Fitting polinomiali e non polinomiali

Stefano De Marchi

Dipartimento di Informatica

Università di Verona

Scaletta

1. **Fitting polinomiali**

   1.1 Interpolazione polinomiale, forma di Lagrange, fenomeno di Runge, costante di Lebesgue, nodi di Fekete e Leja.

   1.2 Polinomi continui “a tratti”, funzioni splines (polinomiali), Bsplines, interpolazione con splines, smoothing spline.

   1.3 Approssimazione polinomiale, polinomi di Bernstein.

2. **Fitting non-polinomiali**

   2.1 Approssimazione ai minimi quadrati, SVD. Minimi quadrati pesati, interpolanti. Schema di Shepard.

   2.2 Radial Basis Functions.

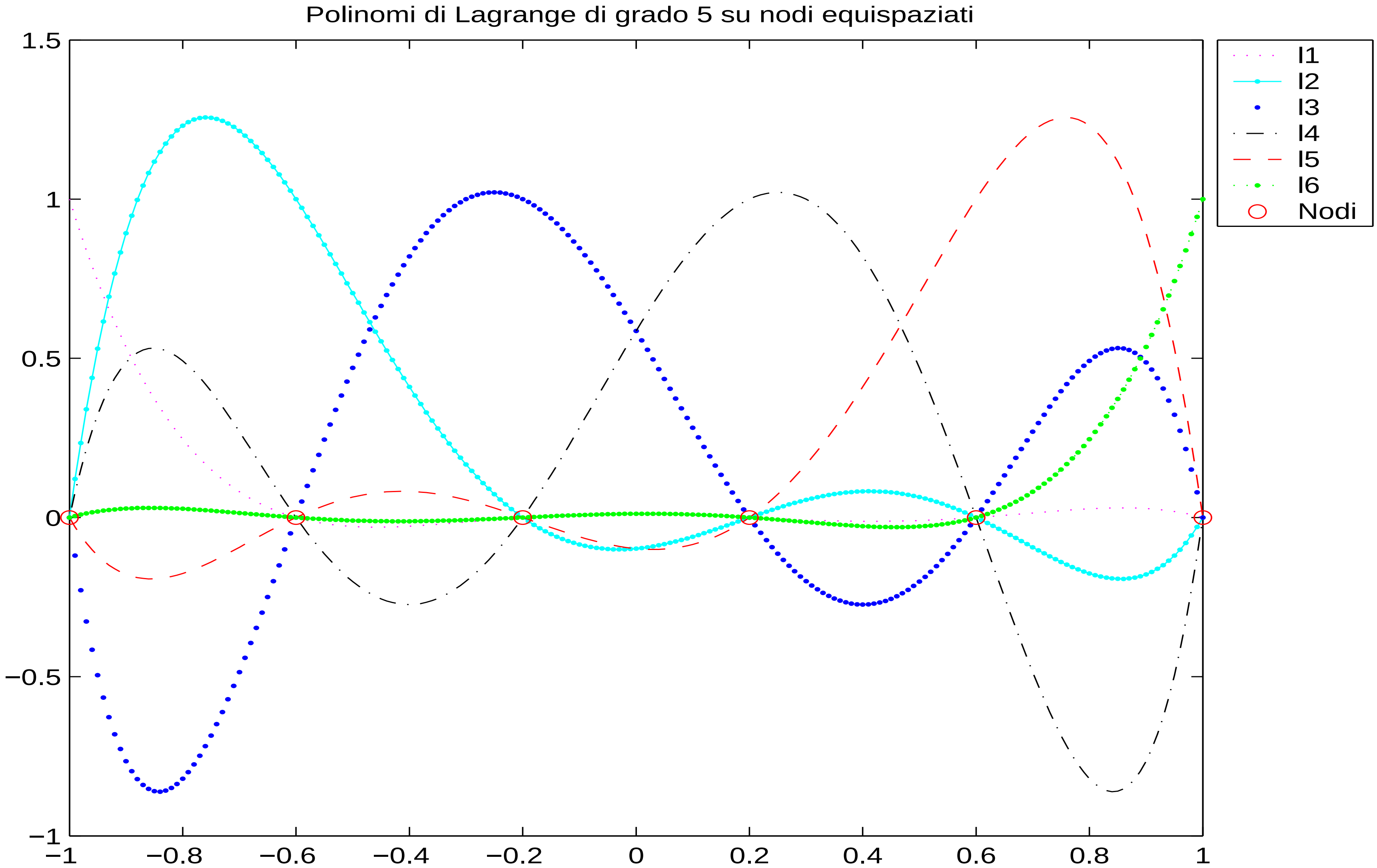
Teorema 1 *Dati* $n+1$ *punti distinti* $x_0, \ldots, x_n$ *e* $n+1$ *valori* $w_i, i = 0, ..., n$ *esiste ed è unico il polinomio di grado* n, $p_n(x)$, *tale che*

$$p_n(x_i) = w_i, \;\; i = 0, ..., n.$$

- **Soluzione di un sistema lineare**: $V\mathbf{a} = \mathbf{w}$ con V matrice di Vandermonde.
- **Forma di Lagrange**: $p_n(x) = \displaystyle\sum_{i=0}^{n} w_i l_i(x)$ con $l_i(x)$ polinomi elementari di Lagrange.

I punti $x_i, \;\; i = 0, \; ..., n$ sono detti nodi d'interpolazione.

Polinomi elementari di Lagrange



In $[-1,1]$ si desideri interpolare la funzione $g(x) = \dfrac{1}{1+25x^2}$ su nodi equispaziati: $x_i = -1 + h\, i,\ \ i = 0, ..., n,\ \ h = \frac{2}{n}$.
Scegliamo invece nodi di Chebyshev

$$x_i^{(c)} = \cos\left(\frac{(2i-1)\,\pi}{2n}\right) \ \ i = 0, ..., n.$$

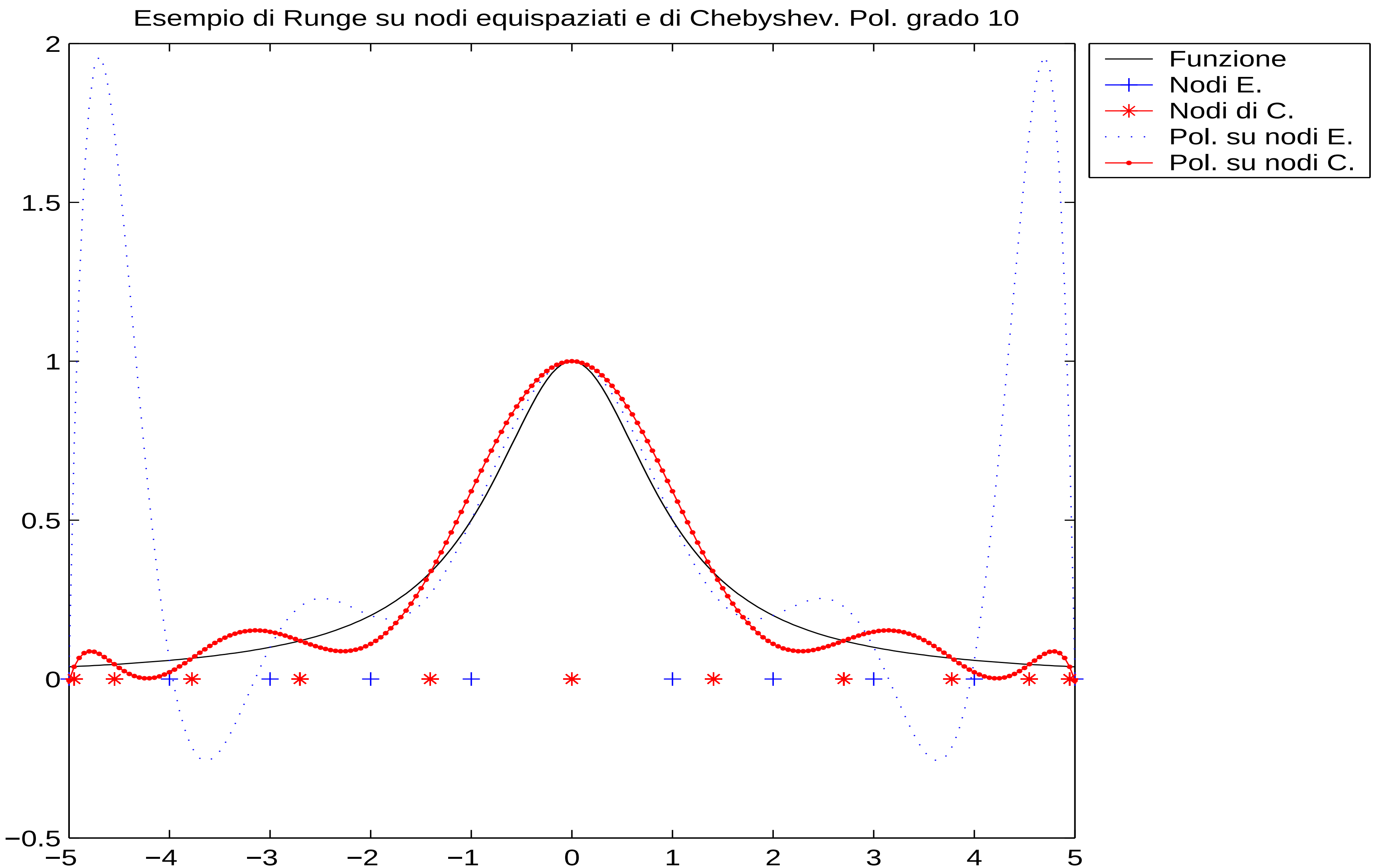
Problemi con i nodi!!!!

Spiegazione: formula dell'errore d'interpolazione!

$$|p_n(x) - g(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!} |\omega(x)| \max_{-1 \leq x \leq 1} |g^{(n+1)}(x)|.$$

con $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$. Nel caso dei nodi Chebyshev $|\omega(x)| \leq \frac{1}{2^n}$ altrimenti è peggiore!

Fenomeno di Runge: II



Costante di Lebesgue: I

Sia X un insieme di nodi d'interpolazione in [-1,1], $\{l_i\}_{i=0,\ldots,n}$ i polinomi elementari di Lagrange,

$$\Lambda_n = \max_{-1\leq x\leq 1} \sum_{i=0}^{n} |l_i(x)|$$

è la costante di Lebesgue.
È la norma dell'operatore $L_n : \mathcal{C}[-1,1] \to \mathbb{P}_n$ e misura la bontà dell'approssimazione di una certa funzione f con il polinomio $L_n f$.

$$T = \left\{ x_k = \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)}\right), \quad k = 0, 1, \ldots, n \right\},$$

sono le ascisse di Chebyshev.

Costante di Lebesgue: II

Bernstein (1918) aveva provato che asintoticamente

$$\Lambda_n(T) \sim \frac{2}{\pi} \log(n+1), \quad n \to \infty \,.$$

Lutmann e Rivlin (1965) **computazionalmente** provarono che $\Lambda_n(T) = \lambda_n(T;1) = \sum_{k=0}^{n} |l_i(1)|$. Sapendo che $\lambda_n(T;1) = \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^{n} \cot\left(\frac{(2k+1)\pi}{4(n+1)}\right)$ si stabilì che

$$\lim_{n\to\infty} \left(\lambda_n(T;1) - \frac{2}{\pi}\log(n+1)\right) := a_0 = 0.9625...$$

Infine Ehlich e Zeller (1966) ottennero la stima

$$a_0 + \frac{2}{\pi}\log(n+1) < \Lambda_n(T) \leq 1 + \frac{2}{\pi}\log(n+1)$$

Punti di Fekete: I

I punti di Fekete. [a] Il problema da cui si prese spunto è il seguente. Si considerino n masse unitarie $n \geq 2$ nei punti variabili $x_1, ..., x_n$ di [-1,1].

Problema 1 *Per quali posizioni di questi punti l'espressione*

$$\prod_{i \neq j; i,j=1}^{n} (x_j - x_i) \tag{1}$$

diventa massima?

[a] Mihály Fekete (1886-1957), determinò questi punti nel 1923.

Fejér (1932) provò che i punti di Fekete, si ottengono come soluzione del seguente problema:

Trovare l'insieme F, non necessariamente unico, che minimizza la funzione

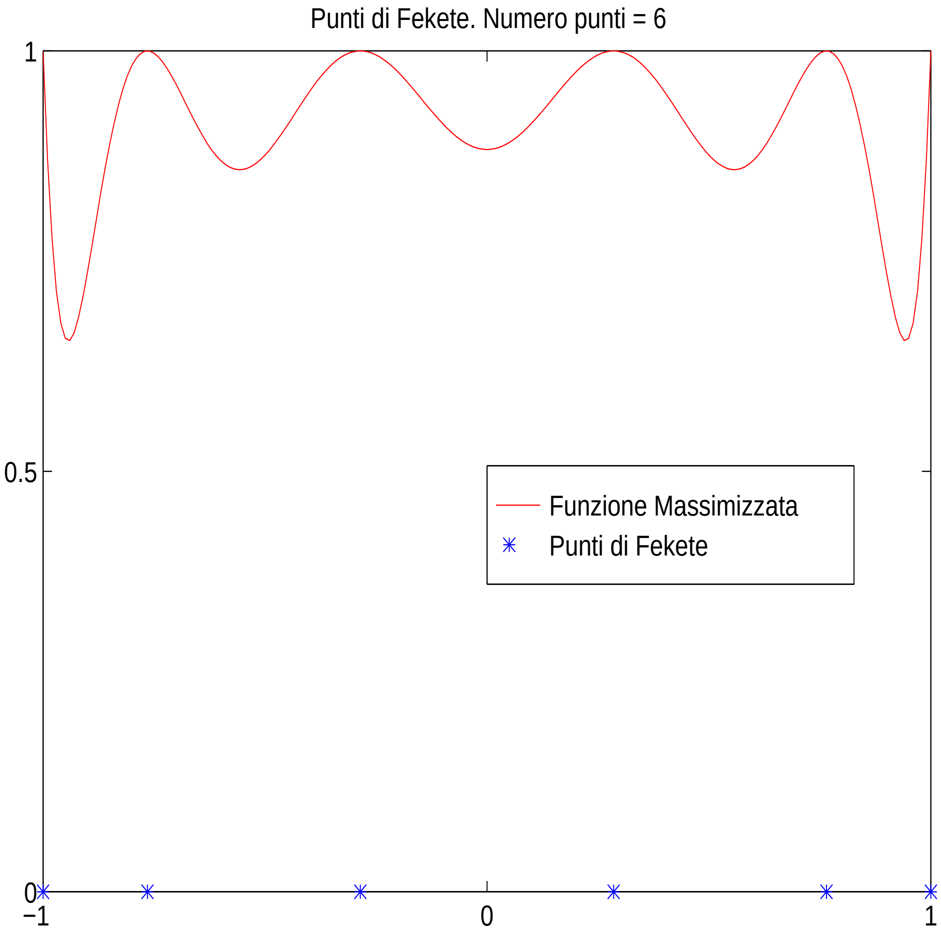
$$\Phi_n(X) = \max_{-1\le x\le 1} \sum_{k=0}^{n} l_k^2(X;x) \ .$$

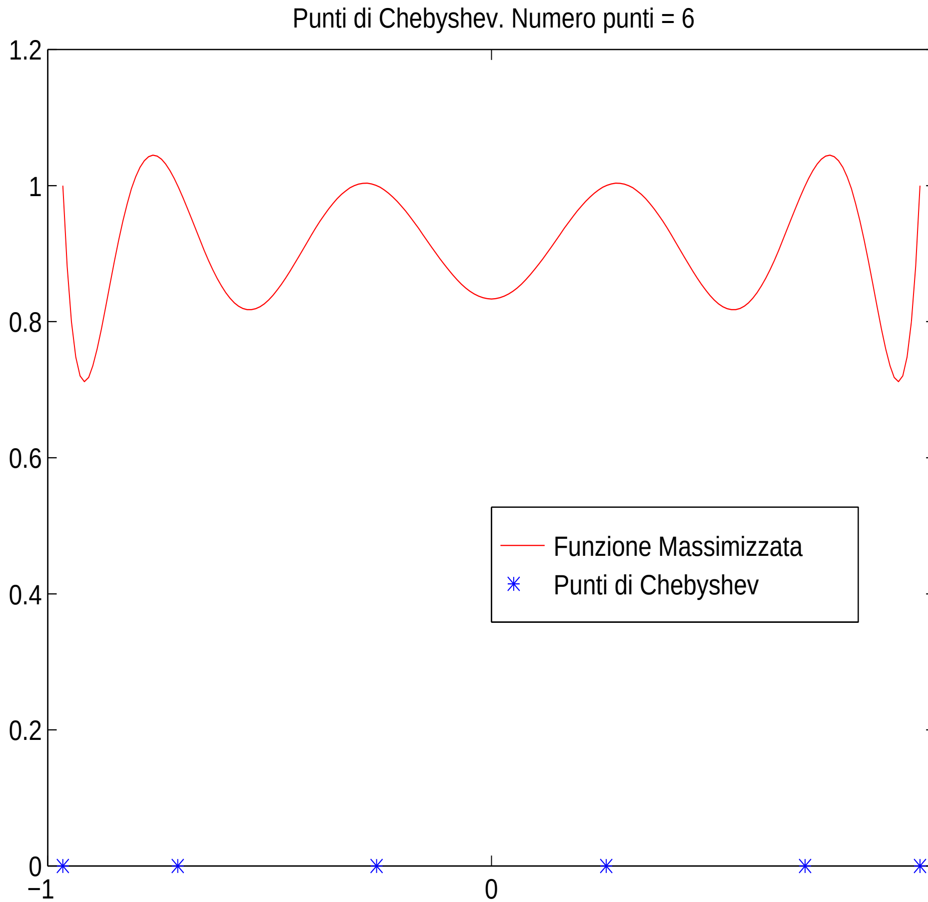
Fejér provó che per i punti di Fekete $\sum_k l_k^2(x) \le 1$ da cui

$$\Phi_n(F) = 1, \qquad \Lambda_n(F) \le \sqrt{n+1} \ .$$

Esempio: per **n=5** i punti di Fekete sono: $\pm 1,\ 0, \pm 0.65466$; quelli di Chebyshev sono:$\pm 0.95106,\ 0, \pm 0.58779$;

Punti di Fekete: III





Lutmann e Rivlin **numericamente** calcolarono $\Lambda_n(F)$ per n=3,...,40 e *congetturarono* le seguenti proprietà (non ancora provate!) per l'insieme F.

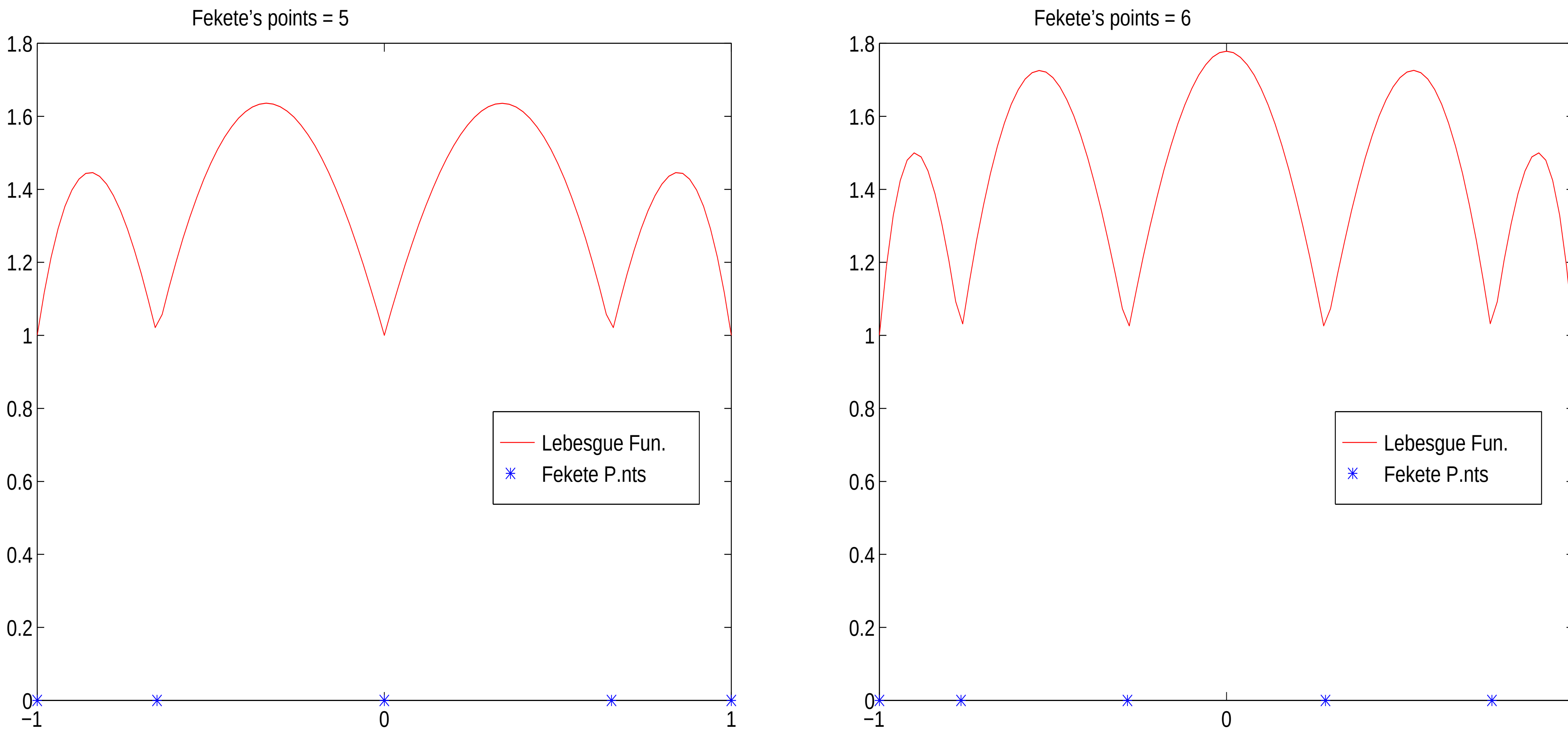
- $\Lambda_n(F) < \Lambda_n(T), \quad n \geq 4$.
- I massimi relativi di $\lambda_n(F; x)$ su $[f_i, f_{i+1}]$ decrescono in [0,1] e perciò

$$\Lambda_n(F) \quad in\ x = 0 \quad n\ pari$$
$$\Lambda_n(F) \quad in\ x \approx 0 \quad n\ dis^{pari}$$

Infine Sundermann (1983) provò

$$\Lambda_n(F) = \mathcal{O}(\log(n))$$

Punti di Fekete: V



Alcune proprietà dei punti di Fekete

1. Sono zeri di $(x^2-1)P'_n(x)$ con $P_n(x)$ pol. di **Legendre** di grado n.
2. Sono definibili su ogni compatto in ogni dimensione.
3. Sono i punti che *massimizzano il modulo del determinante di Vandermonde*.
4. $\Lambda_n = \mathcal{O}(\log(n)) \Rightarrow \lim_{n\to\infty} \Lambda_n^{\frac{1}{n}} = 1$
5. Sia E un insieme compatto, allora

$$\lim_{n\to\infty} |VDM(f_1, ..., f_n)|^{\frac{2}{n(n-1)}} = \rho(E)$$

ove $\rho(E) = \lim_{n\to\infty}(M_n(E))^{\frac{1}{n}}$ con $M_n(E) = \max_E |T_n(x;E)|$ è la **costante di Chebyshev** detta anche **diametro transfinito o capacità di E**.

Sequenze di Leja: I

Sia E compatto $E \subset \mathbb{C} \approx \mathbb{R}^2$. F. Leja (Ann. Pol. Math. 4, 1957) propose una sequenza di punti **estremali** .

Scelto $\lambda_1 \in E$. λ_2 è tale che $|\lambda_2 - \lambda_1| = \max_{z \in E} |z - \lambda_1|$. Quindi λ_3 $|(\lambda_3 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_1)| = \max_{z \in E} |z - \lambda_1||z - \lambda_2|$ e in generale

$$|(\lambda_{n+1} - \lambda_n) \cdots (\lambda_{n+1} - \lambda_1)| = \max_{z \in E} \prod_{k=1}^{n} |z - \lambda_k| \ .$$

Poiché la funzione $\Phi(z) = \prod_{k=1}^{n} (z - \lambda_k)$ è analitica, per il *principio del massimo per funzioni analitiche* tutti i punti $\{\lambda_p\}$ (eccetto λ_1 al più) appartengono al bordo di E.

Sequenze di Leja: II

1. I punti $\{\lambda_i\}$ possono essere *estratti* da una discretizzzione di $[a, b]$ e anche in modo rapido "fast Leja points" di Baglama & al., ETNA (1998);
2. $\{\lambda_i\}$ è una sequenza stabile per l'interpolante in forma di Netwon (cf. Reichel, BIT (1990));
3. sequenze di Leja su $[a, b]$, come pure i punti di Chebyshev, Fekete hanno asintoticamente la distribuzione dell' **arcocoseno**.

Punti di Leja e Fekete

Sono legati dalla massimizzazione di $VDM(X_n)$ su un *fissato* insieme $X_n = \{x_1, ..., x_n\} \in E$.

- $F_n = \{f_1, ..., f_n\}$ sono quelli che *globalmente* $\max_{X_n \in E} |VDM(X_n)|$.
- $|VDM(X_n)| = \prod_{i=1}^{n-1} |x_n - x_i| \cdot |VDM(X_{n-1})|$, l' n-esimo punto di Leja risolve (localmente) il problema $\max_{x \in E} \prod_{i=1}^{n-1} |x - x_i|$.

F_n e L_n permettono di minimizzare **la costante di Lebesgue** poiché minimizzano il valore dei

$$l_i(x) = \frac{VDM(X_n^{(i)})}{VDM(X_n)} \ ,$$

con $X_n^{(i)}$ l'insieme X_n ove x è considerata al posto di x_i.

1.2 Polinomi continui “a tratti”

Idea: Limitare il grado del polinomio di interpolazione aumentando la flessibilità dell’interpolante.

Esempio di polinomi continui a tratti: interpolazione lineare.
Dati i valori $w_i, \ i = 0, 1, ..., n$, l’interpolante lineare nell’ i-esimo intervallino $[x_i, x_{i+1}]$ è

$$s(x) = \frac{(x_{i+1} - x)w_i + (x - x_i)w_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} \ .$$

Generalizziamo .....

Definizione 1 s è un polinomio continuo a tratti in [a,b] di grado k se $s \in \mathcal{C}[a, b]$ e se esistono dei punti $\xi_i, \ i = 0, ..., n$
$a = \xi_0 < \xi_1 < \cdots < \xi_n = b$ cosicché s è un polinomio di grado $\leq k$ su ciascun intervallino $[\xi_i, \xi_{i+1}], i = 0, ..., n - 1$.

Definizione 2 Si dice che s è una funzione spline di grado k se oltre ad essere un polinomio di grado k è $\mathcal{C}^{k-1}[a,b]$. In tal caso i punti $\xi, i = 1, ..., n-1$ vengono detti *nodi* (interni).

Notazione: $\mathcal{S}(k; \xi_0, \xi_1, ..., \xi_n)$ è lo spazio lineare delle splines di grado k.

Una spline si può scrivere

$$s(x) = \sum_{j=0}^{k} c_j x^j + \frac{1}{k!} \sum_{j=1}^{n-1} d_j (x - \xi_j)_+^k, \;\; x \in [a,b].$$

La funzione $(x - \xi_j)_+^k$ si chiama **potenza troncata**.

Ci sono $k+n$ parametri (c_j e d_j) che implica che lo spazio delle splines di grado k ha dimensione $n+k$.

Funzioni splines: II

Esempio: splines cubiche ($k = 3$) (le più usate).

Ordine di approssimazione: se $f \in \mathcal{C}^{k+1}[a, b]$ e se n (numero nodi) è variabile, allora si prova che

$$\min_{s \in \mathcal{S}(k;\xi_0,\xi_1,\ldots,\xi_n)} \|f - s\| = \mathcal{O}(h^{k+1})$$

con $h = \max_{1 \leq 0 \leq n-1} |\xi_{i+1} - \xi_i|$.

Base dello spazio: **B-splines**.

Sia $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$ (o $\{x_i\}_{i=-\infty}^{+\infty}$) una sequenza finita (o infinita) crescente di numeri reali ($x_i < x_{i+1}$), detti *nodi* che per ora assumiamo **distinti**.

Definizione 3 *La i-esima B-Spline di ordine k, che si indica con $B(x; x_i, ..., x_{i+k})$ (grado $k-1$) è la k-esima differenza divisa della funzione $p(t,x) = (t-x)_+^{k-1}$*

$$\mathbf{B(x; x_i, ..., x_{i+k}) = (x_{i+k} - x_i) p[x_i, ..., x_{i+k}](x)} \; ,$$

dove $p[\cdot](x)$ è la $k-esim^a$ differenza divisa su $x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k}$ di $p(\cdot, x)$ vista come funzione di x.

$==>$ Per capire meglio, farsi l'esempio nel caso di $k = 2$ (B-splines lineari).

Proposizione 1 **Proprietà.**

- $B_{i,k}(x) = 0$ se $x \notin (x_i, x_{i+k}]$.
- $B_{i,k} > 0$ nel suo supporto $[x_i, x_{i+k})$
- $\forall x \in \mathbb{R}$, $\sum_{i=-\infty}^{\infty} B_{i,k}(x) = 1$ o equivalentemente

$$\int_{\mathbb{R}} B_{i,k}(x)dx = 1 \ .$$

Le B-splines sono quindi *a supporto compatto* e *positive* e formano *partizione dell'unità*.

Si basa sulla **regola di Steffensen** per la differenza divisa del prodotto di due funzioni f e g.

Proposizione 2 Siano f e g due funzioni sufficientemente differenziabili e i punti $x_1 \leq \ldots \leq x_{n+1}$ siano dati. Allora

$$(f \cdot g)[x_1, \ldots, x_{n+1}] = \sum_{j=1}^{n+1} f[x_1, \ldots, x_j] g[x_j, \ldots, x_{n+1}] \tag{2}$$

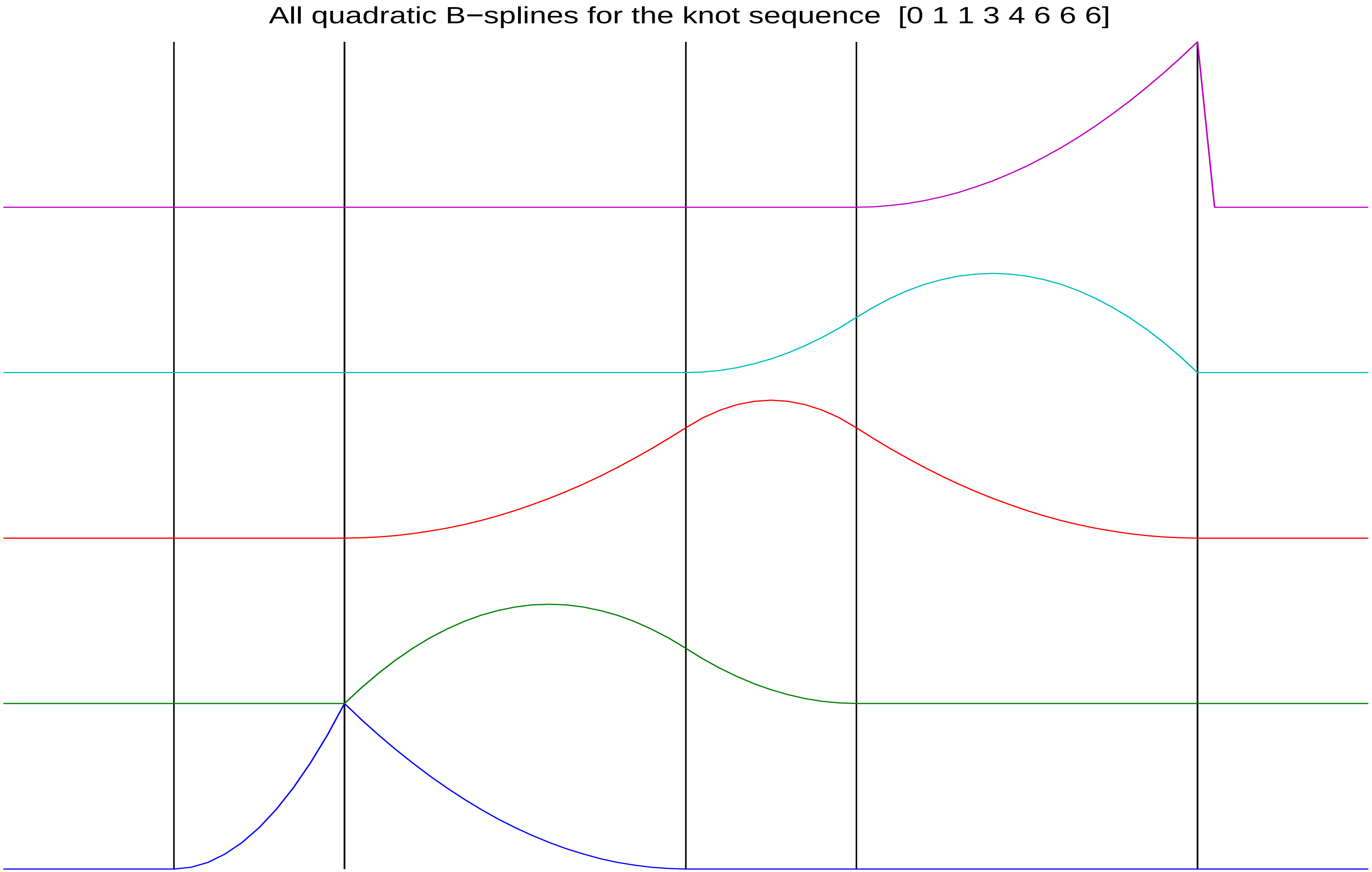
B-splines: IV

Le B-splines soddisfano la ricorrenza (utile ai fini computazionali!):

$$\begin{aligned} B_{i,l}(x) &= \left(\frac{x_i - x}{x_{i+l} - x_i} + 1 \right) B_{i+1,l-1}(x) + \\ &+ \left(\frac{x - x_i}{x_{i+l} - x_i} \right) B_{i,l-1}(x) \ . \end{aligned}$$

l indica l'ordine (= grado +1), i l'indice di intervallo. La relazione si innesca a partire da $B_{i,1}(x) = 1$ se $x \in [\xi_i, \xi_{i+1}]$.

Bsplines di ordine 3 (quadratiche)



Interpolazione con funzioni spline: I

Sia $f(x)$ una funzione nota su $x = t_1, x = t_2, ..., x = t_m$. Si desideri interpolarla per mezzo di una spline $S(x)$ di ordine n (grado n-1) con prescritti *nodi interni* $x_1, ..., x_{N-1}$. Inoltre $t_1 < t_2 < ... < t_m$ e

$$t_1 < x_1 < x_2 < ... < x_{N-1} < t_m \; .$$

I parametri da determinare sono

$$N + n - 1$$

che verranno determinati dalle condizioni

$$S(t_j) = f(t_j), \quad j = 1, ..., m \; . \quad (**)$$

Per l'unicità della soluzione è necessario che **m=N+n-1**

Interpolazione con funzioni spline: II

I. J. Schoenberg e A. Whitney (1953) hanno dimostrato che *esiste un'unica* soluzione del problema **se e solo se**

$$
\begin{aligned}
t_1 < x_1 &< t_{n+1} \\
t_2 < x_2 &< t_{n+2} \\
&\vdots \\
t_{N-1} < x_{N-1} &< t_m
\end{aligned}
\tag{3}
$$

Osservazione. Non sono richieste informazioni circa le derivate finali. In tal caso il problema d'interpolazione è trattato come un normale problema di interpolazione polinomiale.

Possiamo scrivere $S(x) = \sum_{i=1}^{m} c_i B_i(x)$, dove B_i sono B-spline di ordine n con nodi **interni** la sequenza $x_1, ..., x_{N-1}$. Perciò (**) diventa

$$\sum_{i=1}^{m} c_i B_i(t_j) = f(t_j), \quad j = 1, ..., m \ . \qquad (4)$$

ovvero, in forma matriciale, $A\mathbf{c} = \mathbf{f}$

Costruiamo le B-spline $B_i, \ i = 1, ..., m$. Aggiungiamo dapprima $2n$ nodi addizionali:

$x_{1-n}, ..., x_0 \leq t_1; \qquad x_{1-n} < x_{2-n} < \cdots < x_0 \ .$

$$\begin{array}{rcl} t_m & \geq & x_N, x_{N+1}, ..., x_{N+n-1}; \\ x_N & > & x_{N+1} > \cdots > x_{N+n-1} \ . \end{array}$$

Nota. I $2n$ nodi addizionali possono essere presi **coincidenti** (Carrasso, Laurent 1969).
Per la proprietà delle B-spline di avere supporto minimo cioè

$$B_{i,n}(x) = \begin{cases} > 0 & x_{i-n} \leq x < x_i \\ = 0 & altrimenti \end{cases}$$

si ha che la matrice A ha *al più* n elementi diversi da zero per ogni riga. Non solo, tale matrice è anche **stocastica** (somma x righe = somma x colonne = 1)

Interpolazione con funzioni spline: V

Esempio 1 $N = 6$, $n = 4$ (spline cubiche) con nodi

$$
\begin{aligned}
a = t_1 \quad &< \quad t_2 < x_1 < t_3 < x_2 < x_3 < t_4 < t_5 < t_6 < x_4 < t_7 < t_8 < \\
&< \quad x_5 < t_9 = b \;.
\end{aligned}
$$

La matrice A ($N + n - 1$), 9×9 sarà :

$$
A = \begin{bmatrix}
\times & & & & & & & & \\
\times & \times & \times & \times & & & & & \\
 & \times & \times & \times & \times & & & & \\
 & & & \times & \times & \times & \times & & \\
 & & & \times & \times & \times & \times & & \\
 & & & \times & \times & \times & \times & & \\
 & & & & \times & \times & \times & \times & \\
 & & & & \times & \times & \times & \times & \\
 & & & & & & & & \times
\end{bmatrix}
$$

Shannon's sampling theory: dato un segnale limitato in banda $s(x)$ esso può essere ricostruito dai suoi campionamenti (Nyquist rate) s_k mediante $\mathbf{s(x)} = \sum_{\mathbf{k}\in\mathbb{Z}} \mathbf{s_k}\mathrm{sinc}(\mathbf{x}-\mathbf{k})$.

Nota: $\mathrm{sinc}(0) = 1, \mathrm{sinc}(k) = 0,\ k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$. Nel caso discreto tale campionamento da stime poco accurate.

In alternativa, si possono usare **spline cardinali** e relative **Bplines cardinali**. Bpline cardinali di ordine n si ottengono facendo la convoluzione $n+1$volte di

$\beta^0(x) = 1, |x| < 1/2,\ \beta^0(x) = 0.5,\ |x| = 1/2$ e altrove 0.

$\lim_{n\to\infty} \beta^n(x) = \mathrm{sinc}(x)$.

$$\mathbf{s(x)} = \sum_{\mathbf{k}\in\mathbb{Z}} \mathbf{s_k}\beta^{\mathbf{n}}(\mathbf{x}-\mathbf{k}) \quad .$$

Tale scelta è più smooth e meno costosa computazional-

Smoothing spline

Smoothing: è l'altro modo di fare data fitting con spline.

Problema 2 Siano dati i punti $(x_i, y_i),\ i = 1, \ldots, n$ con $y_i = f(x_i)$.

Trovare la funzione f che minimizza

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 + \alpha \int_{x_1}^{x_n} (f^{(p)}(x))^2 dx \ .$$

La risultante curva è un polinomio continuo a tratti di grado $2p-1$ Il primo termine misura la vicinanza della funzione di fitting dai dati. Il secondo penalizza la curvatura della funzione e α il collegamento tra i due termini. Se $0 < \alpha < \infty$, Schoenberg provò che tale f è la spline naturale di grado $2p-1$. Se $\alpha = 0$, f=interpolante polinomiale;

Nota: i dati sono assunti del tipo *segnale+rumore*

$$y_i = f(x_i) + \epsilon_i, \quad \epsilon_i \approx N(0, \sigma^2),\ i = 1, \ldots, n\,.$$

1.3 Approssimazione polinomiale e polinomi di Bernstein

Si consideri l'intervallo $[a, b] = [0, 1]$. Sia inoltre k (grado) fissato. La base di B-spline sulla sequenza di nodi

$$t_0 = ... = t_k = 0, \quad t_{k+1} = ... = t_{2k+1} = 1 \ ,$$

$B_{i,k}, \ i = 0, 1, ..., k$ sono polinomi di grado k su [0,1] che verificano la ricorrenza:

$$B_{i,k}(x) = xB_{i,k-1}(x) + (1 - x)B_{i+1,k-1}(x) \ ,$$

che è quella delle B-spline con le opportune sostituzioni. Sono detti *Polinomi di Bernstein* di grado k e si denotano con $B_i^k(x)$ o $\beta_i^k(x)$.

Teorema 2 *(Teorema di Weierstraβ)*
Sia $f \in \mathcal{C}[a,b]$. Dato $\epsilon > 0$ è sempre possibile trovare un polinomio $p_n(x)$ (di grado sufficientemente grande) tale che

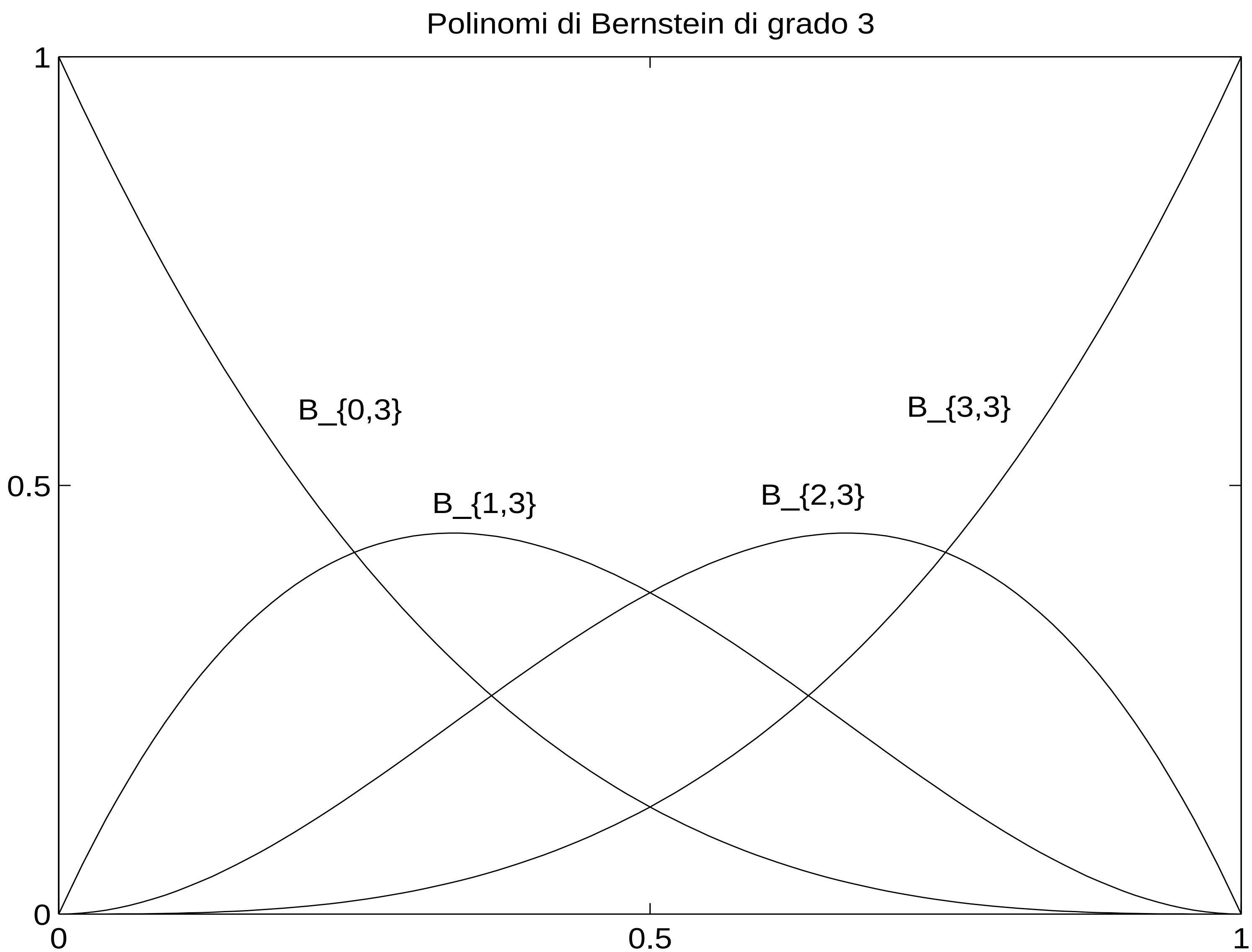
$$|f(x) - p_n(x)| \leq \epsilon, \ \forall x \in [a,b] \ .$$

Definizione 4 Sia f definita su $[0,1]$. Il polinomio di Bernstein di grado n associato ad f è

$$B_n(f;x) = \sum_{k=0}^{n} f(\frac{k}{n}) \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \ .$$

Nota: $B_n(f;0) = f(0), \ B_n(f;1) = f(1)$ ("quasi" interpolante).
$\beta_k^{(n)} = \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k}$ polinomi elementari di Bernstein.

Polinomi di Bernstein di grado 3



Teorema 3 *(di Bernstein)* Sia $f(x)$ limitata in [0,1]. Allora

$$\lim_{n\to\infty} B_n(f;x) = f(x)$$

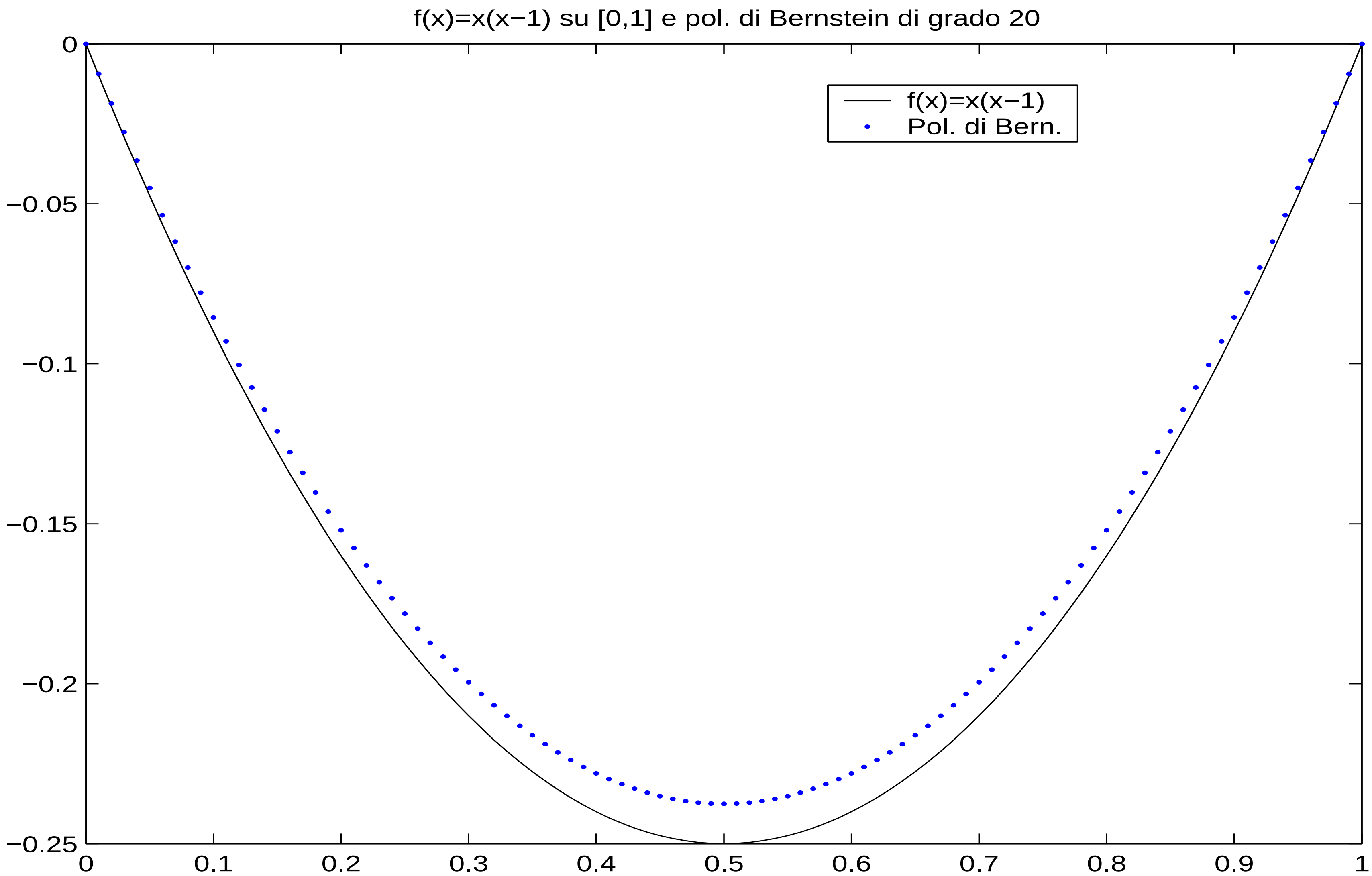
su ogni punto $x \in [0,1]$ dove f è continua. Se inoltre $f \in \mathcal{C}[0,1]$ allora il limite vale uniformemente.

Come corollario a questo teorema possiamo ottenere il Teorema di Weierstraβ.

Corollario 1 Se $f \in \mathcal{C}[0,1]$, allora per ogni $\epsilon > 0$ e per n sufficientemente grande

$$|f(x) - B_n(f;x)| \leq \epsilon \;\; \forall x \in [0,1] \; .$$

Approssimazione con operatori di Bernstein



Sia $t \in [\alpha, \beta] \subset \mathbb{R}$ il parametro di una curve parametrica e $P_0, P_1, ..., P_{n-1}$, n punti del piano.

1. La **curva Bspline** di ordine m associata al **poligono di controllo** individuato dai punti P_i è la curva

$$S(t) = \sum_{i=0}^{n-1} P_i B_{i,m}(t), \; t \in [\alpha, \beta] \; .$$

2. La **curva di Bézier** di grado $n-1$ associata al **poligono di controllo** individuato dai punti P_i è la curva

$$S(t) = \sum_{i=0}^{n-1} P_i B_i^{n-1}(t), \; t \in [\alpha, \beta] \; .$$

Problema: Dati $n+1$ punti $(x_i, f_i), i = 0, ..., n$ trovare un polinomio di grado $m \leq n$ (in generale $m \ll n$) t.c. siano minime le deviazioni (errori) $p(x_i) - f_i, \quad i = 0, ..., n.$

Soluzione: Si consideri il funzionale quadratico

$$
\begin{aligned}
E(p) &= \sum_{i=0}^{n} |p(x_i) - f_i|^2 = \sum_{i=0}^{n} (p(x_i) - f_i)^2 \\
&= \sum_{i=0}^{n} \{a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_m x_i^m - f_i\}^2 \ .
\end{aligned}
$$

Nota. Il funzionale $E(p)$ dipende dai coefficienti del polinomio p, cioè da $a_0, \cdots, a_m$: scriveremo perció $E(a_0, \cdots, a_m)$.

Unicità della soluzione: I

Come noto, condizione necessaria affinchè si raggiunga il minimo è che

$$\frac{\partial E}{\partial a_j} = 0, \quad j = 0, ..., m. \qquad (*)$$

Le condizioni (*) si riscrivono sotto forma di sistema detto delle (equazioni normali)

$$B\mathbf{a} = \mathbf{z} \ ,$$

con $B = (b_{ij})_{i,j=1}^{m+1}$ matrice simmetrica $(m+1) \times (m+1)$ tale che $b_{ij} = \sum_{i=0}^{n} x_i^{i+j-2}$ e il vettore colonna $\mathbf{z}$ tale che $z_i = \sum_{j=0}^{n} x_j^{i-1} f_j$. **Nota:** gli elementi di B dipendono solo dalla base (polinomiale) $\{1, x, x^2, \ldots\}$ e dai nodi x_i ma non di valori f_i.

Unicità della soluzione: II

Teorema 4 Supponiamo $x_0, ..., x_n$ distinti e $m \leq n$. Allora esiste ed è unico il polinomio $p,\ deg(p) \leq m$ in cui $E(p)$ è minimo.

I coefficienti $a_0, \cdots, a_m$ sono determinati risolvendo $B\mathbf{a} = \mathbf{z}$.

- Dal teorema segue che *le equazioni normali (*) sono anche una condizione sufficiente per l'esistenza della soluzione.*
- Considerata la matrice A di elementi $a_{i,j} = x_i^j,\ i = 0, ..., n,\ j = 0, ..., m$ e il vettore $\mathbf{f} = (f_0, ..., f_n)$ allora $B = A^T A\ ,\ \ \mathbf{z} = A^T\mathbf{f}$ e le equazioni normali diventano

$$A^T A\mathbf{a} = A^T\mathbf{f}$$

che è sistema simmetrico e semidefinito positivo.

Dato il sistema $Ax = b$ con $A,\ m \times n$, $x,\ n \times 1$ e $b,\ m \times 1$ e $m > n$. *Tale sistema in generale non ha soluzione unica*. Una soluzione approssimata si ha cercando quel x tale sia minima

$$\|Ax - b\|_p, \quad p = 1, 2, \infty\,.$$

Definizione 5 La soluzione x^* di

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 \tag{5}$$

si chiama la soluzione ai **minimi quadrati del sistema** $Ax = b$.

Per la soluzione del problema si fa uso della **decomposizione ai valori singolari di A**.

Teorema 5 **(Decomposizione SVD).** Data A, $n \times m$. Ci sono due matrici ortogonali U e V di ordini m e n (quadrate), tali che $F = V^T AU$ è una matrice rettangolare "diagonale" $n \times m$

$$F = \begin{bmatrix} \mu_1 & & 0 & & \\ & \mu_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & \mu_r & \\ & & & & 0 \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix}.$$

I numeri $\mu_i,\ i = 1, ..., r$ sono detti valori singolari di A che sono **numeri positivi** e che si possono anche ordinare $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \cdots \mu_r > 0$.

Dim: K. E. Atkinson, *An introduction to Numerical Analysis, pp. 478-479.*

Soluzione ai minimi quadrati di sistemi sovradeterminati con SVD: III

Teorema 6 Data A, $m \times n$, $m \geq n$ matrice di reali. Definiamo $z = U^T x$, $c = V^T b$. Allora la soluzione $x^* = Uz^*$ del problema di $\min_{x \in \mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2$ è data da

$$z_i^* = \frac{c_i}{\mu_i}, \quad i = 1, ..., r$$

con $z_{r+1}^*, ..., z_n^*$ arbitrari. Se $r = n$, x^* è unica. Quando $r < n$ **la soluzione ai minimi quadrati** è quella con $z_i^* = 0, \; i = r + 1, ..., n$.

In tal caso il minimo vale

$$||Ax^* - b||_2 = \left(\sum_{j=r+1}^{m} c_i^2 \right)^{1/2} .$$

Definiamo la matrice $n \times m$,

$$F^+ = \begin{bmatrix} \mu_1^{-1} & 0 & & & \dots & & 0 \\ & \ddots & & & & & \\ \vdots & & \mu_r^{-1} & & & & \\ & & & 0 & & & \\ & & & & \ddots & & \\ 0 & & \dots & & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

e quindi $A^+ = UF^+V^T$. Allora

$$x^* = Uz^* = UF^+c = UF^+V^Tb = A^+b \; .$$

La matrice A^+ è detta **inversa generalizzata di A** e produce la soluzione ai *minimi quadrati* del sistema $Ax = b$.

Nota. Usando la SVD abbiamo anche ($rg(A) = n$):

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)} = \mu_1 \ , \quad \kappa(A)_2 = \|A\| \|A^+\| = \frac{\mu_1}{\mu_n} \, .$$

Equazioni normali: $A^T A x = A^T b$. SVD: $A = V F U^T$, sostituiamo nelle equzioni normali e abbiamo

$$U F^T F U^T x = U F^T V^T b$$

moltiplico per U^T ricordando che $z = U^T x, \ c = V^T b$. Otteniamo

$$F^T F z = F^T c$$

che stabilisce l'equivalenza delle equazioni normali alla minimizzazione di $\|Ax - b\|_2$.

Il funzionale che si considera è:

$$E_x(p) = \sum_{i=0}^{n} w_i(x) \left[p(x_i) - f_i \right]^2$$

dove $w_i(x)$ sono funzioni peso *positive*.

Come scegliere tali funzioni peso?

- Positive e relativamente grandi quando $|x_i - x| < \epsilon, \forall \epsilon > 0$.
- Positive e relativamente piccole quando $|x_i - x| > \epsilon, \forall \epsilon > 0$.

MLS: equazioni normali

Il sistema (*) delle equazioni normali ora è tale che $b_{ij} = \sum_{i=0}^{n} w_i(x) x_i^{i+j-2}$ e il vettore colonna $\mathbf{z}$ tale che $z_i = \sum_{j=0}^{n} w_j(x) x_j^{i-1} f_j$.

Il corrispondente Teorema di esistenza e unicità è:

Teorema 7 Esiste un unico polinomio $\hat{p} = \sum_{i=0}^{m} \hat{a}_i \, x^i$ di grado $\leq m$ che minimizza il funzionale $E_x(p)$.

Nota: I coefficienti $\{\hat{a}_i\}$ dipendono da x. Ció implica chedovremo risolvere un sistema di equazioni normali per **ogni** punto x. Per tale motivo questo metodo si applica solo per valori **piccoli** di m.

MLS: scelta delle funzioni peso $w_i(x)$

Consideriamo e^{-x^2}. È decrescente per $x \geq 0$.

Dato un generico intervallo $[a, b]$ si può considerare $e^{-\frac{x^2}{4(b-a)}}$.

Perció **possibili** scelte sono:

$$w_i(x) = \text{exp}\left\{-\frac{(x-x_i)^2}{4(b-a)}\right\} ,$$

$$w_i(x) = \text{exp}\left\{-\frac{(x-x_i)^2}{50}\right\} ,$$

$$w_i(x) = \text{exp}\left\{-\frac{(x-x_i)^2}{20}\right\} .$$

$==>$ `mls.m`

Si desidera che la risultante curva interpoli i punti dati.

Ad esempio, se $w_i(x) = \exp\left\{-\frac{(x-x_i)^2}{20}\right\}$ i pesi saranno "grandi" sui punti x vicini a x_i e "piccoli" su punti lontani.

Perció il trucco è di prendere pesi tali da essere ∞ in x_i.

Ciò suggerisce funzioni peso del tipo:

$$w_i(x) = \frac{1}{(x-x_i)^2}, \quad w_i(x) = \frac{1}{(x-x_i)^4}$$

oppure

$$w_i(x) = \frac{e^{-(x-x_i)^2}}{(x-x_i)^2} \, ,$$

e quest'ultima si comporta come $1/(x-x_i)^2$ in un intorno di $x = x_i$.

Criteri di scelta delle funzioni peso

- in relazione alle ascisse: maggiore o minore rapporto di "attenuazione";
- interpolazione sí o no;
- natura della singolarità in $x = x_i$;
- supporto locale.

L'ultima richiesta (supporto locale) è soddisfatta prendendo

$$w(x) = \begin{cases} \frac{a}{x^k}\left(1 - \frac{|x|}{d}\right)^2 & |x| \le d \\ 0 & |x| > d \end{cases}$$

in tal caso (-d,d) è il supporto e a è un parametro di scalatura.

Schema di Shepard: I

Il supporto deve essere tale da contenere $m+1$ punti e la curva approssimante $g(x)$ ristretta a [x-d,x+d] può essere definita come un polinomio di grado m.

Il caso $m = 0$ è noto come *schema di SHEPARD*.
In tal caso le equazioni normali si riducono ad una sola equazione (da risolversi per ogni x!):

$$a_0(x) = \frac{\displaystyle\sum_{i=0}^{n} w_i(x) f_i}{\displaystyle\sum_{i=0}^{n} w_i(x)} \, .$$

Schema di Shepard: II

Se $w(x) = 1/x^k, k > 0$ allora Shepard provò che

(i) $0 < k < 1$ la curva interpolante ha una cuspide nei punti di interpolazione fuori è $\mathcal{C}^\infty$,

(ii) $k = 1$ la curva ha degli angoli nei punti x_i;

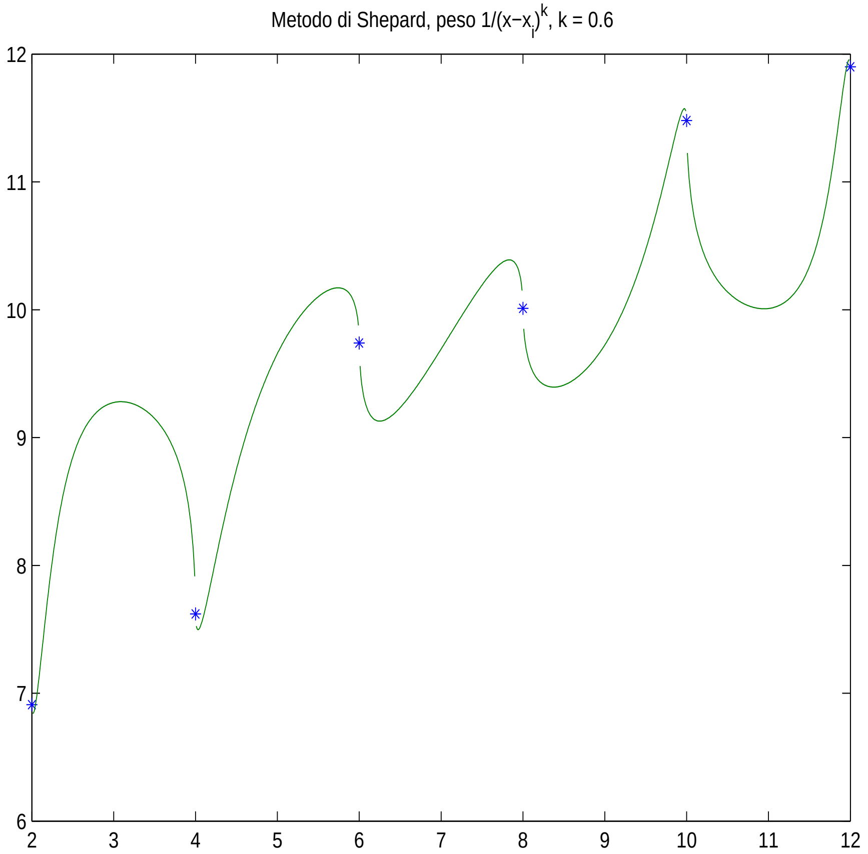
(iii) $k > 1$ essa è globalmente $\mathcal{C}^1$ (fenomeno "flat-spot").

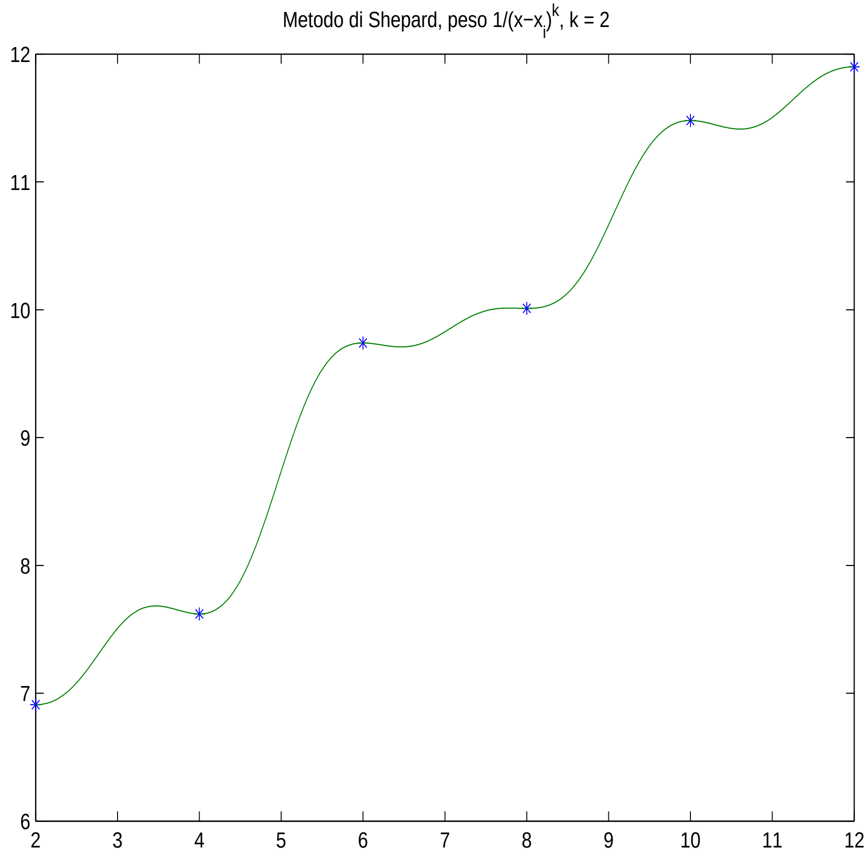
Sia $g(x)$ la risultante curva: allora in (i) e (ii) cioè $0 < k \leq 1$, g interpola $g(x_i) = f_i$, ma non è differenziabile.

Se infine $w_i(x) \equiv 1$ (cioè $k = 0$) allora

$$a_0(x) = \frac{\sum_{i=0}^n f_i}{m+1}.$$

Shepard


Metodo di Shepard, peso $1/(x-x_i)^k$, k = 0.6
12
11
10
9
8
7
6
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12


Metodo di Shepard, peso $1/(x-x_i)^k$, k = 2
12
11
10
9
8
7
6
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12

Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ aperto, limitato e non vuoto.

- $X = \{x_1, ..., x_N\} \subseteq \Omega$, N punti distinti (*data sites*, X è detto *point set*).
- $\{f_1, ..., f_N\}$: i *valori*.

Problema d'interpolazione con RBF: fissa una funzione di base $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$, l'interpolante $s_{f,X}$ to f at X è un elemento dello spazio

$$\mathcal{S}_{\phi,X} = \text{span}\{\phi(\|\cdot - x\|) \ : \ x \in X\} + \mathbb{P}_m^d$$

che soddisfa le condizioni

$$s_{f,X}(x_j) = f_j, \quad j = 1, ..., N \quad (*)$$

RBF II

Una soluzione del problema consiste nel risolvere il sistema lineare

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j \phi(\|x_k - x_j\|) + \sum_{l=1}^{Q} \beta_l p_l(x_k) = f_k, \quad k = 1, ..., N$$

con le ulteriori condizioni $\sum_{j=1}^{N} \alpha_j p_l(x_j) = 0, \quad l = 1, .., Q$, dove $p_1, ..., p_Q$ sono una base di $\mathbb{P}_m^d$, $Q = \binom{m-1+d}{d}$.

La matrice $(N+Q) \times (N+Q)$, $\begin{pmatrix} A_{\phi,X} & P_X \\ P_X^T & 0 \end{pmatrix}$ con $A_{\phi,X} = (\phi(\|x_k - x_j\|))$ e $P_X = (p_l(x_k))$ è invertibile sse valgono (cf. Micchelli *Const. Approx.* 1986) $p(x_k) = 0, k = 1, ..., N \Rightarrow p \equiv 0, \ \forall p \in \mathbb{P}_m^d$:

ϕ è detta essere CPD.

Ancora su: CPD

Definizione Sia $A_{\Phi,X} := (\Phi(x_i, x_j))_{1\leq i,j\leq N}$ invertibile. Φ è detta un kernel CPD di ordine m su Ω, se e solo se per ogni scelta di $X = \{x_1, ..., x_N\} \subseteq \Omega$ di N punti distinti la forma quadratica

$$\alpha^T A_{\Phi,X}\alpha = \sum_{i,j}^{N} \alpha_j \alpha_k \Phi(x_j, x_k)$$

è positiva (non negativa) e inoltre il vettore
$\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_N) \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$ è tale che
$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j p(x_j) = 0, \ \forall p \in \mathbb{P}_m^d$.
In generale $\Phi(x, y) = \phi(\|x - y\|)$, cosicchè $\Phi : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}_+$.

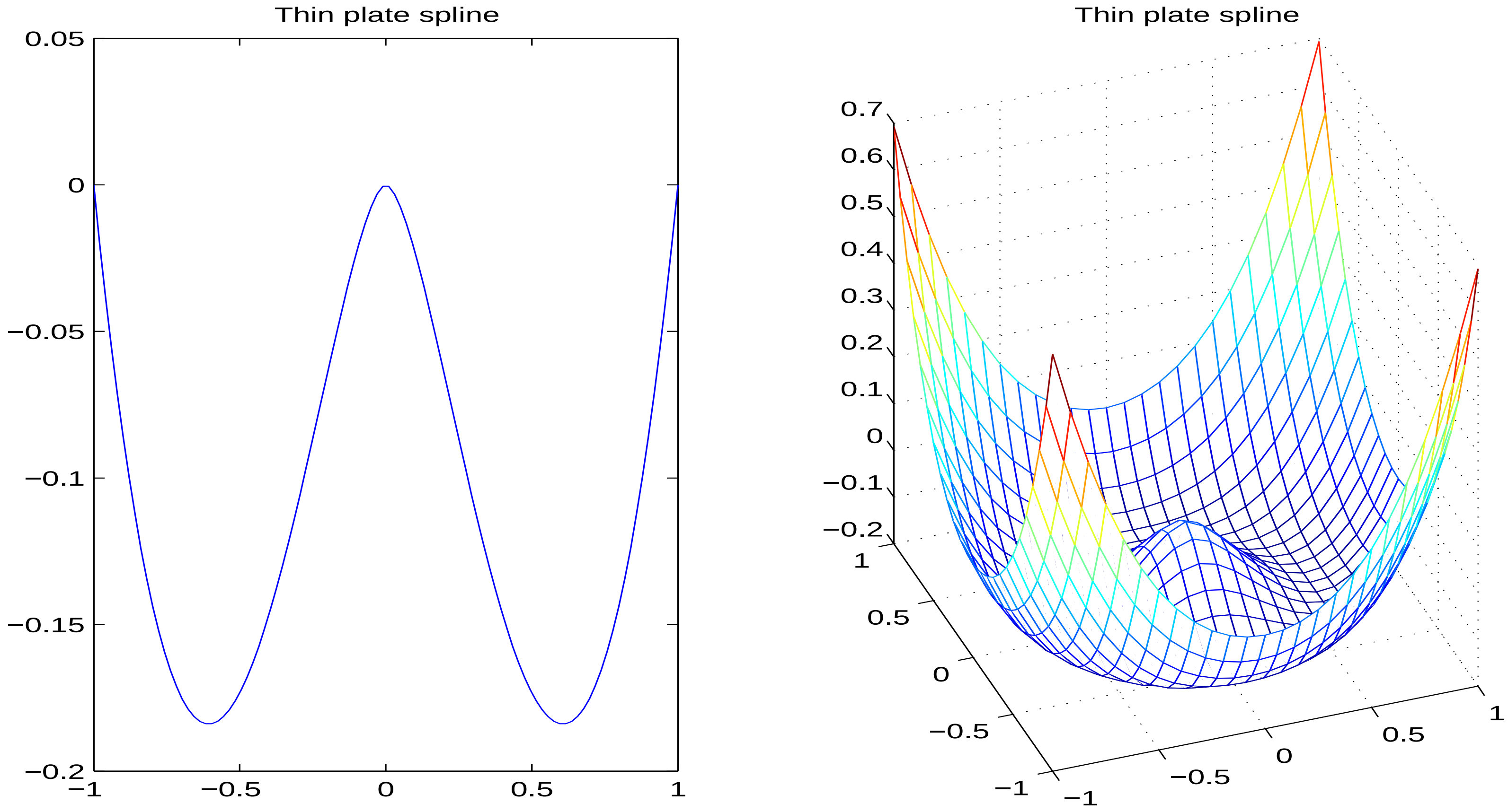
Il caso PD

Se $A_{\Phi,X}$ è *definita positiva* $\forall X \subseteq \Omega$, allora Φ è chiamato **kernel PD** , cioè **CPD di ordine m=0**.

$\Rightarrow$ Si noti che *ogni kernel CPD ha un associato kernel PD* **normalizzato** .$\Leftarrow$

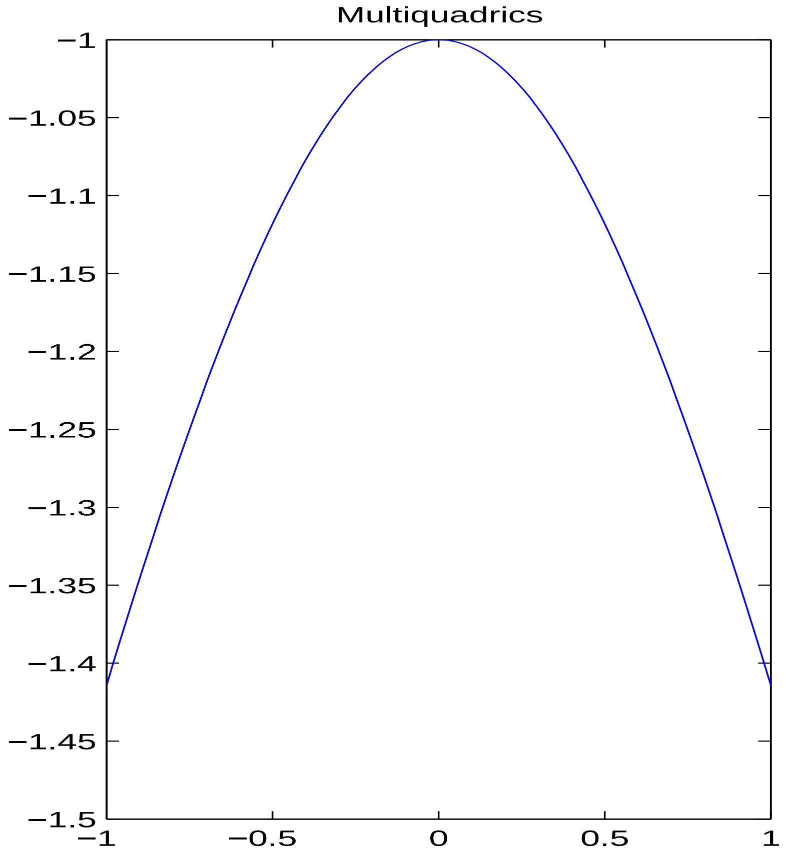
RBF in 1D e 2D: I

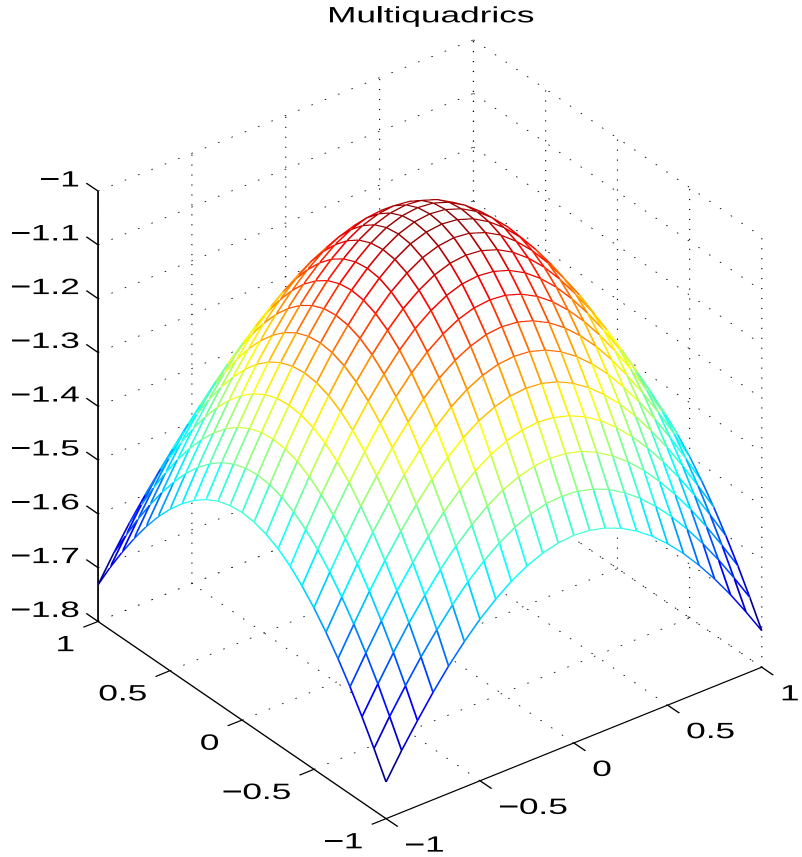
Thin plate spline o surface splines: $\phi(r) = (-1)^{k+1} r^{2k} \log r$, CPD di ordine $m = k + 1$ su ogni $\mathbb{R}^d$. (Nei grafici, $k = 1$.) .



RBF in 1D e 2D: II

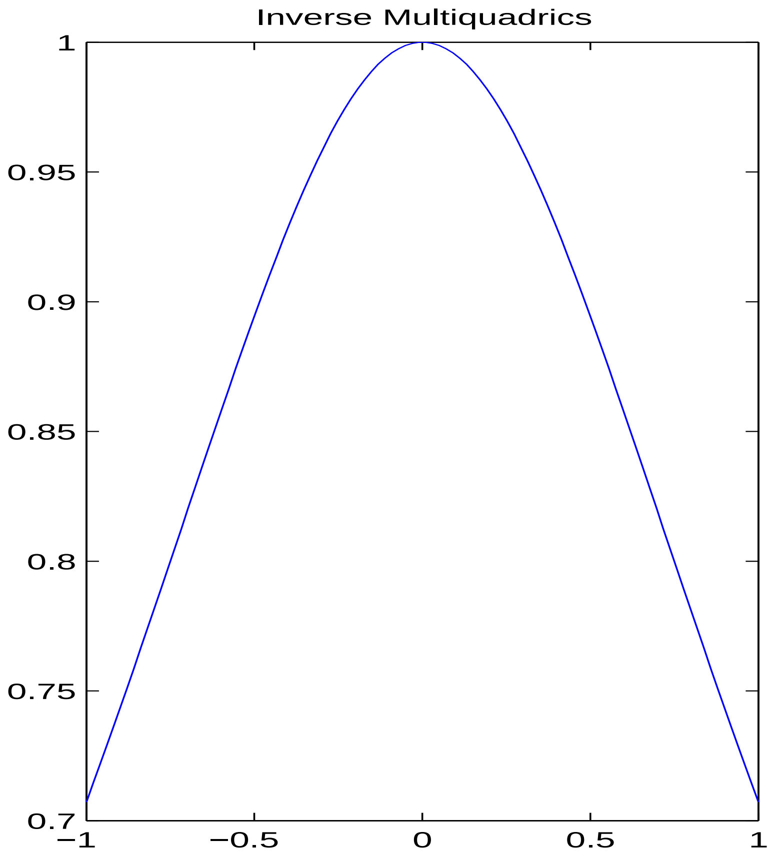
Multiquadrics: $\phi(r) = (-1)^{\lfloor\beta\rfloor}(r^2 + c^2)^\beta,\ c, \beta > 0,\ \beta \notin \mathbb{N}$, CPD di ordine $m > \lfloor\beta\rfloor$, per tutti $d \geq 1$. (Nei grafici $c = 1, \beta = 1/2$.)

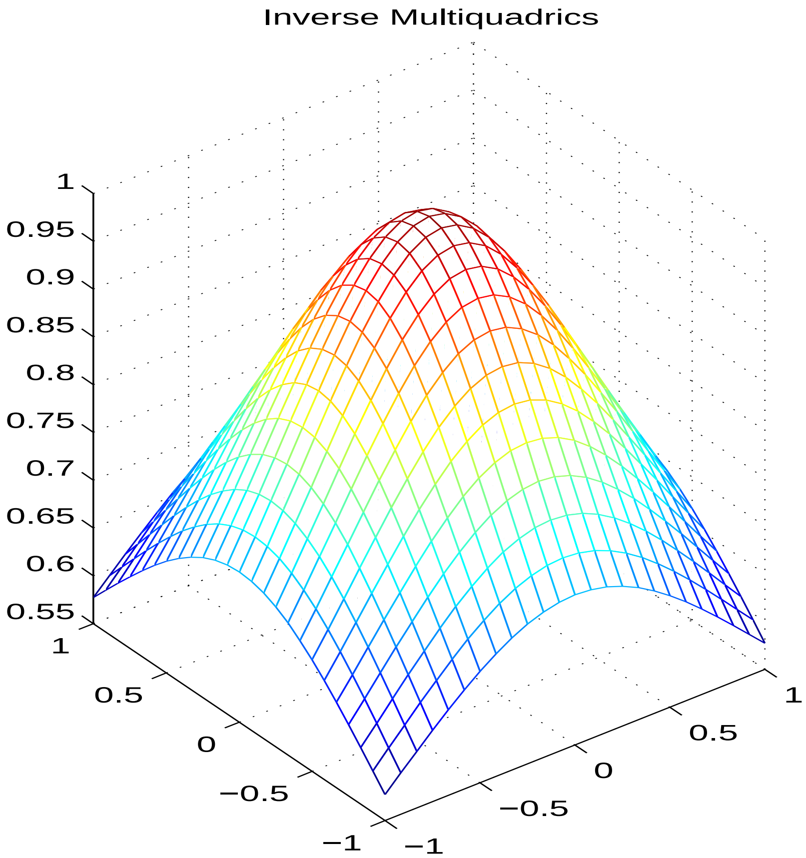




RBF in 1D e 2D : III

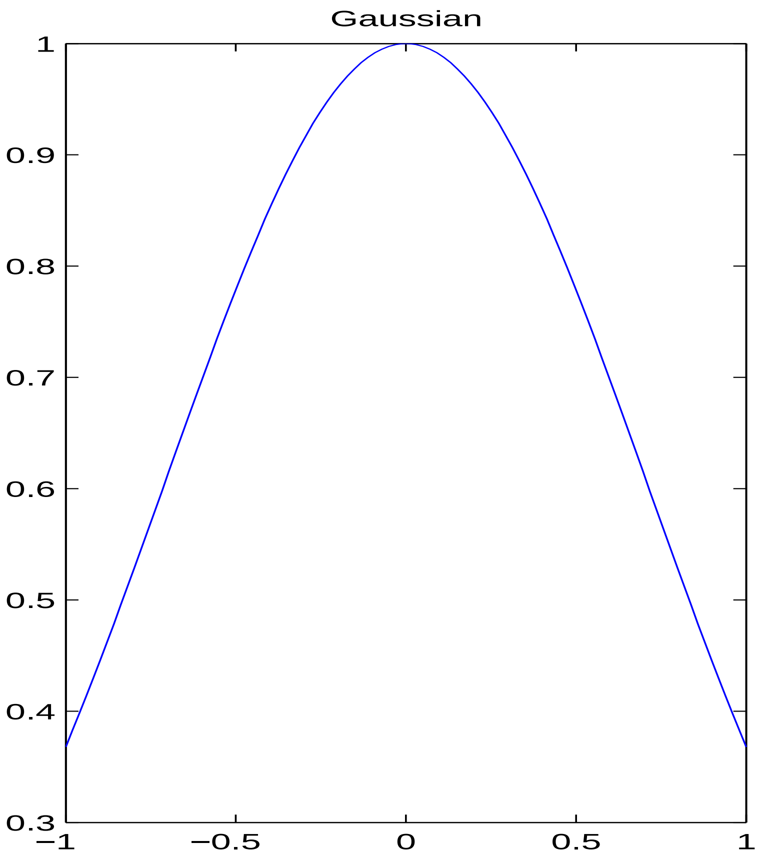
Inverse multiquadrics: $\phi(r) = (r^2 + c^2)^\beta, c > 0, \beta < 0$, PD su $\mathbb{R}^d$ per tutti $d \geq 1$. (Nei grafici $c = 1, \beta = -1/2$)

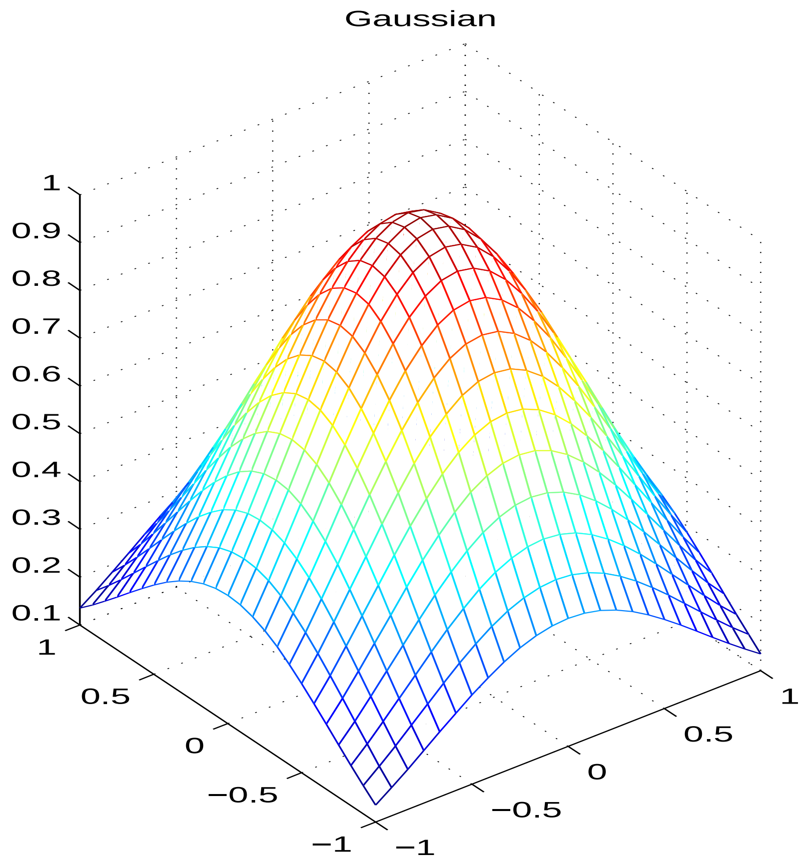




RBF in 1D e 2D: IV

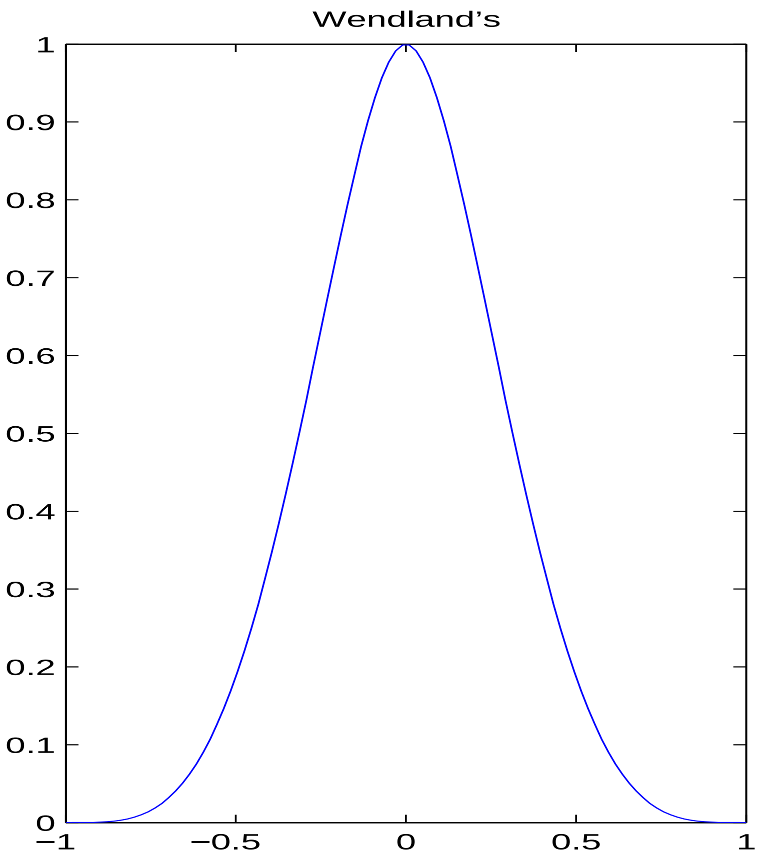
Gaussian: $\phi(r) = \exp(-\alpha\, r^2),\ \alpha > 0$ PD su $\mathbb{R}^d$ per ogni $d \geq 1$.
(Nei grafici, $\alpha = 1$.)

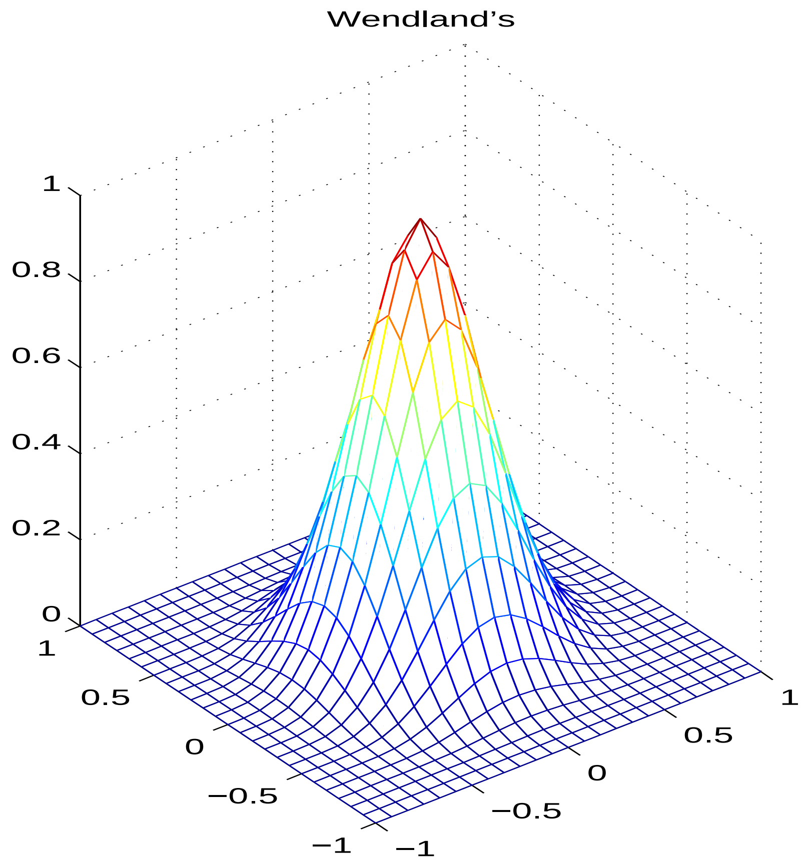




RBF in 1D e 2D: V

4) Wendland: $\phi(r) = (1+4r)(1-r)^4_+$, PD, a supporto compatto e C^2 per $d \leq 3$.





Errore d'interpolazione con RBF

$$|f(x) - s_{f,X}(x)| \leq P_{\Phi,X}(x) \|f\|_\Phi$$

dove $P_{\Phi,X}(x)$ è detta POWER FUNCTION.

- $P_{\Phi,X}(x)$ è la norma del *funzionale d'errore puntuale*;
- Esistono stime dell'errore che limitano $P_{\Phi,X}(x)$ in termini della *fill distance* (cf. Wu, Schaback: IMA J. Numer. Anal, 1993):

$$h_{X,\Omega} = \sup_{x \in \Omega} \min_{x_j \in X} \|x - x_j\|_2 \, ;$$

- Se $X \subseteq Y$ allora $P_{\Phi,X}(x) \geq P_{\Phi,Y}(x), \;\; \forall x \in \Omega$.

Esistenza di punti ottimali per interpolazione con RBF

THEOREM 1. (De Marchi, Schaback, Wendland 2003). Let Ω closed and bounded in $\mathbb{R}^d$, satisfying an interior cone condition and Φ has Fourier transform as before. Then, for every $\alpha > \beta$ there exists a constant $M_\alpha > 0$ with the following property: if $\epsilon > 0$ and $X = \{x_1, \ldots, x_N\} \subseteq \Omega$ are given such that

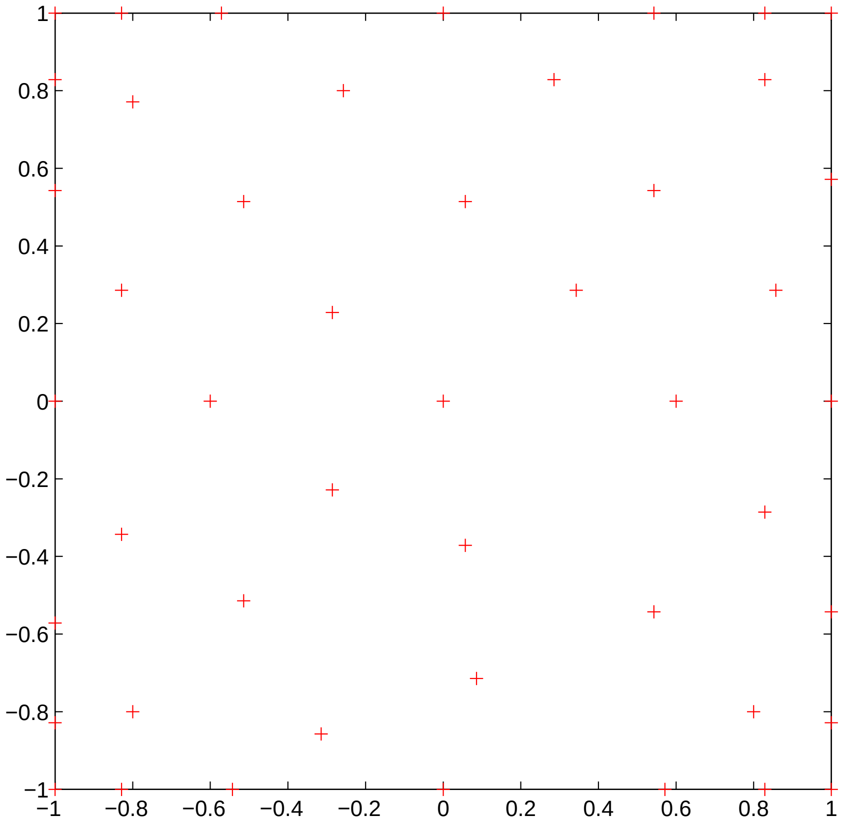
$$\|f - s_{f,X}\|_{L_\infty(\Omega)} \leq \epsilon \|f\|_\Phi, \qquad \text{for all } f \in W_2^\beta(\mathbb{R}^d),$$

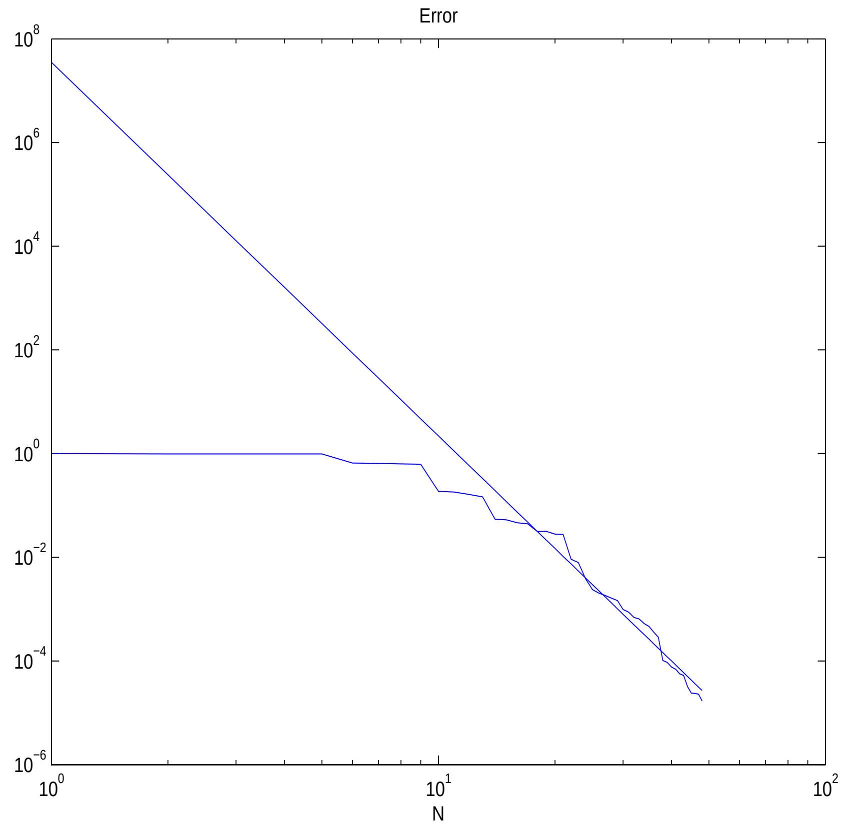
then the fill distance of X satisfies

$$h_{X,\Omega} \leq M_\alpha \epsilon^{\frac{1}{\alpha - d/2}}.$$

Commento: i punti ottimali di interpolazione sono insiemi tali che non può esistere una grande regione in Ω senza centri

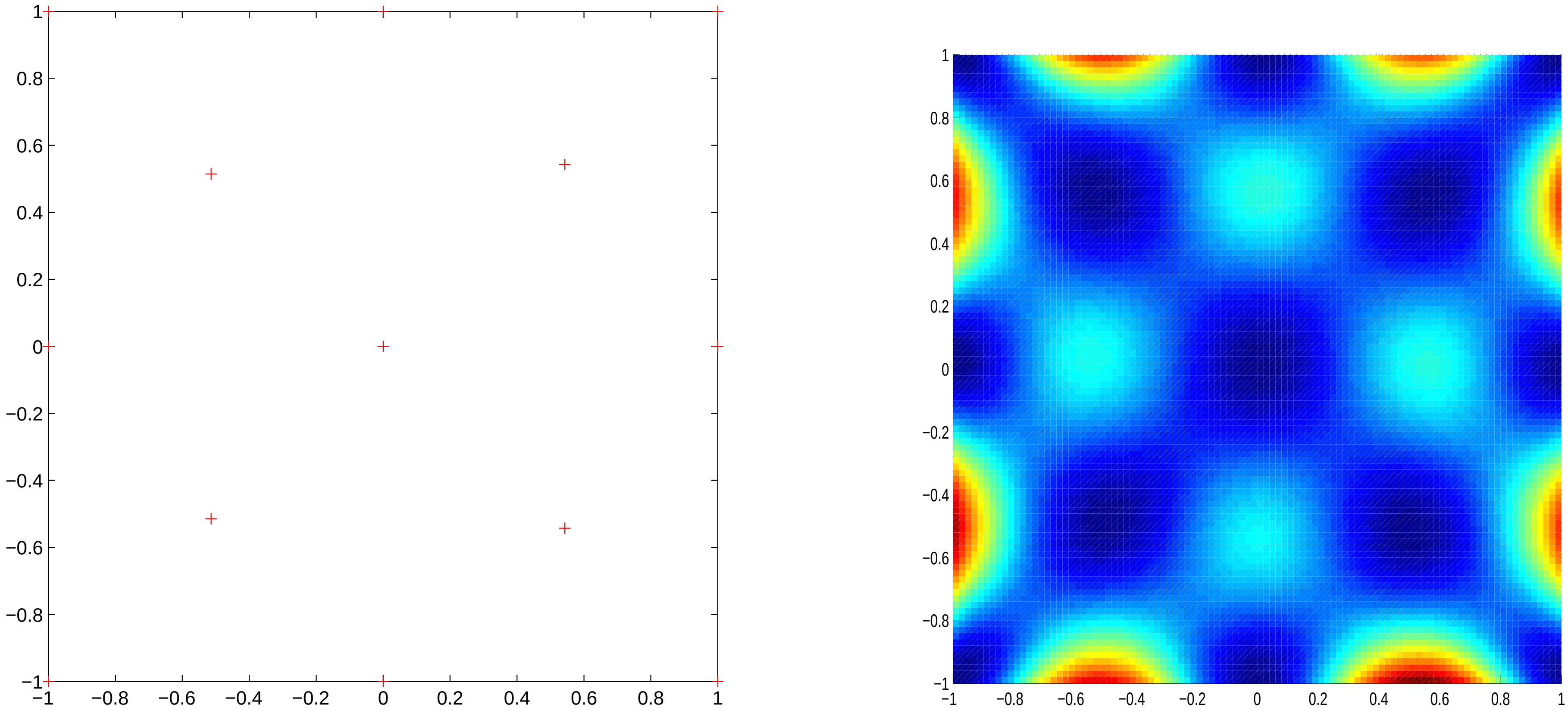
Esempio: punti ottimali per la gaussiana I





(Sx) N=48 punti ottimali quando $\eta = 2 \cdot 10^{-5}$; (Dx) l'errorr come funzione di N, decade come $N^{-7.2}$

Esempio: punti ottimali per la gaussiana II



(Sx) N=13 punti ottimali quando $\eta = 0.1$; (Dx) la funzione potenza dove sono assunti i punti di massimo.