

Approssimazione polinomiale ¹

A. Sommariva ²

Keywords: Approssimazione polinomiale ai minimi quadrati. Curve fitting.

Revisione: 9 novembre 2018

1. Approssimazione polinomiale

Dato un campionamento $\{(x_i, y_i)\}$, $y_i = f(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$, nell'approssimazione ai *minimi quadrati* invece di interpolare si cerca un polinomio L_m di grado $m \leq N$, tipicamente $m \ll N$ tale che la somma degli scarti quadratici

$$\sum_{i=1}^N (y_i - L_m(x_i))^2$$

sia minima, ovvero si risolve il problema di minimi in $m+1$ variabili $a = (a_0, \dots, a_m)$

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

Si può dimostrare che tale problema ha una e una sola soluzione a , ovvero esiste un unico polinomio L_m minimizzante la somma degli scarti quadratici.

Nota. 1.1. *La dimostrazione usa elementi di algebra lineare. Se*

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

è una matrice di Vandermonde rettangolare $N \times (m+1)$, allora $V^T V$ è una matrice $(m+1) \times (m+1)$ simmetrica e definita positiva (e quindi non singolare). Di conseguenza, visto che la soluzione $a = (a_i)$ risolve il sistema $V^T V a = V^T y$ per $y = (y_i)$, essendo $V^T V$ non singolare, necessariamente la soluzione è unica.

Vale il seguente teorema.

Teorema 1.2. *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*

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

Commento. Questo teorema asserisce che la soluzione ai minimi quadrati L_m di grado m , su un set di nodi sufficientemente fitti, darà *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. Consideriamo 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. $f_3(x) = \exp(x) \in C^\infty([0, 1])$.

Come noto dal teorema precedente, possiamo aspettarci che se il campionamento in nodi equispaziati è sufficientemente piccolo, allora il massimo errore

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

, 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

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

valutiamo

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

dove $\Delta_{10000} = \{x_k = -5 + k/1000, \quad k = 0, \dots, 10000\}$. I risultati sono rappresentati in tabella.

2. 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.

Usualmente è a disposizione una classe di funzioni \mathcal{F} e bisogna determinare f all'interno di questa famiglia.

Inoltre i dati y_i sono spesso inesatti, dovuti agli errori sperimentali compiuti.

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.

| 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 1: Nella tabella indichiamo il grado $m = 1, \dots, 10, 15, 20$, 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.

Esempio. Se $\mathcal{F} = \mathbb{P}_1$, ovvero calcoliamo la soluzione ai minimi quadrati L_1 , si parla usualmente di *regressione lineare*.

Consideriamo ad esempio i dati della tabella 2 (cf. [1, p.79]) e supponiamo di voler determinare il polinomio di grado 1 che risolve il problema di regressione lineare. I risultati sono evidenziati nella figura 2, dove la retta di regressione è quella che in un certo senso, cioè ai minimi quadrati, è quella che *meglio* approssima i dati.

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

Tabella 2: Una tabella di dati.

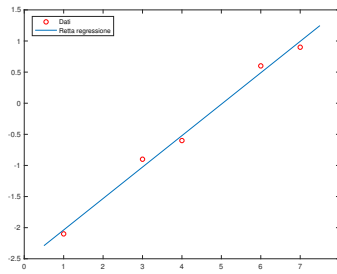


Figura 1: Dati e retta di regressione lineare.

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

Consideriamo quali dati $(x_i, y_i)_{i=1, \dots, 40}$ 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 $[-0.5, 0.5]$. 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, perché si riprodurrebbero i rumori e non la funzione cercata.

In figura 2, mostriamo i risultati ottenuti utilizzando le approssimanti L_m ai minimi quadrati di grado rispettivamente $m = 5, m = 10, m = 15, m = 30$.

In virtù dei 6 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 L_m di grado 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.

Infine la tabella 2, mostra gli errori

$$E_m(f^*) = \max_{x \in [-1, 1]} |f^*(x) - L_m(x)|,$$

$$E_m(f) = \sum_{i=1}^4 0 |y_i - L_m(x_i)|^2,$$

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).

| 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 | $1.7e + 00$ | $1.8e - 03$ |
| 35 | $1.6e + 02$ | $1.3e - 03$ |
| 40 | $4.5e + 02$ | $1.3e - 03$ |
| 45 | $1.5e + 03$ | $1.3e - 03$ |
| 50 | $1.0e + 04$ | $1.3e - 03$ |

Tabella 3: Grado m ed errori $E_m(f^*) = \max_{x \in [-1, 1]} |f^*(x) - L_m(x)|$, $E_m(f) = \sum_{i=1}^4 0 |y_i - L_m(x_i)|^2$.

Bibliografia.

- [1] A. Quarteroni e F. Saleri, *Elementi di calcolo numerico*, Progetto Leonardo, 1999.

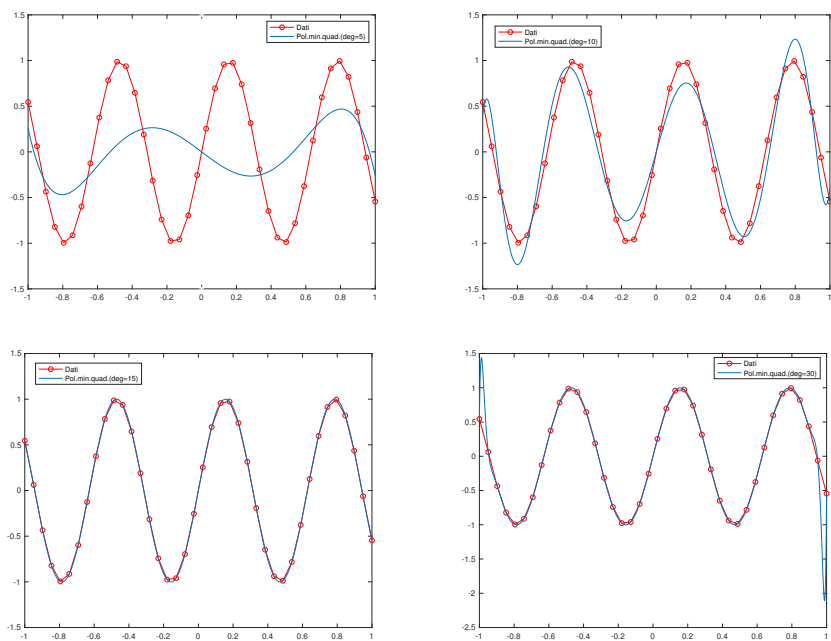


Figura 2: Dati (in rosso) e approssimanti ai minimi quadrati di grado $m = 5$, $m = 10$, $m = 15$, $m = 30$ (in blu).