)$. Nalogo zato oblikujmo takole — ob pogojih:

$$-z_1 + z_2 \geq 0\,,\quad -z_2 + z_3 \geq 0\,,\ldots,\quad -z_{n-1} + z_n \geq 0 \qquad (6)$$

$$z_1 \geq 0\,,\ z_2 \geq 0\,,\ldots,\ z_n \geq 0\,, \qquad (7)$$

je treba določiti Z tako, da bo $f(Z)$ minimalen.
Gre torej za primer kvadratičnega programiranja.

Opomba: osnovna dejstva o kvadratičnem programiranju in definicije oznak, ki jih tu uporabljamo, so v dodatku.

Naj bo:

$$Z = [z_1, z_2, \ldots, z_n]_{1xn} \qquad (8)$$

$$P = -[q_1, q_2, \ldots, q_n]_{1xn} = -Q \qquad (9)$$

$$R = \begin{bmatrix} s_1 & & & \emptyset \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ \emptyset & & & s_n \end{bmatrix}_{nxn} \qquad (10)$$

$$B = \emptyset_{mx1} \qquad (m = n-1) \qquad (11)$$

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \emptyset \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ \emptyset & & & -1 & 1 \end{bmatrix}_{mxn} \qquad (12)$$

Naslednje tri ugotovitve so očitne: R je simetrična pozitivno definitna matrika; rang$A = n - 1$ $(= m)$; vektor $Z = \emptyset$ je možna rešitev, ker zadošča pogojema $Z \geq \emptyset$ in $AZ^T \geq B$. Od tod pa sledi, da rešitev programa obstaja in je natanko ena. S tem smo dokazali:

IZREK 1. *Imejmo dane abscise X in ordinate Y točk v koordinatnem sistemu (tabela 2). Potem obstaja ena in ena sama nenegativna in naraščajoča funkcija $Z(X)$, ki po principu najmanjših kvadratov te točke najbolje aproksimira.*

V določenih primerih lahko funkcijo Z zelo hitro določimo. Recimo, da so podatki taki:

X	Y
x_1	y_1
x_2	y_2
.	.
.	.
.	.
x_n	y_n

Tabela 3

pri čemer je: $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$ in $0 \leq y_1 \leq y_2 \leq \ldots \leq y_n$.

Potem je seveda $Z = Y$, saj je tedaj vsota kvadratov odklonov enaka 0.

V splošnem pa moramo zadostiti Kuhn—Tuckerjevim pogojem:

$$Z \geq \emptyset; \quad U \geq \emptyset; \tag{13,14}$$

$$-Q + ZR - U^T A \geq \emptyset; \quad AZ^T \geq \emptyset; \tag{15,16}$$

$$(-Q + ZR - U^T A)Z^T = \emptyset; \quad U^T A Z^T = \emptyset. \tag{17,18}$$

Zapišimo te matrične relacije v skalarni obliki in hkrati nadomestimo matriko Lagrangeovih multiplikatorjev U z novo matriko $V = [v_i]$:

$$u_i = s_i v_i \qquad (i=1,\ldots,m) \tag{19}$$

Kuhn—Tuckerjevi pogoji:

$$0 \leq z_1 \leq z_2 \leq \ldots \leq z_n \tag{20}$$

$$v_i \geq 0 \quad (i=1,\ldots,m) \tag{21}$$

$$\begin{aligned} v_1 (z_2 - z_1) &= 0 \\ v_2 (z_3 - z_2) &= 0 \\ &\ldots \\ v_m(z_n - z_{n-1}) &= 0 \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} &z_1 - \overline{y}_1 + v_1 \geq 0 \\ &z_2 - \overline{y}_2 - s_1 v_1/s_2 + v_2 \geq 0 \\ &z_3 - \overline{y}_3 - s_2 v_2/s_3 + v_3 \geq 0 \\ &\ldots \\ &z_{n-1} - \overline{y}_{n-1} - s_{n-2} v_{n-2}/s_{n-1} + v_{n-1} \geq 0 \\ &z_n - \overline{y}_n - s_{n-1} v_{n-1}/s_n \geq 0 \end{aligned} \tag{23}$$

$$
\begin{aligned}
z_1(z_1 - \bar{y}_1 \qquad\qquad\quad + v_1) &= 0 \\
z_2(z_2 - \bar{y}_2 - s_1 v_1/s_2 + v_2) &= 0 \\
\dots \\
z_n(z_n - \bar{y}_n - s_{n-1} v_{n-1}/s_n) &= 0
\end{aligned}
\tag{24}
$$

V nekaterih primerih je ta sistem enačb in neenačb zelo preprosto rešljiv. Če recimo velja $0 \leq \bar{y}_1 \leq \bar{y}_2 \leq \dots \leq \bar{y}_n$, je rešitev kar $z_k = \bar{y}_k$ $(k=1,\dots,n)$ (ob tem je $v_i = 0$ $(i=1,\dots,m)$).

Oglejmo si reševanje pogojev nasplošno! Najprej pozabimo na zahtevo $z_k \geq 0$. Začetni približek naj bo $z_k = \bar{y}_k$ $(k=1,\dots,n)$, $v_i = 0$ $(i=1,\dots,m)$. Če je $z_k \leq z_{k+1}$ $(k=1,\dots, n-1)$, je v tem koraku problem že rešen. Pa recimo, da je $z_k > z_{k+1}$ za nek določen k, da pa je sicer $z_j \leq z_{j+1}$ za $j < k$. Potem je $v_j = 0$ za $j < k$ in $v_k > 0$. Ker pa je $v_k(z_{k+1} - z_k) = 0$ po (22), je nujno $z_{k+1} = z_k$. Sklepamo, da lahko v tem primeru kar združimo seriji podatkov $(y_{k,1},\dots,y_{k,s_k})$ in $(y_{k+1,1},\dots,y_{k+1,s_{k+1}})$ v eno samo s povprečjem.

$$\bar{y}_k' = (s_k\bar{y}_k + s_{k+1}\bar{y}_{k+1})/(s_k + s_{k+1}) \tag{25}$$

in $z_k' = z_{k+1}' = \bar{y}_k'$.

Pri tem je $v_k = \bar{y}_k - \bar{y}_k'$ in $s_k v_k / s_{k+1} = \bar{y}_k' - \bar{y}_{k+1}$. Seveda se pri tem lahko zgodi, da je $z_{k-1} > z_k'$ in je treba postopek tudi tu ponoviti. Podatke torej združujemo toliko časa, da je serija $(z_j)_{j=1,\dots,k}$ v celoti naraščajoča.

Na koncu tega postopka pridemo do rezultata $z_k = \bar{y}_k$ (ali $\bar{y}_k'$) $(k=1,\dots,n)$. Sedaj pa še premislimo, kaj storiti, če je za nek k : $z_k < 0$. V tem primeru bomo zahtevali $z_k = 0$, kajti brez težav lahko preverimo, da so Kuhn—Tuckerjevi pogoji v celoti izpolnjeni, če je $z_k = 0$ za $\bar{y}_k < 0$ in $z_k = \bar{y}_k$ za $\bar{y}_k \geq 0$, ter je $v_i = 0$ $(i=1,\dots,m)$.

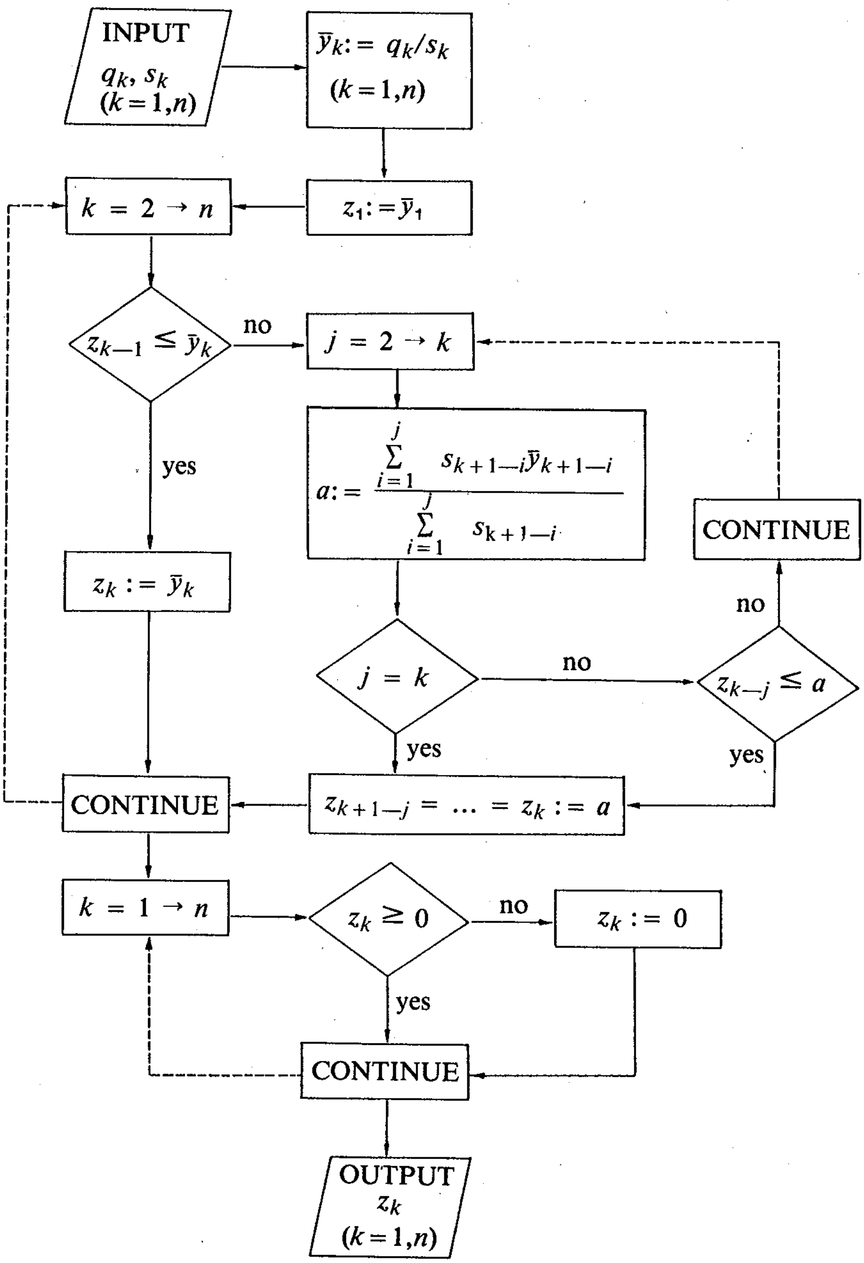
Nakazani algoritem je shematično zapisan na sliki 2.

3. DODATEK: KVADRATIČNO PROGRAMIRANJE

Naj bo $R = [r_{j,k}]_{nxn}$:

— simetrična matrika: $R^T = R$

— pozitivno definitna matrika: $\forall Z_{1xn}:(Z \neq \emptyset \Rightarrow ZRZ^T > \emptyset)$



Slika 2: Diagram algoritma določitve najboljše aproksimacije

Dane naj bodo še matrike $P = [p_k]_{1xn}$, $A = [a_{i,k}]_{mxn}$, $B = [b_i]_{mx1}$. Določimo skalarno funkcijo (ciljno funkcijo) f nad prostorom vektorjev $Z = [z_k]_{1xn}$:

$$f(Z) = PZ^T + \tfrac{1}{2} ZRZ^T = \sum_{k=1}^{n} p_k z_k + \tfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} r_{j,k} z_j z_k \qquad (26)$$

Naloga kvadratičnega programiranja je poiskati tak Z, da bo imela funkcija $f(Z)$ globalni minimum na območju, ki ga določata pogoja:

$$Z \geq \emptyset \quad \text{oziroma} \quad z_k \geq 0 \quad (k=1,\ldots,n) \qquad (27)$$

$$AZ^T \geq B \quad \text{oziroma} \quad \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} z_k \geq b_i \quad (i=1,\ldots,m) \qquad (28)$$

Po Kuhn—Tuckerjevem izreku je naloga rešljiva natanko tedaj, ko je rešljiv naslednji sistem enačb in neenačb (Kuhn—Tuckerjevi pogoji), in rešitev tega sistema je tudi rešitev naloge:

$$Z \geq \emptyset; \quad U \geq \emptyset; \qquad (29,30)$$

$$P + ZR - U^T A \geq \emptyset; \quad AZ^T - B \geq \emptyset; \qquad (31,32)$$

$$(P + ZR - U^T A) Z^T = \emptyset; \quad U^T(AZ^T - B) = \emptyset. \qquad (33,34)$$

Pri tem je $U = [u_i]_{mx1}$ neznani vektor Lagrangeovih multiplikatorjev.

Kuhn—Truckerjevi pogoji so v skalarni obliki taki:

$$z_k \geq 0 \quad (k=1,\ldots,n); \quad u_i \geq 0 \quad (i=1,\ldots,m) \qquad (35,36)$$

$$p_k + \sum_{j=1}^{n} r_{j,k} z_k - \sum_{i=1}^{m} u_i a_{i,k} \geq 0 \quad (k=1,\ldots,n) \qquad (37)$$

$$\sum_{k=1}^{n} a_{i,k} z_k - b_i \geq 0 \quad (i=1,\ldots,m) \qquad (38)$$

$$z_k(p_k + \sum_{j=1}^{n} r_{j,k} z_k - \sum_{i=1}^{m} u_i a_{i,k}) = 0 \quad (k=1,\ldots,n) \qquad (39)$$

$$u_i(\sum_{k=1}^{n} a_{i,k} z_k - b_i) = 0 \quad (i=1,\ldots,m) \qquad (40)$$

Če je rang $A = m$ in če obstaja vsaj en tak $Z \geq \emptyset$, da je $AZ^T \geq B$ (tak Z imenujemo možna rešitev), rešitev obstaja in je ena sama.

4. POVZETEK

V sestavku rešujemo naslednjo nalogo:
Imamo dane podatke za neko rast in iščemo rastno funkcijo, za katero je vsota kvadratov odklonov od podatkov minimalna. Vrednosti te funkcije iščemo le pri tistih vrednostih neodvisne spremenljivke, ki v podatkih nastopajo. Zato tudi ni potrebno, da bi bil tip funkcije že vnaprej podan z nekim analitičnim izrazom. S sredstvi, ki nam jih omogoča kvadratično programiranje, dokažemo, da taka najboljša aproksimacija obstaja in da je celo ena sama. Izpeljemo še algoritem njenega iskanja; ta je shematično prikazan na sliki 2.

5. SUMMARY

The problem which we solved in the article is the following. We have data for a certain growth and we are looking for a growth function, for which the sum of squares of declinations from given points is minimal. We are interested only in the values of this function that belong to the values of independent variable appearing in the data; therefore it is not necessary for the tipe of the function to be given in advance by analytic expression. By the methods of quadratic programming we prove that in this sence the best approximation exists and that it is even unique. We also deduce the algorithm of searching the best approximation. The algorithm is shown in the figure 2.

6. LITERATURA

1. CHIANG, A.C.: Fundamental Methods of Mathematical Economics. McGraw-Hill, Inc., Tokyo 1974.
2. INTRILIGATOR, M.D.: Mathematical Optimization and Economic Theory. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. 1971.
3. KOTAR, M.: Prirastoslovje. Biotehniška fakulteta, Ljubljana 1986.
4. LIMIĆ, N., PAŠAGIĆ, H., RNJAK, Č.: Linearno i nelinearno programiranje. Informator, Zagreb 1978.