Approssimazione polinomiale

Alvise Sommariva

Università degli Studi di Padova
Dipartimento di Matematica Pura e Applicata

8 aprile 2019

Dato un campionamento $\{(x_i, y_i)\}$, $y_i = f(x_i)$, $i = 1, 2, \ldots, N$, dove $x_i \neq x_j$ se $i \neq j$, nell'approssimazione ai minimi quadrati invece di interpolare si cerca un polinomio $\mathcal{L}_m$ di grado $m \leq N$, in cui tipicamente $m \ll N$, tale che la somma degli scarti quadratici

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{N} (y_i - \mathcal{L}_m(x_i))^2}$$

sia minima, ovvero che risolva il problema di ottimizzazione in $m+1$ variabili $\mathbf{a} = (a_0, \ldots, a_m)$

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^{m+1}} \sum_{i=1}^{N} (y_i - (a_0 + a_1 x_i + \ldots + a_m {x_i}^m))^2. \tag{1}$$

Si può dimostrare che tale problema ha una e una sola soluzione $\mathbf{a}$, ovvero esiste un unico polinomio $\mathcal{L}_m$ minimizzante la somma degli scarti quadratici (1).

Nota. (Richiede la conoscenza di algebra lineare)

La dimostrazione usa elementi di algebra lineare. Ne forniamo una traccia

Se

$$V = (v_{i,j})_{i=1,\ldots,N,j=0,\ldots,m} = (x_i^j)$$

è una matrice di Vandermonde rettangolare di dimensione $N \times (m+1)$, *allora si mostra che* $V^T V$ *è una matrice di dimensione* $(m+1) \times (m+1)$, *simmetrica e definita positiva (e quindi non singolare).*

Inoltre si vede che $\mathbf{a} = (a_i)$ *è soluzione ai minimi quadrati se e solo se risolve il sistema* $V^T V\mathbf{a} = V^T y$ *per* $y = (y_i)$, *ed essendo* $V^T V$ *non singolare, necessariamente la soluzione* $\mathbf{a}$ *è unica.*

Teorema

Se

- $h = \max_i \Delta x_i \leq \theta(b-a)/m^2$,
- $\theta \in (0,1)$,

allora per ogni $f \in C^k([a,b])$, $k > 1$, *esiste una costante* c_k *tale che*

$$\max_{x \in [a,b]} |\mathcal{L}_m(x) - f(x)| \leq c_k m^{1-k}.$$

Commento

Questo teorema asserisce che la soluzione ai minimi quadrati $\mathcal{L}_m$ *di grado m, su un set di nodi sufficientemente fitti, dará uniformemente una buona approssimazione della funzione f da approssimare, tendenzialmente migliore se la funzione è molto regolare.*

Non dice molto del valore della costante c_k, *e quindi il termine* $c_k m^{1-k}$ *non è direttamente valutabile.*

Esempio.

Approssimare ai minimi quadrati le funzioni

1. $f_1(x) = x^{30} \in C^{\infty}([0,1])$,
2. $f_2(x) = x^{7/2} \in C^{3}([0,1])$,
3. $f_3(x) = \exp(x) \in C^{\infty}([0,1])$.

in opportuni nodi equispaziati.

Come noto dal teorema precedente, possiamo aspettarci che se $x_k = a + kh$, $k = 1, \ldots, n$ con h sufficientemente piccolo, allora il massimo errore

$$\max_{x \in [a,b]} |\mathcal{L}_m(x) - f_k(x)|, \quad k = 1, 2, 3$$

tenderà a 0 al crescere di m.
Al variare di m, sceglieremo $h = 0.5(b-a)/m^2$. Se n è il numero di subintervalli di $[a, b]$, visto che $nh = (b-a)$, otteniamo

$$n = (b-a)/h = 2m^2.$$

Il calcolo della soluzione ai minimi quadrati viene eseguito utilizzando la funzione Matlab `polyfit`, e per avere una stima dell'errore commesso

$$E_m(f_k) = \max_{x \in [a,b]} |\mathcal{L}_m(x) - f_k(x)|$$

valutiamo

$$E_m^*(f_k) = \max_{x \in \Delta_{10000}} |\mathcal{L}_m(x) - f(x)| \approx E_m(f_k),$$

dove $\Delta_{10000} = \{x_k = -5 + k/1000, \ \ k = 0, \ldots, 10000\}$.

I risultati sono rappresentati in tabella.

Approssimazione polinomiale

m	$E_m^*(f_1)$	$E_m^*(f_2)$	$E_m^*(f_3)$	$n+1$
1	$6.9e-01$	$3.0e-01$	$1.4e-01$	3
2	$4.0e-01$	$5.2e-02$	$9.6e-03$	9
3	$3.4e-01$	$4.3e-03$	$7.3e-04$	19
4	$2.8e-01$	$3.2e-04$	$4.1e-05$	33
5	$2.1e-01$	$6.2e-05$	$1.9e-06$	51
6	$1.4e-01$	$1.7e-05$	$7.3e-08$	73
7	$8.6e-02$	$6.1e-06$	$2.5e-09$	99
8	$4.9e-02$	$2.5e-06$	$7.2e-11$	129
9	$2.6e-02$	$1.1e-06$	$1.9e-12$	163
10	$1.3e-02$	$5.6e-07$	$4.5e-14$	201
15	$1.1e-04$	$3.7e-08$	$2.0e-15$	451
20	$9.4e-08$	$5.4e-09$	$1.8e-15$	801

Tabella: Nella tabella indichiamo il grado $m = 1, \ldots, 10, 15, 20$, gli errori compiuti dalle approssimazioni ai minimi quadrati $E_m^*(f_1), E_m^*(f_2), E_m^*(f_3)$ e il numero di punti di campionamento.

Nota.

Nelle scienze applicate capita frequentemente che gli esperimenti producano set di dati $\{(x_i, y_i)\}_{i=1,\ldots,N}$ dove le ascisse sono distinte. Uno degli scopi è di determinare una formula del tipo $y = f(x)$ che relazioni le variabili.

Usualmente è a disposizione una classe di funzioni $\mathcal{F}$ e bisogna determinare f all'interno di questa famiglia. Tale problema è noto come curve fitting.

In questa sezione consideriamo il caso in cui $\mathcal{F} = \mathbb{P}_m$, ovvero i polinomi di grado al più m e determiniamo f utilizzando la soluzione ai minimi quadrati.

Nota.

Inoltre i dati y_i sono spesso inesatti, dovuti agli errori sperimentali compiuti. Questa tecnica permette in qualche senso di evidenziare una curva che meglio li approssima

Definizione (Regressione lineare)

Se $\mathcal{F} = \mathbb{P}_1$, ovvero calcoliamo la soluzione ai minimi quadrati $\mathcal{L}_1$, si parla di regressione lineare.

Esempio.

Si considerino i dati della seguente tabella (cf. [1, p.79])

x_i	1	3	4	6	7
y_i	-2.1	-0.9	-0.6	0.6	0.9

Si disegni il grafico della soluzione al problema di regressione lineare.

I risultati sono evidenziati in figura, dove la retta di regressione è quella che meglio approssima i dati nel senso dei minimi quadrati.

Regressione lineare

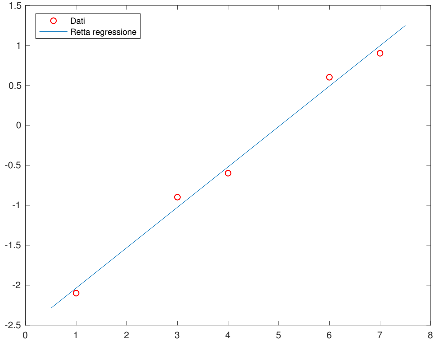

Figura: Dati e retta di regressione lineare.

Approssimazione polinomiale e dati inesatti

In alcuni problemi, i dati sono soggetti a rumore e uno vuole in qualche senso togliere il rumore.

Esempio.

Consideriamo quali dati $(x_i, y_i)_{i=1,\ldots,40}$ in cui $x_i = -1 + i \cdot \frac{1}{20}$ e $y_i = \sin(10 \cdot x_i) + 10^3 \mu_i$ dove μ_i è un numero random in $[-0.5, 0.5]$. Determinare il polinomio di miglior approssimazione.

In qualche modo simuliamo dei dati $y_i^* = \sin(x_i)$ cui abbiamo aggiunto il rumore $10^3 \mu_i$.

- L'intento è approssimare la funzione $f^*(x) = \sin(10x)$ togliendo il rumore.
- Non ha senso calcolare l'interpolante polinomiale, perche' si riprodurrebbero i rumori e non la funzione cercata.

In figura, mostriamo i risultati ottenuti utilizzando le approssimanti $\mathcal{L}_m$ ai minimi quadrati di grado rispettivamente $m = 5$, $m = 10$, $m = 15$, $m = 30$.

Approssimazione polinomiale e dati inesatti

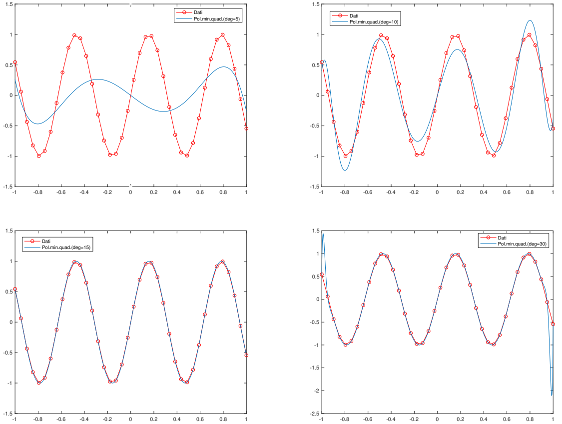

Figura: Dati (in rosso) e approssimanti ai minimi quadrati di grado $m = 5$, $m = 10$, $m = 15$, $m = 30$ (in blu).

Approssimazione polinomiale e dati inesatti

In virtù dei 6 cambi di convessità / concavità della funzione f^*, è chiaro che un polinomio di grado basso non fornisca risultati apprezzabili.

Ad esempio un polinomio di grado 5 può avere al più 4 cambi di convessità / concavità, e non può essere adatto allo scopo.

Un polinomio $\mathcal{L}_m$ di grado m troppo alto approssimerebbe la funzione con rumore e non f^*.

Nel nostro esempio, $m = 15$ sembra essere un buon compromesso. Si noti come a grado $m = 30$ comincino a sorgere oscillazioni agli estremi. Inoltre per problemi dovuti a `polyfit`, il risultato non è quello corretto teoricamente.

La tabella che segue, mostra gli errori

$$E_m(f^*) = \max_{x \in [-1,1]} |f^*(x) - \mathcal{L}_m(x)|, \quad E_m(f) = \sum_{i=1}^{40} |f(x_i) - \mathcal{L}_m(x_i)|^2,$$

evidenziando un miglioramento di entrambe fino a grado $m = 20$ e un peggioramento nell'approssimare la funzione senza rumore f^* pur approssimando sempre meglio i dati (nel senso dei minimi quadrati).

Approssimazione polinomiale e dati inesatti

m	$E_m(f^*)$	$E_m(f)$
5	$1.2e+00$	$4.0e+00$
10	$3.3e-01$	$1.2e+00$
15	$4.0e-03$	$5.1e-03$
20	$5.7e-03$	$2.3e-03$
25	$3.6e-02$	$2.2e-03$
30	$1.7e+00$	$1.8e-03$

Tabella: Grado m ed errori $E_m(f^*) = \max_{x \in [-1,1]} |f^*(x) - \mathcal{L}_m(x)|$, $E_m(f) = \sum_{i=1}^{40} |y_i - \mathcal{L}_m(x_i)|^2$.

Bibliografia I

A. Quarteroni e F. Saleri, Elementi di calcolo numerico, Progetto Leonardo, 1999.