week5: Anwendungsbeispiel: Die Fourierreihen-Entwicklung als lineares Regressionsproblem

Erinnerung Fourierreihen: Jede integrierbare Funktion auf dem Intervall $[-\pi, \pi]$ (das kann auch ein anderes Intervall sein, wir nehmen der Einfachheit halber $[-\pi, \pi]$)

$$f \;:\; [-\pi, +\pi] \;\to\; \mathbb{R}$$

kann man in eine Fourierreihe entwickeln:

$$f(x) \;=\; \tfrac{a_0}{2} \;+\; \sum_{k=1}^{\infty} \big\{\, a_k \,\cos kx \;+\; b_k \,\sin kx \,\big\} \tag{1}$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$a_k \;=\; \tfrac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)\, \cos kx \, dx \;, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{2}$$

$$b_k \;=\; \tfrac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)\, \sin kx \, dx \;, \qquad k = 1, 2, \cdots \tag{3}$$

Dabei bilden die Funktionen

$$\begin{array}{ll} 1 \;\;, & \cos x \;,\; \cos 2x \;,\; \cos 3x \;,\; \cdots \\ & \sin x \;,\; \sin 2x \;,\; \sin 3x \;,\; \cdots \end{array}$$

eine Orthogonalbasis von $L^2\big([-\pi, \pi]\big)$, das ist die Menge der quadrat-integrablen Funktionen auf dem Intervall $[-\pi, \pi]$. Genauer gelten die folgenden Orthogonalitätsrelationen, die folgenden Integrale:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos \ell x \, \cos mx \, dx \;=\; \pi \, \delta_{\ell,m}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin \ell x \, \sin mx \, dx \;=\; \pi \, \delta_{\ell,m}$$

und

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos \ell x \, \sin mx \, dx \;=\; 0$$

mit natürlichen Zahlen ℓ und m. Zu gegebenem f wollen wir die Fourierkoeffizienten a_k und b_k bestimmen.

Formulierung als Regressionsproblem: Es sei jetzt

$$f \; : \; [-\pi, +\pi] \;\; \to \;\; \mathbb{R}$$

eine gegebene Funktion. Wir diskretisieren das Intervall $[-\pi, \pi]$ mit Schrittweite Δx:

$$\begin{array}{rcl} x_0 & = & -\pi \\ x_1 & = & x_0 + \Delta x \\ x_2 & = & x_0 + 2\Delta x \\ & \vdots & \\ x_n & = & x_0 + n\Delta x \quad = \quad +\pi \end{array}$$

mit

$$\Delta x \;\; = \;\; \tfrac{+\pi-(-\pi)}{n} \;\; = \;\; \tfrac{2\pi}{n}$$

Unser Datenvektor $\vec{y}$ ist dann

$$\vec{y} \;\; = \;\; \begin{pmatrix} f(x_0) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} \;\; \in \;\; \mathbb{R}^{n+1}$$

und die Regressoren sind gegeben durch

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \;\; \begin{pmatrix} \cos x_0 \\ \vdots \\ \cos x_n \end{pmatrix}, \;\; \begin{pmatrix} \cos 2x_0 \\ \vdots \\ \cos 2x_n \end{pmatrix}, \;\; \cdots \;\; , \;\; \begin{pmatrix} \cos px_0 \\ \vdots \\ \cos px_n \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{pmatrix} \sin x_0 \\ \vdots \\ \sin x_n \end{pmatrix}, \;\; \begin{pmatrix} \sin 2x_0 \\ \vdots \\ \sin 2x_n \end{pmatrix}, \;\; \cdots \;\; , \;\; \begin{pmatrix} \sin px_0 \\ \vdots \\ \sin px_n \end{pmatrix}$$

Definieren wir etwa die Matrizen

$$X_{\cos} \;\; := \;\; \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \cos x_i & \cos 2x_i & \cdots & \cos px_i \\ | & | & & | \end{pmatrix} \;\; \in \;\; \mathbb{R}^{(n+1)\times p}$$

$$X_{\sin} \;\; := \;\; \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \sin x_i & \sin 2x_i & \cdots & \sin px_i \\ | & | & & | \end{pmatrix} \;\; \in \;\; \mathbb{R}^{(n+1)\times p}$$

dann ist die Fourierreihenentwicklung (1), wenn wir sie nach p Termen abbrechen,

$$f(x) \;=\; \tfrac{a_0}{2} \;+\; \sum_{k=1}^{p} \big\{\, a_k \,\cos kx \;+\; b_k \,\sin kx \,\big\} \;+\; \text{error} \tag{4}$$

äquivalent zu

$$\begin{pmatrix} | \\ f(x_i) \\ | \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \frac{a_0}{2} \;+\; X_{\cos} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} \;+\; X_{\sin} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_p \end{pmatrix} \;+\; \text{error} \tag{5}$$

$$\Leftrightarrow \qquad \vec{y} \;=\; X\vec{\beta} \;+\; \text{error}$$

mit der Matrix X der Regressoren gegeben durch, mit $\vec{x}_0 = (1, 1, \cdots, 1) \in \mathbb{R}^{n+1}$,

$$X \;:=\; \Big(\vec{x}_0 \quad X_{\cos} \quad X_{\sin} \Big) \;\in\; \mathbb{R}^{(n+1)\times(2p+1)}$$

und den Regressionskoeffizienten

$$\vec{\beta} \;:=\; \big(a_0/2, a_1, a_2, \cdots, a_p, b_1, b_2, \cdots, b_p \big) \;\in\; \mathbb{R}^{2p+1}$$

Mit Hilfe des `lm()`-Befehls aus der R-Software lassen sich die Regressionskoeffizienten dann sehr einfach bestimmen.

$\rightarrow$ Start R-Session.

Schauen wir uns noch an, wie die allgemeine Formel für die beta's in diesem Fall konkret aussieht: Wir hatten

$$\vec{\beta} \;=\; (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}$$

mit

$$X^T X \;=\; \big(\vec{x}_\ell \cdot \vec{x}_m \big)$$

gegeben durch die Skalarprodukte der Regressoren. Betrachten wir der Einfachheit halber etwa eine reine Sinus-Entwicklung, so dass $X = X_{\sin}$. Dann haben wir etwa, wenn $X_{\sin,\ell}$ die ℓ'te Spalte der Regressionsmatrix bezeichnet,

$$\begin{aligned} X_{\sin,\ell} \cdot X_{\sin,m} \;&=\; \sum_{i=0}^{n} \sin \ell x_i \, \sin m x_i \\ &=\; \frac{1}{\Delta x} \, \Delta x \, \sum_{i=0}^{n} \sin \ell x_i \, \sin m x_i \\ &\approx\; \frac{1}{\Delta x} \, \int_{-\pi}^{\pi} \sin \ell x \, \sin m x \, dx \\ &=\; \frac{\pi}{\Delta x} \, \delta_{\ell,m} \end{aligned}$$

Also haben wir, bei einer reinen Sinus-Entwicklung,

$$X^T X \;\approx\; \tfrac{\pi}{\Delta x}\, Id$$

und damit

$$(X^T X)^{-1} \;\approx\; \tfrac{\Delta x}{\pi}\, Id$$

Weiterhin ist

$$X^T \vec{y} \;=\; \begin{pmatrix} | \\ \vec{x}_\ell \cdot \vec{y} \\ | \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{x}_\ell \cdot \vec{y} \;&=\; X_{\sin,\ell} \cdot \begin{pmatrix} | \\ f(x_i) \\ | \end{pmatrix} \;=\; \sum_{i=0}^{n} \sin(\ell x_i)\, f(x_i) \\ &\approx\; \frac{1}{\Delta x} \, \textstyle\int_{-\pi}^{\pi} \sin(\ell x)\, f(x)\, dx \\ &\overset{(3)}{=}\; \frac{\pi}{\Delta x}\, b_\ell \end{aligned}$$

Also liefert die allgemeine Formel für die Regressionskoeffizienten in diesem konkreten Fall

$$\begin{aligned} \vec{\beta} \;&=\; (X^T X)^{-1} X^T \vec{y} \\ &\approx\; \frac{\Delta x}{\pi}\, Id\, \frac{\pi}{\Delta x} \begin{pmatrix} | \\ b_\ell \\ | \end{pmatrix} \\ &=\; \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und wir erhalten genau die Entwicklungskoeffizienten der Fourierreihenentwicklung.