

Calcolo Numerico A - a.a. 2008/09

Lunedì 7 maggio 2009

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Problema

Date $n + 1$ coppie di dati (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, n$, determinare un polinomio $\Pi_\ell \in \mathbb{P}_\ell$ tale che

$$\sum_{i=0}^n (\Pi_\ell^*(x_i) - y_i)^2 \leq \sum_{i=0}^n (q(x_i) - y_i)^2$$

per ogni $q \in \mathbb{P}_\ell$.

Definizione

Il polinomio Π_ℓ^* (quando esiste) è detto **polinomio di grado ℓ** di migliore approssimazione nel senso dei minimi quadrati.

Il polinomio di grado $\ell = 1$ viene detto **retta di regressione**.

Osservazione

- In generale non è detto che il grado sia esattamente ℓ : se prendo 10 punti allineati e cerco il polinomio di grado 5 di migliore approssimazione, trovo una retta, la **retta di regressione**
- Quando $\ell < n$ **non** sarà possibile, in generale, avere $\Pi_\ell(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$: è sufficiente prendere 3 punti non allineati (ovvero $n = 2$) e considerare la retta di regressione (ovvero $\ell = 1$)

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

- I coefficienti della retta di regressione $r(x) = a_0 + a_1x$ sono la soluzione del sistema lineare

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n 1 & \sum_{i=0}^n x_i \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \end{pmatrix}$$

- I coefficienti della parabola di miglior approssimazione $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ sono la soluzione del sistema lineare

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n 1 & \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 & \sum_{i=0}^n x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 y_i \end{pmatrix}$$

- I coefficienti del polinomio di grado ℓ di miglior approssimazione $p_\ell(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_\ell x^\ell$ sono la soluzione del sistema lineare

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n 1 & \sum_{i=0}^n x_i & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^\ell \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{\ell+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^n x_i^\ell & \sum_{i=0}^n x_i^{\ell+1} & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{2\ell} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^n x_i^\ell y_i \end{pmatrix}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Polinomio di grado ℓ di migliore approssimazione

Tutti questi sistemi si ottengono dalle **equazioni normali**, ovvero da

$$A^T A x = A^T b$$

dove la matrice $m \times (\ell + 1)$ (in generale non quadrata) A è data da

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^\ell \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^\ell \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^\ell \end{pmatrix}$$

mentre

$$x^T = (a_0, a_1, \dots, a_\ell), \quad b^T = (y_1, \dots, y_n)$$

Osservazione

Nel caso in cui $\ell = n$, la matrice A diventa la matrice di Vandermonde e le equazioni normali diventano le equazioni che determinano il polinomio interpolatore, che risulta essere il polinomio di miglior approssimazione quando $\ell = n$.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Pseudo inversa di Moore-Penrose

Osservazione

Pur non essendo A quadrata, la matrice $A^T A$ è quadrata con $(\ell + 1)$ righe e $(\ell + 1)$ colonne: infatti

- A è $m \times (\ell + 1)$
- A^T è $(\ell + 1) \times m$.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Pseudo inversa di Moore-Penrose

Supponiamo che A sia una matrice $m \times n$, con $m > n$, di rango n

Definizione

Il vettore $x_0 \in \mathbb{R}^n$ si dice *soluzione nel senso dei minimi quadrati* del sistema lineare $A \cdot x = b$, dove $b \in \mathbb{R}^m$ è un vettore fissato, se minimizza $\|A \cdot z - b\|_2$ ovvero se

$$\|A \cdot x_0 - b\|_2 \leq \|A \cdot z - b\|_2, \quad \forall z \in \mathbb{R}^n.$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Pseudo inversa di Moore-Penrose

Teorema

Il problema lineare di approssimazione

$$\min_{z \in \mathbb{R}^n} \|A \cdot z - b\|_2$$

- ❶ ammette almeno una soluzione x_0
- ❷ Se x_1 è un'altra soluzione, allora $Ax_0 = Ax_1$.
- ❸ Il residuo $r(x) = b - Ax_0$ è univocamente determinato e soddisfa l'equazione $A^T x = 0$
- ❹ Ogni soluzione x_0 del problema di approssimazione è anche soluzione delle **equazioni normali**

$$A^T Ax = A^T x$$

e viceversa.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Pseudo inversa di Moore-Penrose

Si consideri la matrice A introdotta in precedenza avente m righe e n colonne, $m > n$.

Supponiamo che $\text{rango}(A) = n$

Allora $A^T A$ è una matrice $n \times n$, simmetrica, non singolare e definita positiva

Allora esiste l'inversa $(A^T A)^{-1}$

Allora

$$A^T A x = A^T b \implies x = (A^T A)^{-1} A^T b$$

Definizione

Nel caso in cui $\text{rango}(A) = n$, A matrice $m \times n$ con $m > n$, la matrice $(A^T A)^{-1} A^T$ viene detta *Inversa di Moore-Penrose* della matrice A .

Osservazione

- L'inversa di Moore-Penrose della matrice A è un'inversa sinistra, infatti

$$(A^T A)^{-1} A^T A = I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n.$$

- Nel caso in cui A è una matrice $n \times n$ di rango n , l'inversa di Moore Penrose coincide con l'usuale inversa infatti $(A^T A)^{-1} A^T = A^{-1} (A^T)^{-1} A^T = A^{-1}$.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Dati i punti

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	1/2	1/2	2	7/2	7/2

- ❶ determinare la retta $r(x) = \alpha + \beta x$ che minimizza

$$\sum_{i=1}^5 (r(x_i) - y_i)^2$$

- ❷ scrivere le equazioni normali.

La retta esiste, come si è già visto in teoria. Per quanto riguarda le equazioni normali, è sufficiente porre

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \\ 1 & x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

$$b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 2 \\ 7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Così facendo, il funzionale da minimizzare risulta $\|Ax - b\|^2$ e di conseguenza le equazioni normali sono

$$A^T Ax = A^T b$$

ovvero

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 2 \\ 7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$$

cioè

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 9 \end{pmatrix},$$

dove la matrice a sinistra è simmetrica (in questo caso diagonale).

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Si vuole determinare il piano $f(x) = f(x', x'') = \alpha + \beta x' + \gamma x''$ che meglio approssima nel senso dei minimi quadrati i punti

$x_i = (x'_i, x''_i)$	(1, 1)	(0, 3)	(2, 1)	(0, 0)
$y_i = f(x_i)$	3	6	5	0

Il sistema $AX = b$ da risolvere è (nel senso dei minimi quadrati) il seguente

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ 5 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

La matrice $A \in \mathbb{R}^{4 \times 3}$ ha rango 3, cioè massimo. (A differenza del caso di una variabile, per avere questo non è sufficiente che i punti siano distinti nel piano: **occorre che ne esistano tre non allineati**).

Le equazioni normali $A^T AX = A^T b$ sono

$$\begin{pmatrix} 4 & 3 & 5 \\ 3 & 5 & 3 \\ 5 & 3 & 11 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 13 \\ 26 \end{pmatrix}.$$

Si noti ancora che la matrice a sinistra è simmetrica definita positiva.

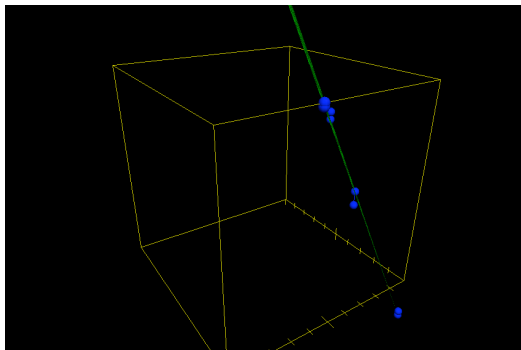
Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Le equazioni normali hanno come soluzione (unica, essendo $rk(A^T A) = rk(A) = 3$)

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \frac{1}{50} \begin{pmatrix} -6 \\ 73 \\ 101 \end{pmatrix},$$

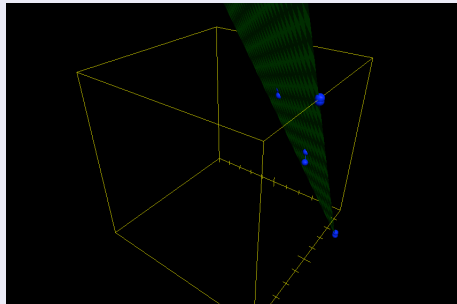
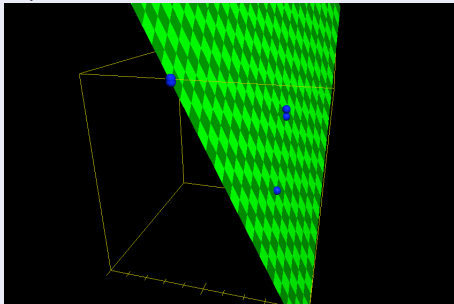
quindi la soluzione è data da

$$f(x', x'') = \frac{1}{50}(-6 + 73x' + 101x'').$$



Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Il piano da due visuali differenti.



Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Si determini la parabola $p(x) = a + bx + cx^2$ che approssima nel senso dei minimi quadrati i nodi

x_i	-1	0	1	2
y_i	2	0	-3	-5

Si tratta di risolvere nel senso dei minimi quadrati il sistema lineare:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

Le equazioni normali sono

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 6 \\ 2 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 18 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6 \\ -15 \\ -21 \end{pmatrix},$$

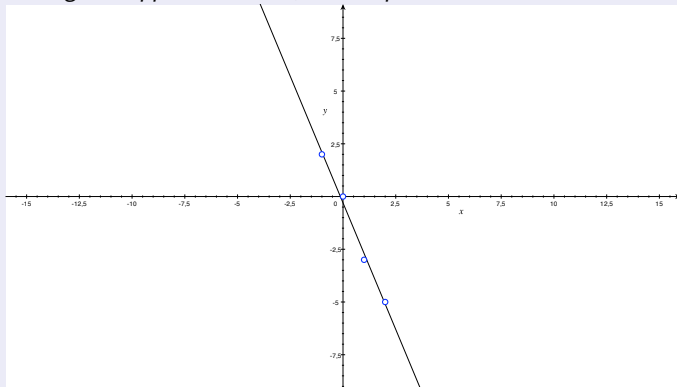
che hanno come soluzione $(a, b, c) = (-\frac{3}{10}, -\frac{12}{5}, 0)$, quindi il polinomio approssimante nel senso dei minimi quadrati di (al più) secondo grado è

$$p(x) = -\frac{3}{10} - \frac{12}{5}x,$$

ovvero è in realtà di primo grado.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

La parabola di migliore approssimazione, che in questo caso si riduce ad una retta.



Problema

La cubica (il polinomio di 3 grado) di migliore approssimazione è ancora la retta

$$p(x) = -\frac{3}{10} - \frac{12}{5}x?$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Osservazione

Osserviamo che, se modifichiamo il vettore $b^T = (2, 0, -3, 5)$ di poco, la retta di regressione diventa una parabola: ad esempio, preso $\bar{b}^T = (2, 10^{-3}, -3, 5)$, si trova che

$$p(x) = -0,3006 - 2,4002x + 3 * 10^{-4}x^2$$

Osservazione

Se in luogo di $b^T = (2, 0, -3, 5)$ si prende $\bar{b}^T = (3, 0, -3, 6)$, la retta di regressione resta una retta ma cambia l'equazione che risulta

$$p(x) = -3x$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Dati i punti

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	1/2	1/2	2	7/2	7/2

- 1 determinare la parabola $p(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$ che minimizza

$$\sum_{i=1}^5 (p(x_i) - y_i)^2$$

- 2 scrivere le equazioni normali.

La parabola esiste, come si è già visto. Per quanto riguarda le equazioni normali, è sufficiente porre

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \\ 1 & x_4 & x_4^2 \\ 1 & x_5 & x_5^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

$$b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 2 \\ 7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

Così facendo, il funzionale da minimizzare risulta $\|Ax - b\|^2$ e di conseguenza le equazioni normali sono

$$A^T A x = A^T b$$

ovvero

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 2 \\ 7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

La soluzione è $x_0 = (1.0286, 0.9000, 0.2857)^T$, ovvero

$$p(x) = 1.0286 + 0.9 * x + 0.2857 * x^2$$

Si può calcolare il residuo, ovvero

$$\|Ax_0 - b\| = 1.7196$$

e si ricordi che

$$\|Ax_0 - b\| = \sqrt{\min_{p(x) \in \mathbb{P}^2} \sum_{i=1}^5 (p(x_i) - y_i)^2}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Determinare

- la soluzione x_0 nel senso dei minimi quadrati
- la norma del resto $\|Ax_0 - b\|$

per il sistema sovradeterminato $Ax = b$ dove

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Suggerimento:

- La matrice A ha rango 2,
- Scrivete la matrice trasposta A^T (anch'essa di rango 2)
- si cerchi la soluzione delle equazioni normali

$$A^T Ax = A^T b$$

osservando che $A^T A$ è una matrice quadrata di rango 2, dunque il sistema è risolubile.

- Una volta calcolata la soluzione delle equazioni normali, si calcoli la norma del residuo

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

La soluzione è

$$x_0^T = (0.6429, -1.2143)^T.$$

Il residuo è

$$\|Ax_0 - b\| = 0.2673.$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Sia dato il sistema lineare $Ax = b$, dove

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 3 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Determinare

- la matrice inversa nel senso di Moore-Penrose
- la soluzione x_0 del sistema nel senso dei minimi quadrati
- la norma del resto $\|Ax_0 - b\|$.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

$$A^T A = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 11 \end{pmatrix}$$

$$(A^T b)^T = (-4, 0, 1)$$

$$x_0^T = [(A^T A)^{-1} A^T b]^T = (-0.8571, -0.4286, 0.2857)$$

$$\|Ax_0 - b\| = 1.1339$$

L'inversa di Moore Penrose C è data da

$$C = \begin{pmatrix} -0.3810 & -0.0476 & -0.2381 & -0.0476 \\ 0.1429 & 0.1429 & -0.2857 & -0.8571 \\ -0.0952 & 0.2381 & 0.1905 & 0.2381 \end{pmatrix}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Determinare

- *la soluzione x_0 nel senso dei minimi quadrati*
- *la norma del resto $\|Ax_0 - b\|$*

per il sistema sovradeterminato $Ax = b$ dove

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 6 \\ 2 & -1 & 0 \\ -2 & 0 & 3 \\ 4 & -2 & 0 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

R.

$$x_0^T = (0.8333, 1.6667, -0.1111)$$

$$\|Ax_0 - b\| = 1.1102 * 10^{-15}$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Determinare

- *la soluzione x_0 nel senso dei minimi quadrati*
- *la norma del resto $\|Ax_0 - b\|$*

per il sistema sovradeterminato $Ax = b$ dove

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -3 \\ 0 & 1 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

R.

$$x_0^T = (-1.3824, -0.3235)$$

$$\|Ax_0 - b\| = 0.8044$$

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Esercizio

Dati i punti

x_i	-1	1	2	3
y_i	0	2	4	0

- 1 *determinare il polinomio interpolatore*
- 2 *determinare la retta di regressione, scrivendo le equazioni normali*
- 3 *determinare la parabola $p(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$ che minimizza*

$$\sum_{i=1}^5 (p(x_i) - y_i)^2$$

scrivendo le equazioni normali.

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

1

2 $r(x) = 1.1429 + 0.2857 * x$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad A^T A = \begin{pmatrix} 4 & 5 \\ 5 & 15 \end{pmatrix}$$

3 $p(x) = 2.1818 + 1.6364 * x - 0.7273 * x^2$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \quad A^T A = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 15 \\ 5 & 15 & 35 \\ 15 & 35 & 99 \end{pmatrix}$$

Teorema (Teorema fondamentale del calcolo integrale)

Sia $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una funzione continua, e sia $x_0 \in [a, b]$. Allora

- la funzione $F(x) = \int_{x_0}^x f(t) dt$ è una primitiva di $f(x)$
- $\int_{\alpha}^{\beta} f(t) dt = F(\beta) - F(\alpha)$ per ogni $\alpha, \beta \in [a, b]$.

Problema

Sia $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una funzione integrabile su $[a, b]$. Il suo integrale definito

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx$$

- può essere "difficile" da calcolare attraverso il Teorema fondamentale del calcolo integrale, ovvero può essere complesso il calcolo della primitiva
- la primitiva di f può **non essere esprimibile in termini di funzioni elementari**: in tal caso per valutare l'integrale è necessaria una qualche approssimazione

Definizione

Una formula esplicita che permetta di approssimare $I(f)$ viene detta formula di quadratura (o formula d'integrazione numerica)

Soluzione

Un modo standard di procedere è il seguente

- prendere $n + 1$ nodi distinti $\{x_i\}_{i=0}^n \subset [a, b]$ insieme ai corrispondenti valori $f(x_i)$
- calcolare il polinomio interpolatore $\Pi_n f$ in corrispondenza ai nodi scelti
- calcolare

$$\begin{aligned} I(\Pi_n f) &= \int_a^b \Pi_n f(x) dx \\ &= \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_i) \left(\int_a^b L_i(x) dx \right) \end{aligned}$$

- stimare l'errore $I(f) - I(\Pi_n f)$