Metodi numerici per approssimare funzioni (modelli e dati)

Due tipici problemi dell'ingegneria sono la definizione dei parametri di un modello matematico predefinito e il confronto di parametri già noti con dati sperimentali.
In ogni caso sono coinvolti una serie di punti da collegare tramite una funzione approssimata. Quest'ultima è ottenuta con approssimazione lineare a tratti, interpolazione polinomiale, interpolazione tramite spline o minimi quadrati.

L'interpolazione tramite spline consiste nell'uso di un polinomio di secondo o terzo grado per ogni tratto in cui viene suddiviso il campo dei dati. Si devono definire i coefficienti del polinomio. Considerandone ad esempio uno di terzo grado:

$$s(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

Si hanno $n+1$ punti, n intervalli e $4n$ incognite (4 coefficienti per ogni equazione). Tra un tratto e l'altro si impongono:
- continuità di s per $i=1, \dots, n-1$;
- continuità di s' per $i=1, \dots, n-1$;
- continuità di s'' per $i=1, \dots, n-1$;
- $s(x_i) = y_i$ per $i = 0, \dots, n$.

Imponendo la continuità dei polinomi e delle loro derivate prime e seconde si eliminano le discontinuità, i punti angolosi, le cuspidi e le singolarità.
Per le prime tre condizioni abbiamo $n-1+n-1+n-1 = 3n-3$ equazioni, per l'ultima $n+1$ equazioni. In tutto derivano $4n-2$ equazioni per $4n$ incognite. Le due mancanti si ottengono ponendo $s''(x_0) = 0$ e $s''(x_n) = 0$. In tal modo nei punti iniziale e finale la funzione possiede tangente orizzontale.

Un'altra possibilità di approssimazione è l'interpolazione polinomiale. Dati $n+1$ punti esiste un unico polinomio di grado n passante per essi: $P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \dots = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \dots = y_1 \\ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + \dots = y_n \end{cases}$$

si hanno $n+1$ equazioni per le $n+1$ incognite $a_0, \dots, a_n$.

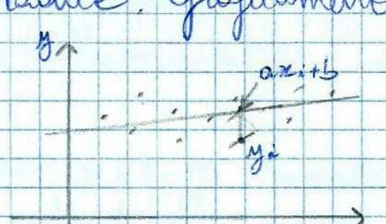
Il metodo più noto e più usato è probabilmente quello dei minimi quadrati. Dati n punti (x_i, y_i), $i = 0,1,\dots,n$ si cerca la retta che meglio approssima i punti stessi. Può anche non passare per alcuno di questi ultimi; il metodo consiste nel minimizzare gli scarti quadratici medi, ovvero la distanza di ogni punto dai valori della funzione approssimante. Si cercano quindi i coefficienti a e b della retta $y = ax + b$:

$$\begin{cases} a x_0 + b = y_0 \\ a x_1 + b = y_1 \\ \vdots \\ a x_i + b = y_i \\ \vdots \\ a x_n + b = y_n \end{cases} \iff \begin{pmatrix} x_0 & 1 \\ x_1 & 1 \\ \vdots & \\ x_i & 1 \\ \vdots & \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Il sistema è sovradeterminato: troppe equazioni per due sole incognite a e b. Si considera allora il sistema $Ax - B = 0$ cercando la x che minimizzi (renda più piccola possibile la differenza):

$$\min_x \|A\underline{x} - B\| \rightarrow \min_x \|A\underline{x} - B\|^2 = \min_x \sum_{i=0}^{n} (Ax - B)_i^2$$

Si usa la norma $v = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} v_i^2}$ e si applica il quadrato per evitare le complicazioni di calcolo dovute alla radice. Graficamente:



Inoltre usando il quadrato si ottengono sempre quantità positive:

$$\min \left[\sum_{i=0}^{n} (a x_i + b - y_i)^2 \right]$$

Per risolvere il sistema $A\underline{x} = B$ si moltiplica per la trasposta (da sinistra) di A:

$$A^T A \underline{x} = A^T \cdot B \qquad A \cdot A^T \text{ quadrata}$$

Ecco un esempio con i punti $(1,-1)$, $(3,4)$, $(2,3)$ e $(5,9)$:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 2 & 1 \\ 5 & 1 \end{pmatrix} \qquad A^T = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 & 5 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad A^T \cdot A = \begin{pmatrix} 39 & 11 \\ 11 & 4 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} -1 \\ 4 \\ 3 \\ 9 \end{pmatrix} \qquad A^T \cdot B = \begin{pmatrix} 62 \\ 15 \end{pmatrix}$$

Risolviamo:

$$\begin{pmatrix} 39 & 11 \\ 11 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 62 \\ 15 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 39a + 11b = 62 \\ 11a + 4b = 15 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 39a + 11b = 62 \quad (1) \\ b = \frac{15}{4} - \frac{11}{4}a \end{cases}$$

$$(1) \quad 39a + \frac{165}{4} - \frac{121}{4}a = 62$$

$$\Rightarrow \frac{35}{4}a = \frac{83}{4} \Rightarrow a = \frac{83}{35}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} a = 83/35 \\ b = \frac{15}{4} - \frac{11}{4} \cdot \frac{83}{35} = \frac{525 - 913}{140} = -\frac{388}{140} = -\frac{97}{35} \end{cases}$$

La retta è quindi:

$$y = \frac{83}{35}x - \frac{97}{35} \Rightarrow 35y = 83x - 97$$

Il metodo dei minimi quadrati può anche essere utilizzato per funzioni qualsivoglia, non solo per rette:

$$\begin{cases} a x_0^2 + bx_0 + c = y_0 \\ a x_1^2 + bx_1 + c = y_1 \\ \vdots \\ a x_n^2 + bx_n + c = y_n \end{cases} \quad \text{oppure} \quad \begin{cases} a \operatorname{sen} x_0 + b \log^2(x_0) = y_0 \\ a \operatorname{sen} x_1 + b \log^2(x_1) = y_1 \\ \vdots \\ a \operatorname{sen} x_n + b \log^2(x_n) = y_n \end{cases}$$

Non importa infatti che la x sia lineare, ma che lo siano i parametri a e b!

In realtà in alcuni casi, se un parametro è non lineare, può essere linearizzato. Ecco alcuni esempi:

- $y = a \cdot e^{bx}$:

x	y
$\vdots$	$\vdots$

$$\underbrace{\ln y}_{\tilde{y}} = \underbrace{\ln a}_{\tilde{a}} + \underbrace{b\,x}_{\tilde{b}\cdot\tilde{x}} \Rightarrow$$

$\tilde{x}$	$\tilde{y}$
x	$\ln y$

$$\Rightarrow \tilde{y} = \tilde{a} + \tilde{b}\tilde{x}$$

Si compone il logaritmo;

- $y = a \cdot x^b$:

x	y
$\vdots$	$\vdots$

$$\underbrace{\ln y}_{\tilde{y}} = \underbrace{\ln a}_{\tilde{a}} + \underbrace{b \ln x}_{\tilde{b}\cdot\tilde{x}} \Rightarrow$$

$\tilde{x}$	$\tilde{y}$
$\ln x$	$\ln y$

$$\begin{cases} a = e^{\tilde{a}} \\ b = \tilde{b} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \tilde{y} = \tilde{a} + \tilde{b}\tilde{x}$$

Il logaritmo può essere usato con qualsiasi base;

- $y = \frac{ax}{x+b}$:

x	y
$\vdots$	$\vdots$

$$\frac{1}{y} = \frac{x+b}{ax}$$

$$\underbrace{\frac{1}{y}}_{\tilde{y}} = \underbrace{\frac{1}{a}}_{\tilde{a}} + \underbrace{\frac{b}{a}}_{\tilde{b}} \cdot \underbrace{\frac{1}{x}}_{\tilde{x}} \Rightarrow \tilde{y} = \tilde{a} + \tilde{b}\tilde{x}$$

$\Rightarrow$

$\tilde{x}$	$\tilde{y}$
$1/x$	$1/y$

$$\begin{cases} a = 1/\tilde{a} \\ b = \tilde{b}/\tilde{a} \end{cases}$$

Si introduce infine il coefficiente di correlazione r:

media $\bar{y} = \frac{\sum_{j=0}^{m} y_j}{m+1}$ $S_r = \sum_{j=0}^{m} (y_j - f(x_j))^2$ $S_t = \sum_{j=0}^{m} (y_j - \bar{y})^2$

$$\Rightarrow r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \begin{cases} 0 & \text{approssimazione inutile} \\ 1 & \text{buona approssimazione} \end{cases}$$