Approssimazione polinomiale [1]

A. Sommariva [2]

Keywords: Problema ai minimi quadrati: definizione e motivazioni. Teorema che lega il numero di campionamenti all'errore dei minimi quadrati. Alcuni esempi. Curve fitting. Regressione lineare (con esempio). Minimi quadrati e ricostruzione di funzione da dati perturbati.

Revisione: 11 maggio 2021

---

1. Approssimazione polinomiale

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 $\mathcal{L}_m(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k^* \, x^k$ di grado $m < N$, in cui tipicamente $m \ll N$, tale che la somma degli scarti quadratici

$$\|\mathbf{y} - \{\mathcal{L}_m(x_i)\}_i\|_2 := \sqrt{\sum_{i=1}^{N} (y_i - \mathcal{L}_m(x_i))^2}, \qquad \mathbf{y} = (y_i)_i,$$

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

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

o equivalentemente, visto che assume il minimo nello stesso $\mathbf{a}$:

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

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 (2).

Teorema 1.1 (Esistenza ed unicitá). *Se $\{x_k\}_{k=1,\ldots,N}$ sono punti a 2 a 2 distinti, allora l'approssimante ai minimi quadrati di grado $m < N$ delle coppie $\{(x_k, y_k)\}_{k=1,\ldots,N}$ esiste ed é unica.*

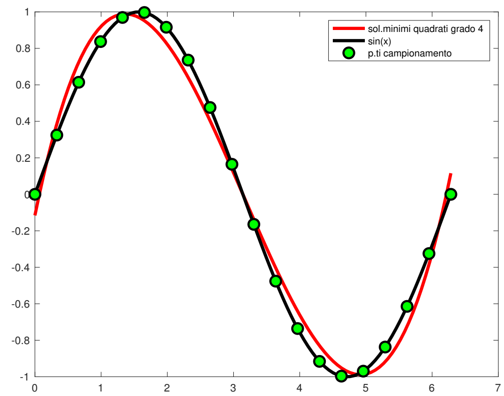

Figura 1: In nero il grafico di $f(x) = \sin(x)$, in rosso l'approssimante ai minimi quadrati di grado $m = 4$, in verde le coppie $(x_k, f(x_k))$ con $k = 1, \ldots, 20$.

Dimostrazione 1.2 (Traccia). *Una classica dimostrazione usa elementi di algebra lineare. Ne forniamo una traccia, nell' ipotesi $x_i \neq x_j$ qualora $i \neq j$.*

Indichiamo con V la matrice di Vandermonde rettangolare di dimensione $N \times (m+1)$

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

- *Si mostra che $V^T V$ è una matrice di dimensione $(m+1) \times (m+1)$, simmetrica e definita positiva (e quindi non singolare poiché tutti gli autovalori $\lambda_i > 0$ e quindi $\det(V^T V) = \prod_{i=1}^{m+1} \lambda_i > 0$).*

- *si vede che $\mathbf{a} = (a_i)$ è soluzione ai minimi quadrati se e solo se risolve il sistema delle equazioni normali*

$$\boxed{V^T V \mathbf{a} = V^T y}$$

per $y = (y_i)$, ed essendo $V^T V$ non singolare, necessariamente la soluzione $\mathbf{a}$ è unica.

Teorema 1.3 (Errore approssimante ai minimi quadrati). *Se $\mathcal{L}_m$ è la miglior approssimante polinomiale di grado $m > 0$, relativamente alle coppie $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$, …, $(x_N, f(x_N))$ con $a \leq x_1 < \ldots < x_N \leq b$ e*

- $h_m = \max_{i=1,\ldots,N-1}(x_{i+1} - x_i) \leq \theta(b-a)/m^2$,

- $\theta \in (0, 1)$,

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

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

Corollario 1.4 (Punti equispaziati). *Se $\mathcal{L}_m$ è la miglior approssimante polinomiale di grado $m > 0$, relativamente alle coppie $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$, $\ldots$, $(x_{N_m}, f(x_{N_m}))$ con $x_k = a + (k-1)\frac{b-a}{N_m-1}$ e $N_m \geq 2m^2 + 1$. Allora per ogni $f \in C^k([a, b])$, $k > 1$, esiste una costante c_k, indipendente da m, tale che*

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

Commento 1.5.

- *Il teorema asserisce che la soluzione ai minimi quadrati $\mathcal{L}_m$ di grado m, su un set di nodi sufficientemente fitti (ovvero l'intervallo di ampiezza maggiore é sufficientemente piccolo), dará*
  - *(a) uniformemente una buona approssimazione della funzione f da approssimare,*
  - *(b) tendenzialmente migliore se la funzione è molto regolare vista la presenza di m^{1-k}, supponendo c_k non cresca troppo.*
- *Non dice molto del valore della costante c_k, e quindi il termine $c_k m^{1-k}$ non è direttamente valutabile.*
- *Al crescere di m, il fattore $c_k m^{1-k} \to 0$ e quindi per set di nodi $\{x_k\}_{k=1}^N$ sufficientementi fitti, la successione $\{\mathcal{L}_m\}_m$ converge uniformente a $f \in C^k([a, b])$, qualora sia $k > 1$.*

Esempio 1.1 (Minimi quadrati e set di nodi equispaziati suff. fitti). *Supponiamo che al variare di m, si calcoli l'approssimante polinomiale $\mathcal{L}_m$ delle coppie $(x_k, f(x_k))_{k=1,\ldots,N_m}$, in cui*

- *$f \in C^k([a, b])$, $k > 1$;*
- *$x_j = a + (b-a) \cdot \frac{j-1}{N_m-1}$ con $j = 1, \ldots, N_m = 2m^2 + 1$, ovvero N_m punti equispaziati in $[a, b]$, con passo $h_m = \frac{b-a}{N_m-1}$.*

In virtú del precedente corollario si ha

$$0 \leq \max_{x \in [a,b]} |\mathcal{L}_m(x) - f(x)| \leq c_k m^{1-k}. \tag{3}$$

Se si considera in particolare una sequenza di approssimazioni $\{\mathcal{L}_m\}_{m=1,2,\ldots}$ con queste proprieta', allora da (3) abbiamo che per il teorema del confronto

$$\lim_{m \to +\infty} \|\mathcal{L}_m - f\|_\infty = \lim_{m \to +\infty} \max_{x \in [a,b]} |\mathcal{L}_m(x) - f(x)| = 0,$$

ovvero la successione di polinomi $\{\mathcal{L}_m\}_{m=1,2,\ldots}$ converge uniformemente a f in $[a, b]$.

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, applicato all'intervallo $[a, b]$ con $a = 0$ e $b = 1$, possiamo aspettarci che se $x_k = a + kh$, $k = 1, \ldots, N_m$ con h sufficientemente piccolo, allora il massimo errore

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

tenderà a 0 al crescere di m.

Al variare di m, sceglieremo $N_m = 2m^2+1$, ovvero quali punti di campionamento

$$x_k = a + kh, \; k = 1, \ldots, N_m = 2m^2 + 1, \;\; h = \frac{b-a}{n_m - 1} = \frac{b-a}{2m^2 + 1 - 1} = \frac{b-a}{2m^2}$$

così da garantire le ipotesi del teorema precedente.

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

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

dove $\Delta = \{x_j = (j-1)/9999, \;\; k = 1, \ldots, 10000\}$.

I risultati sono rappresentati in tabella e suggeriscono che numericamente sussiste la convergenza uniforme predetta dalla teoria.

m	$E_m^*(f_1)$	$E_m^*(f_2)$	$E_m^*(f_3)$	N_m
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 1: 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. Non deve sorprendere la prima colonna, visto che stiamo approssimando un polinomio di grado 30 con altri di grado minore.

Nota 1.6 (Curve fitting). *Nelle scienze applicate capita frequentemente che gli esperimenti producano set di dati* $\{(x_i, y_i)\}_{i=1,\dots,N}$ *dove le ascisse sono distinte.*

Uno degli scopi è di determinare una formula del tipo $y = f(x)$ *che relazioni le variabili, con* f *appartenente a una classe di funzioni* $\mathcal{F}$*. 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 1.7 (Dati inesatti). *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 1.8 (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

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.

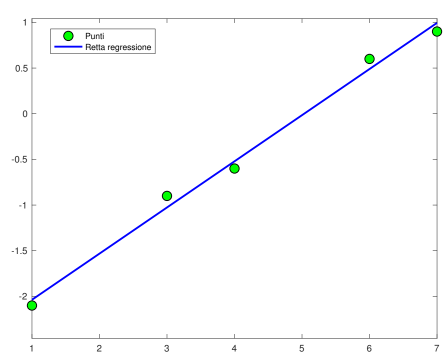

Figura 2: Dati e retta di regressione lineare. In questo esempio la soluzione risulta $p_1(x) = 0.505263157894737 \cdot x - 2.542105263157894$.

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

Esempio. Consideriamo quali dati $(x_i, y_i)_{i=1,\dots,40}$ in cui $x_i = -1 + 2 \cdot (i-1) \cdot \frac{1}{39} \in [-1, 1]$ e $y_i = \sin(10 \cdot x_i) + 10^{-3}\mu_i$ dove μ_i è un numero casuale in $[-0.5, 0.5]$. Determinare il polinomio di miglior approssimazione per $m = 5, 10, 15, 30$ e vedere come approssima $f^*(x) = \sin(10 \cdot x)$.

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 $m = 5$, $m = 10$, $m = 15$, $m = 30$.

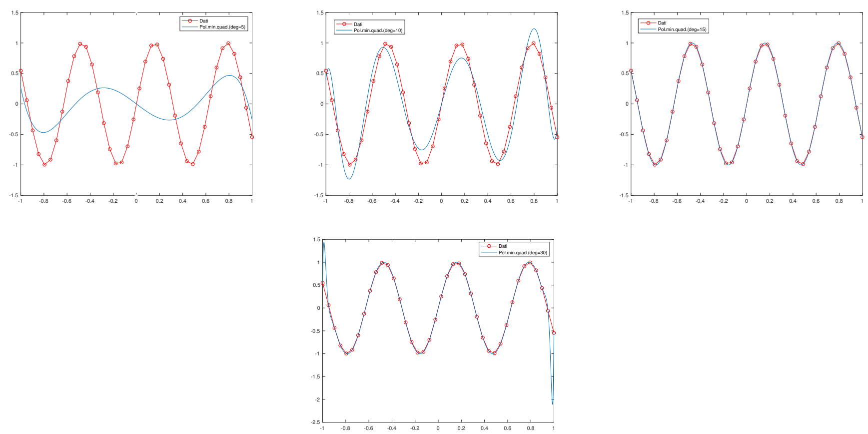

Figura 3: Dati (in rosso) e approssimanti ai minimi quadrati di grado $m = 5$, $m = 10$, $m = 15$, $m = 30$ (in blu).

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

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

con $\mathbf{y} = (y_i)_i$, 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).

Nota 1.9 (Minimi quadrati qualora $m = N - 1$). *Si osservi che per $m = N - 1$,*

m	$E_m(f^*)$	$E_m(\mathbf{y})$
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 2: Grado m ed errori $E_m(f^*) = \max_{x\in[-1,1]} |f^*(x) - \mathcal{L}_m(x)|$, $E_m(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{40} |y_i - \mathcal{L}_m(x_i)|^2$, dove $f^*(x) = \sin(10x)$, $\mathbf{y} = (y_i)_i$ con $y_i = f^*(x_i) + 10^{-3}$.

- *la soluzione ai minimi quadrati $\mathcal{L}_m(x) = a_0^* + a_1^* x_i + \ldots + a_m^* x_i^m$ é la soluzione del problema*

$$0 \leq \min_{\mathbf{a}\in\mathbb{R}^{m+1}} \sum_{i=1}^{N} (y_i - (a_0 + a_1 x_i + \ldots + a_m x_i^m))^2; \tag{4}$$

- *essendo $m = N-1$ possiamo determinare il polinomio interpolatore $p_m(x) = \bar{a}_0 + \bar{a}_1 x_i + \ldots + \bar{a}_m x_i^m$ e visto che é tale che $p_m(x) = y_i$ per $i = 1, \ldots, N$ necessariamente*

$$\bar{a}_0 + \bar{a}_1 x_i + \ldots + \bar{a}_m x_i^m = y_i, \qquad i = 1, \ldots, N,$$

e quindi

$$\sum_{i=1}^{N} (y_i - (\bar{a}_0 + \bar{a}_1 x_i + \ldots + \bar{a}_m x_i^m))^2 = \sum_{i=1}^{N} 0^2 = 0.$$

Di conseguenza, da (4), per $m = N-1$ si ha che la soluzione ai minimi quadrati $\mathcal{L}_m(x)$ coincide col polinomio p_m di grado m che interpola le coppie $(x_i, y_i)_{i=1,\ldots,N}$.

Di conseguenza nell'esempio precedente, in cui $N = 40$, $\mathcal{L}_{39}$ coincide con il polinomio p_{39} interpolante, le coppie $(x_i, \sin(10x_i) + 10^{-3}\mu_i)$, $i = 1, \ldots, 40$ e quindi empiricamente vede maggiormente i dati affetti da rumore e meno la funzione $f^*(x) = \sin(10x)$.