Capitolo 6

Interpolazione e approssimazione

In molti problemi si ha a che fare con una funzione f(x) di forma non elementare, o addirittura sconosciuta, di cui si possiede solo una tabulazione in un numero finito di punti (sovente si tratta di misurazioni sperimentali).

In questi casi la stima di un valore di f(x), in un punto diverso da quelli in cui è data, può essere fatta utilizzando i dati disponibili.

Questa operazione, detta interpolazione, di solito si effettua sostituendo a f(x) una funzione che sia facilmente calcolabile come, per esempio, un polinomio. C'è quindi connessione fra il problema dell'interpolazione e quello più generale della approssimazione di una funzione f(x), cioè della sostituzione di f(x) con una funzione più semplice e che si discosti da f(x) il meno possibile. Per misurare lo scostamento da f(x) esistono vari criteri che danno luogo ad altrettanti metodi di approssimazione. In questo capitolo si descrivono alcune tecniche di interpolazione e l'approssimazione di una funzione col metodo dei minimi quadrati nel caso discreto.

6.1 Differenze divise

Assegnata una funzione $f(x): \mathcal{I} \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ si ha la seguente definizione.

Definizione 6.1.1 Siano $x_0, x_1, \ldots, x_{k-1} \in \mathcal{I}$ con $x_i \neq x_j$ se $i \neq j$; la funzione

$$f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x] = \frac{f[x_0, x_1, \dots, x_{k-2}, x] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]}{x - x_{k-1}}, \quad (6.1)$$

ove, per k=1, $f[x_0,x]=\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$, è definita $\forall x\in\mathcal{I},\ x\neq x_i,\ i=0,1,\ldots,k-1,\ e\ si\ chiama$ differenza divisa di ordine k.

Se f(x) è derivabile su \mathcal{I} , la (6.1) si estende a tutto \mathcal{I} (cfr. Proprietà 6.8.2).

Vale il seguente teorema di espansione, dimostrabile per induzione.

Teorema 6.1.1 Sia $f(x): \mathcal{I} \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ e siano $x_0, x_1, \ldots, x_k \in \mathcal{I}$ con $x_i \neq x_j$ se $i \neq j$; vale l'identità

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2]$$

$$+ \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})f[x_0, x_1, \dots, x_k]$$

$$+ (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_k)f[x_0, x_1, \dots, x_k, x].$$
(6.2)

6.2 Interpolazione parabolica

Siano dati k+1 punti reali $x_0, x_1, \ldots, x_k \in \mathcal{I}$, due a due distinti, in corrispondenza dei quali siano noti i k+1 valori reali $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_k)$. L'interpolazione parabolica consiste nel determinare un polinomio di grado al più k

$$P_k(x) = a_k x^k + a_{k-1} x^{k-1} + \dots + a_1 x + a_0$$
(6.3)

tale che

$$P_k(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, k;$$
 (6.4)

il polinomio $P_k(x)$ si chiama polinomio di interpolazione.

Nell'insieme dei polinomi del tipo (6.3) ne esiste uno ed uno solo che verifica le (6.4). Infatti, imponendo che il polinomio (6.3) verifichi le (6.4) si ottiene il sistema lineare di k+1 equazioni nelle k+1 incognite a_i , $i=0,1,\ldots,k$,

$$a_{0} + a_{1}x_{0} + \cdots + a_{k-1}x_{0}^{k-1} + a_{k}x_{0}^{k} = f(x_{0})$$

$$\cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \quad \cdots$$

$$a_{0} + a_{1}x_{k} + \cdots + a_{k-1}x_{k}^{k-1} + a_{k}x_{k}^{k} = f(x_{k}).$$

$$(6.5)$$

Il sistema (6.5) ha la seguente matrice dei coefficienti

$$\begin{pmatrix}
1 & x_0 & \cdots & x_0^{k-1} & x_0^k \\
1 & x_1 & \cdots & x_1^{k-1} & x_1^k \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
1 & x_k & \cdots & x_k^{k-1} & x_k^k
\end{pmatrix}$$

il cui determinante è $\prod_{0 \le j < i \le k} (x_i - x_j)$ e risulta diverso da zero, essendo i punti x_i due a due distinti. Tale matrice è detta matrice di Vandermonde. Il sistema (6.5) ha quindi un'unica soluzione e perciò è unico il polinomio cercato.

Osservazione 6.2.1 Il polinomio di interpolazione è di grado minore di k se, nella soluzione del sistema (6.5), risulta $a_k = 0$.

Per la costruzione di $P_k(x)$ esistono procedimenti più pratici che non la risoluzione del sistema (6.5). Si possono, per esempio, utilizzare le differenze divise, in base al seguente teorema che si può dimostrare per induzione.

Teorema 6.2.1 Il polinomio

$$P_k(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2]$$

$$+ \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})f[x_0, x_1, \dots, x_k]$$

$$(6.6)$$

verifica le condizioni (6.4).

Il polinomio (6.6) è detto polinomio di interpolazione di Newton.

Una seconda forma del polinomio di interpolazione si può ottenere per mezzo delle funzioni polinomiali di grado \boldsymbol{k}

$$l_r(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{r-1})(x - x_{r+1}) \cdots (x - x_k)}{(x_r - x_0) \cdots (x_r - x_{r-1})(x_r - x_{r+1}) \cdots (x_r - x_k)}, \qquad (6.7)$$

 $r = 0, 1, \dots, k$. I polinomi (6.7) godono della proprietà

$$l_r(x_s) = \delta_{r,s}, \quad r, s = 0, 1, \dots, k;$$

di conseguenza il polinomio

$$L_k(x) = \sum_{r=0}^k l_r(x) f(x_r)$$

verifica le condizioni (6.4). $L_k(x)$ si chiama polinomio di interpolazione di Lagrange e i polinomi (6.7) sono detti polinomi fondamentali della interpolazione di Lagrange.

L'errore che si commette se si sostituisce alla funzione f(x) il polinomio di interpolazione $P_k(x)$ o $L_k(x)$ si ricava dalla (6.2) che può scriversi

$$f(x) = P_k(x) + (x - x_0) \cdots (x - x_k) f[x_0, x_1, \dots, x_k, x];$$

si ha quindi

$$E_k(x) = f(x) - P_k(x) = \pi(x) f[x_0, x_1, \dots, x_k, x], \qquad (6.8)$$

dove si è posto $\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_k)$.

Teorema 6.2.2 $Se f(x) \in C^{k+1}(\mathcal{I})$ si ha

$$f(x) - P_k(x) = \pi(x) \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}$$

dove

$$\min\{x_0, x_1, \dots, x_k, x\} < \xi < \max\{x_0, x_1, \dots, x_k, x\}.$$

6.3 Interpolazione osculatoria di Hermite

Siano assegnati k+1 punti reali $x_0, x_1, \ldots, x_k \in \mathcal{I}$, due a due distinti, in corrispondenza dei quali siano noti 2k+2 valori reali $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_k),$ $f'(x_0), f'(x_1), \ldots, f'(x_k)$; l'interpolazione osculatoria di Hermite consiste nel determinare un polinomio H(x) di grado al più 2k+1 tale che

$$H(x_r) = f(x_r), \quad H'(x_r) = f'(x_r), \quad r = 0, 1, \dots, k.$$
 (6.9)

Introdotti i polinomi di grado 2k + 1

$$h_{0r}(x) = [1 - 2l'_r(x_r)(x - x_r)]l_r^2(x), \quad r = 0, 1, \dots, k,$$

$$h_{1r}(x) = (x - x_r)l_r^2(x), \quad r = 0, 1, \dots, k,$$
(6.10)

è di semplice verifica il seguente teorema.

Teorema 6.3.1 Il polinomio, di grado al più 2k + 1,

$$H(x) = \sum_{r=0}^{k} h_{0r}(x)f(x_r) + \sum_{r=0}^{k} h_{1r}(x)f'(x_r)$$
(6.11)

soddisfa le condizioni (6.9).

Il polinomio (6.11) è detto polinomio di interpolazione di Hermite.

I polinomi $h_{0r}(x)$ e $h_{1r}(x)$ definiti dalle (6.10) sono detti, rispettivamente, funzioni fondamentali di prima e di seconda specie dell'interpolazione di Hermite.

Teorema 6.3.2 Il polinomio H(x) è unico.

DIMOSTRAZIONE. Si supponga, per assurdo, che esista un secondo polinomio S(x) di grado al più 2k + 1 che soddisfi le (6.9).

Il polinomio R(x) = H(x) - S(x) e la sua derivata prima si annullano nei k+1 punti x_0, x_1, \ldots, x_k , per cui R(x) risulta divisibile almeno per il polinomio $Q(x) = (x-x_0)^2 \cdots (x-x_k)^2$; ciò è assurdo essendo Q(x) di grado 2k+2 ed R(x) di grado non superiore a 2k+1.

Una espressione dell'errore che si commette nel sostituire alla funzione f(x) il polinomio H(x) è data dal teorema seguente.

Teorema 6.3.3 $Se\ f(x) \in C^{2k+2}(\mathcal{I})$ si ha

$$f(x) - H(x) = (x - x_0)^2 \cdots (x - x_k)^2 \frac{f^{(2k+2)}(\xi)}{(2k+2)!}$$

dove

$$\min\{x_0, x_1, \dots, x_k, x\} < \xi < \max\{x_0, x_1, \dots, x_k, x\}.$$

6.4 Interpolazione con funzioni spline

I due tipi di interpolazione esposti nei precedenti paragrafi presentano lo svantaggio che, al crescere di k, aumenta, in generale, il grado del polinomio di interpolazione il quale finisce per assumere una forma poco maneggevole e può discostarsi anche sensibilmente dalla funzione f(x) (cfr. Esempio 6.8.2).

Per ovviare a questo inconveniente si può ricorrere alla interpolazione mediante funzioni spline costituita da una interpolazione polinomiale a tratti

con polinomi di ugual grado su ciascun tratto, soddisfacenti certe condizioni di regolarità.

Siano dati k+1 punti reali $x_0 < x_1 < \cdots < x_k$ in corrispondenza dei quali siano noti k+1 valori reali $y_i = f(x_i), i = 0, 1, \dots, k$. Si ha la seguente definizione.

Definizione 6.4.1 Dicesi funzione spline di grado m, relativa ai punti $x_0, x_1, ..., x_k$, una funzione $S_m(x) : [x_0, x_k] \to \mathbb{R}$ tale che:

- 1. $S_m(x)$ è un polinomio di grado non superiore a m in ogni intervallo $[x_{i-1}, x_i], i = 1, 2, ..., k;$
- 2. $S_m(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, k;$
- 3. $S_m(x) \in C^{m-1}([x_0, x_k])$.

Nel seguito ci si limita ad analizzare il caso m=3 che dà luogo alle cosiddette spline cubiche.

Una funzione spline cubica $S_3(x)$ è composta da k polinomi $p_i(x)$, i = 1, 2, ..., k, di grado al più 3; ciascun polinomio $p_i(x)$: $[x_{i-1}, x_i] \to \mathbb{R}$ è definito da quattro coefficienti. $S_3(x)$ risulterà quindi determinata dai 4k coefficienti dei polinomi che la compongono. Imponendo che siano verificate le proprietà 2 e 3, si ottengono le 4k-2 condizioni

$$p_{i}(x_{i-1}) = y_{i-1}, i = 1, 2, \dots, k,$$

$$p_{i}(x_{i}) = y_{i}, i = 1, 2, \dots, k,$$

$$p'_{i}(x_{i}) = p'_{i+1}(x_{i}), i = 1, 2, \dots, k-1,$$

$$p''_{i}(x_{i}) = p''_{i+1}(x_{i}), i = 1, 2, \dots, k-1.$$

$$(6.12)$$

Le due ulteriori condizioni si scelgono di solito fra le seguenti:

$$p_1''(x_0) = p_k''(x_k) = 0$$
, Spline naturale; $p_1'(x_0) = p_k'(x_k)$, $p_1''(x_0) = p_k''(x_k)$, Spline periodica; $p_1'(x_0) = y_0'$, $p_k'(x_k) = y_k'$, Spline vincolata,

se i valori $y_0' = f'(x_0)$ e $y_k' = f'(x_k)$ sono noti.

Teorema 6.4.1 Se i punti x_0, \ldots, x_k sono tali che $x_i - x_{i-1} = h$, $i = 1, 2, \ldots, k$, esiste una unica funzione spline cubica naturale $S_3(x)$.

DIMOSTRAZIONE. Introdotti k+1 valori arbitrari m_i , si costruiscono i polinomi $p_i(x)$ nella forma di Hermite (6.11) a due punti con $f(x_r) = y_r$, $f'(x_r) = m_r$, r = i - 1, i,

$$p_{i}(x) = \left[1 + \frac{2}{h}(x - x_{i-1})\right] \left(\frac{x - x_{i}}{h}\right)^{2} y_{i-1}$$

$$+ \left[1 - \frac{2}{h}(x - x_{i})\right] \left(\frac{x - x_{i-1}}{h}\right)^{2} y_{i}$$

$$+ (x - x_{i-1}) \left(\frac{x - x_{i}}{h}\right)^{2} m_{i-1} + (x - x_{i}) \left(\frac{x - x_{i-1}}{h}\right)^{2} m_{i},$$

$$i = 1, 2, \dots k.$$

I polinomi $p_i(x)$ verificano, per costruzione, i primi tre gruppi di condizioni (6.12) qualunque siano i valori m_0, m_1, \ldots, m_k . Per determinare tali k+1 valori si utilizzano le ultime delle (6.12) e le due condizioni di spline naturale.

Essendo

$$p_i''(x_{i-1}) = \frac{2}{h^2} \left[3(y_i - y_{i-1}) - h(m_i + 2m_{i-1}) \right],$$

$$p_i''(x_i) = \frac{2}{h^2} \left[3(y_{i-1} - y_i) + h(2m_i + m_{i-1}) \right],$$

si perviene al sistema lineare

$$2m_{0} + m_{1} = \frac{3}{h}(y_{1} - y_{0})$$

$$m_{0} + 4m_{1} + m_{2} = \frac{3}{h}(y_{2} - y_{0})$$

$$m_{1} + 4m_{2} + m_{3} = \frac{3}{h}(y_{3} - y_{1})$$

$$\vdots$$

$$m_{k-2} + 4m_{k-1} + m_{k} = \frac{3}{h}(y_{k} - y_{k-2})$$

$$m_{k-1} + 2m_{k} = \frac{3}{h}(y_{k} - y_{k-1}).$$

$$(6.13)$$

La matrice dei coefficienti di questo sistema è a predominanza diagonale forte per cui è non degenere. Ne discende che la soluzione esiste ed è unica, quindi esistono, univocamente determinati, i polinomi $p_1(x), p_2(x), ..., p_k(x)$.

Con considerazioni analoghe alle precedenti, l'esistenza e l'unicità si può dimostrare anche nel caso di partizione non uniforme, cioè con punti x_i non in progressione aritmetica, e per spline cubiche periodiche o vincolate (cfr. Esempio 6.8.9).

Nel caso delle spline cubiche vincolate e per partizioni uniformi si può dimostrare il seguente teorema di convergenza.

Teorema 6.4.2 Se $f(x) \in C^4([x_0, x_k])$, allora esistono delle $K_p > 0$, p = 0, 1, 2, 3, tali che

$$\max_{x_0 \le x \le x_k} \left| f^{(p)}(x) - S_3^{(p)}(x) \right| \le K_p M_4 h^{4-p}, \quad 0 \le p \le 2,$$

$$\max_{x_{i-1} \le x \le x_i} |f^{(3)}(x) - p_i^{(3)}(x)| \le K_3 M_4 h, \quad i = 1, 2 \dots k,$$

dove $M_4 = \max_{x_0 \le x \le x_k} |f^{(4)}(x)|.$

Nelle precedenti maggiorazioni si può assumere $K_0 = \frac{7}{8}$, $K_1 = K_2 = \frac{7}{4}$, $K_3 = 2$.

6.5 Interpolazione con funzioni razionali

Un altro tipo di interpolazione si ottiene mediante l'uso di funzioni razionali.

Siano dati n+m+1 punti $x_0, x_1, \ldots, x_{n+m}$, due a due distinti, in corrispondenza dei quali siano noti i valori reali $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_{n+m})$.

Si consideri la funzione razionale a valori reali

$$R_m^n(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \frac{a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0}{b_m x^m + b_{m-1} x^{m-1} + \dots + b_1 x + b_0}.$$

L'interpolazione con funzioni razionali consiste nella determinazione degli n+m+2 coefficienti a_i , $i=0,1,\ldots,n$, e b_i , $i=0,1,\ldots,m$, in modo che sia

$$R_m^n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n + m.$$
 (6.14)

Per questo è necessario che sia

$$P_n(x_i) - f(x_i)Q_m(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n + m.$$
 (6.15)

La determinazione di una funzione razionale che verifichi le (6.14) è quindi ricondotta alla risoluzione del sistema lineare omogeneo (6.15) di n+m+1 equazioni nelle n+m+2 incognite a_i , b_i . Il sistema (6.15) è risolubile e se la matrice dei coefficienti ha rango massimo, ha soluzioni non nulle che differiscono tra loro per una costante moltiplicativa.

Tali soluzioni non possono fornire coefficienti b_i tutti uguali a zero, cioè non possono essere tali da rendere $Q_m(x)$ identicamente nullo; infatti, se così fosse, $P_n(x)$ avrebbe n+m+1 zeri quando il suo grado è al più n.

Se in corrispondenza alle soluzioni non nulle del sistema (6.15) si verifica

$$Q_m(x_r) = 0, (6.16)$$

per qualche indice r compreso tra 0 e n+m, il problema dell'interpolazione mediante funzioni razionali per quei punti non ha soluzione ed i punti per i quali si verifica la (6.16) si dicono punti inaccessibili.

6.6 Approssimazione polinomiale

Non sempre i polinomi di interpolazione sono adatti per approssimare una funzione continua con una data accuratezza su tutto un intervallo. Infatti, per un noto teorema di Bernstein, dato un intervallo [a,b] e fissati in esso k+1 punti, con $k=1,2,\ldots$, esiste certamente qualche funzione f(x) continua su [a,b], con la proprietà che la successione dei polinomi interpolanti $P_1(x), P_2(x), \ldots$, di grado pari all'indice, non converge uniformemente ad f(x). Tuttavia, se, per una funzione continua f(x), si cerca nella classe di tutti i polinomi, anziché fra quelli della particolare successione sopra definita, allora esiste qualche polinomio che approssima f(x) quanto si vuole, uniformemente su [a,b]. Vale infatti il seguente fondamentale teorema.

Teorema 6.6.1 (di Weierstrass) $Sia\ f(x) \in C^0([a,b])$; allora per ogni $\epsilon > 0$ esiste un intero n, dipendente da ϵ , ed un polinomio p(x) di grado al più n, tale che sia

$$|f(x) - p(x)| < \epsilon, \quad \forall x \in [a, b].$$
 (6.17)

Per esempio, Bernstein ha dimostrato che si possono costruire effettivamente polinomi p(x) aventi la proprietà (6.17), in base al seguente teorema.

Teorema 6.6.2 Data $f(x) \in C^0([0,1])$, si definisca il polinomio di grado n

$$B_n(f;x) = \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} x^i (1-x)^{n-i} f\left(\frac{i}{n}\right) , \qquad (6.18)$$

allora la successione di polinomi $\{B_n\}$ converge uniformemente a f(x) su [0,1].

Si noti che, effettuando nella (6.18) la sostituzione $x = \frac{t-a}{b-a}$, il polinomio trasformato $B_n(f;t)$ risulta definito su [a,b] e quindi può sostituirsi al polinomio p(x) della (6.17).

L'approssimazione, polinomiale o no, di una funzione f(x) può anche ottenersi richiedendo che siano verificate proprietà diverse dalla (6.17); per esempio, spesso nelle applicazioni si impone la proprietà che la funzione approssimante minimizzi una opportuna norma euclidea. Con questo criterio, detto dei minimi quadrati, si possono, per esempio, costruire approssimazioni che utilizzano un insieme discreto di punti dati $[x_i, f(x_i)]$, senza necessariamente imporre al grafico della funzione approssimante di passare per quei punti, come nel caso dell'interpolazione.

6.7 Metodo dei minimi quadrati nel discreto

Siano date m+1 funzioni $\phi_i(x)$, $i=0,1,\ldots,m, m\leq k$, continue almeno su un insieme \mathcal{I} contenente k+1 punti x_j , $j=0,1,\ldots,k$, e si abbiano i valori $f(x_j)$ per ogni x_j . Si consideri la funzione combinazione lineare delle $\phi_i(x)$

$$\Phi(x) = c_0 \phi_0(x) + c_1 \phi_1(x) + \dots + c_m \phi_m(x)$$

dove $c_i \in \mathbb{R}$, i = 0, 1, ..., m. Si vuole approssimare f(x) con $\Phi(x)$.

È evidente che la funzione $\Phi(x)$ dipende dalla scelta dei coefficienti c_i . Il metodo dei minimi quadrati consiste nello scegliere i coefficienti c_i per i quali la funzione

$$\Psi(c_0, c_1, \dots, c_m) = \sum_{j=0}^k \left[\sum_{i=0}^m c_i \phi_i(x_j) - f(x_j) \right]^2$$
 (6.19)

assume valore minimo. La funzione (6.19) rappresenta la somma degli scarti quadratici tra la funzione $\Phi(x)$ e la funzione f(x) nei punti x_j e coincide con il quadrato della norma euclidea del vettore di componenti $\Phi(x_j) - f(x_j)$. Da qui la denominazione del metodo.

La (6.19) è una funzione continua di m+1 variabili, per cui il punto di minimo assoluto (se esiste) è da ricercarsi tra i punti di \mathbb{R}^{m+1} per i quali sono nulle tutte le derivate parziali della Ψ rispetto a c_0, c_1, \ldots, c_m .

Si hanno quindi le relazioni

$$\frac{\partial \Psi}{\partial c_s} = 2 \sum_{i=0}^k \left[\sum_{i=0}^m c_i \phi_i(x_j) - f(x_j) \right] \phi_s(x_j) = 0, \quad s = 0, 1, \dots, m,$$
 (6.20)

che costituiscono un sistema lineare di m+1 equazioni nelle m+1 incognite c_0, c_1, \ldots, c_m .

Ponendo $c = (c_0, c_1, \dots, c_m)^T$, $b = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_k))^T$,

$$A = \begin{pmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_0) & \cdots & \phi_m(x_0) \\ \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(x_k) & \phi_1(x_k) & \cdots & \phi_m(x_k) \end{pmatrix},$$

la (6.19) può scriversi

$$\Psi(c) = (Ac - b)^{T} (Ac - b) = ||Ac - b||_{2}^{2},$$
(6.21)

mentre il sistema (6.20), detto sistema delle *equazioni normali*, può essere scritto nella forma

$$A^T A c - A^T b = 0. (6.22)$$

Questo sistema ha soluzione, in quanto si può dimostrare che $r(A^TA) = r(A^TA \mid A^Tb)$.

Nel caso in cui la matrice $A \in \mathbb{R}^{(k+1)\times(m+1)}$ abbia rango uguale a m+1, per il Teorema 2.3.1, la matrice $A^TA \in \mathbb{R}^{(m+1)\times(m+1)}$ ha determinante diverso da zero; quindi il sistema (6.22) ha un'unica soluzione e la funzione $\Psi(c)$ ha un unico punto stazionario. Tale punto stazionario risulta il punto di minimo assoluto. Infatti, la matrice hessiana della (6.21) è la matrice A^TA che, nel caso in esame, risulta definita positiva.

La scelta delle funzioni $\phi_i(x)$ può, in pratica, dipendere dalla distribuzione sul piano cartesiano dei punti di coordinate $[x_j, f(x_j)], j = 0, 1, \ldots, k$. Le scelte più comuni sono:

$$\phi_0(x) = 1, \ \phi_1(x) = x, \ \phi_2(x) = x^2, \dots;$$

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2}, \quad \phi_1(x) = \cos x, \quad \phi_2(x) = \sin x,$$

$$\phi_3(x) = \cos(2x), \quad \phi_4(x) = \sin(2x), \dots;$$

$$\phi_0(x) = e^{\alpha_0 x}, \quad \phi_1(x) = e^{\alpha_1 x}, \quad \phi_2(x) = e^{\alpha_2 x}, \dots,$$

$$(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots \in \mathbb{R}, \alpha_r \neq \alpha_s, \cos r \neq s).$$

Si ha così la migliore approssimazione $\Phi(x)$ nel senso dei minimi quadrati rispettivamente di tipo polinomiale, trigonometrica ed esponenziale.

6.8 Complementi ed esempi

6.8.1 Proprietà ed applicazioni delle differenze divise

Proprietà 6.8.1 (di simmetria) Se i_0, i_1, \ldots, i_k , è una qualunque permutazione dei numeri $0, 1, \ldots, k$, si ha

$$f[x_{i_0}, x_{i_1}, \dots, x_{i_k}] = f[x_0, x_1, \dots, x_k].$$

DIMOSTRAZIONE. La differenza divisa $f[x_0, x_1, \ldots, x_k]$ è il coefficiente della potenza x^k del polinomio di interpolazione espresso dalla (6.6). Costruendo il polinomio di interpolazione relativo ai punti $x_{i_0}, x_{i_1}, \ldots, x_{i_k}$, ne viene che il coefficiente del termine in x^k è dato da $f[x_{i_0}, x_{i_1}, \ldots, x_{i_k}]$. Per l'unicità del polinomio di interpolazione si ha la tesi.

Proprietà 6.8.2 Se $f(x) \in C^1(\mathcal{I})$, la funzione $f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x]$ è prolungabile per continuità su tutto \mathcal{I} .

DIMOSTRAZIONE. Si procede per induzione.

Dalla Definizione 6.1.1 e dalla derivabilità di f(x) segue

$$\lim_{x \to x_i} f[x_i, x] = \lim_{x \to x_i} \frac{f(x) - f(x_i)}{x - x_i} = f'(x_i)$$

per cui le differenze divise del primo ordine risultano prolungabili per continuità ponendo $f[x_i, x_i] = f'(x_i), i = 0, 1, ..., k$.

Supposto che le differenze divise di ordine s siano continue su \mathcal{I} , per le differenze divise di ordine s+1, dalla definizione e dalla Proprietà 6.8.1, si ha

$$f[x_0, x_1, \dots, x_s, x] = f[x, x_0, x_1, \dots, x_s]$$

$$= \frac{f[x, x_0, x_1, \dots, x_{s-2}, x_s] - f[x, x_0, x_1, \dots, x_{s-1}]}{x_s - x_{s-1}};$$

dalla continuità del numeratore di quest'ultima frazione segue la continuità su \mathcal{I} delle differenze divise di ordine s+1 se si pone

$$f[x_0, x_1, \dots, x_s, x_i] = \frac{f[x_i, x_0, x_1, \dots, x_{s-2}, x_s] - f[x_i, x_0, x_1, \dots, x_{s-1}]}{x_s - x_{s-1}},$$

$$i = 0, 1, \dots, s.$$

La tesi risulta così provata.

Osservazione 6.8.1 Come conseguenza della Proprietà 6.8.2 si ha che, nell'ipotesi $f(x) \in C^1(\mathcal{I})$, la (6.1) e la (6.2) restano valide anche quando x_0, x_1, \ldots, x_k non sono tutti distinti.

Proprietà 6.8.3 Se $f(x) \in C^k(\mathcal{I})$ esiste almeno un valore ξ , con la proprietà $\min_i x_i < \xi < \max_i x_i$, tale che

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}.$$

DIMOSTRAZIONE. La funzione $Q(x) = f(x) - P_k(x)$ ammette come zeri i valori x_0, x_1, \ldots, x_k , in quanto sono verificate le condizioni (6.4). Dal teorema di Rolle discende che la funzione Q'(x) ha almeno k zeri distinti appartenenti all'intervallo $\min_i x_i, \max_i x_i$. Analogamente, la funzione Q''(x) ammette almeno k-1 zeri distinti e così di seguito. Quindi la funzione $Q^{(k)}(x)$ ammette almeno uno zero ξ tale che $\min_i x_i < \xi < \max_i x_i$.

Calcolando la funzione $Q^{(k)}(x)$ nel punto ξ si ha

$$Q^{(k)}(\xi) = f^{(k)}(\xi) - P_k^{(k)}(\xi) = f^{(k)}(\xi) - k! f[x_0, x_1, \dots, x_k] = 0$$

da cui la tesi. \Box

Come applicazione di questa proprietà si ottiene l'espressione data nel Teorema 6.2.2 per l'errore $E_k(x) = f(x) - P_k(x)$.

Per calcolare le differenze divise che intervengono nel polinomio di interpolazione di Newton (6.6) si può ricorrere alla costruzione di un quadro delle differenze divise come in Fig. 6.1 dove nella colonna $\mathrm{DD}r$ sono riportate opportune differenze divise di ordine r.

	- , ,	DD1	DD2	DD3
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0, x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
x_2	$f(x_2)$	$f[x_0, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2]$	
x_3	$f(x_3)$	$f[x_0, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$

Figura 6.1: Quadro delle differenze divise.

Il quadro può essere esteso quanto si vuole, osservando che ogni differenza divisa si ottiene sottraendo al termine che si trova nella stessa riga e nella colonna immediatamente a sinistra il primo termine di questa colonna e dividendo per la differenza dei corrispondenti x_i .

Le differenze divise che figurano nel polinomio (6.6) sono date dal primo termine di ciascuna colonna.

Osservazione 6.8.2 Nel caso in cui gli elementi della colonna delle differenze di ordine r risultino tutti uguali fra loro, gli elementi delle colonne successive sono nulli, perciò il grado del polinomio di interpolazione è r.

Osservazione 6.8.3 Il valore della differenza divisa di ordine k si può anche ottenere direttamente dalla formula

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_k)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_k)} + \cdots + \frac{f(x_k)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \cdots (x_k - x_{k-1})}$$

che si dimostra per induzione.

Esempio 6.8.1 È data la seguente tabella di valori

Si vuole il polinomio di interpolazione di Newton $P_4(x)$. Dai dati si ottiene il seguente quadro delle differenze divise

\boldsymbol{x}	y	DD1	DD2	DD3
0	5			
-1	3	2		
2	3	-1	-1	
-2	-9	7	-5	1
3	11	2	0	1

Le differenze divise del terzo ordine risultano uguali tra loro per cui il polinomio di interpolazione è di grado 3. Usando la (6.6), si ha

$$P_4(x) = 5 + 2x - x(x+1) + x(x+1)(x-2)$$
$$= x^3 - 2x^2 - x + 5$$

A conferma di quanto accennato in 6.4 si riporta un esempio nel quale al crescere del grado del polinomio di interpolazione peggiora l'approssimazione della funzione f(x).

Esempio 6.8.2 Si consideri la funzione di Runge, rappresentata in [0, 1],

$$f(x) = \frac{1}{100x^2 - 100x + 26} \,,$$

per la quale risulta $f(x) \in C^{\infty}([0,1])$, e si scelgano i punti equidistanti $x_i = i/k$, i = 0, 1, ..., k.

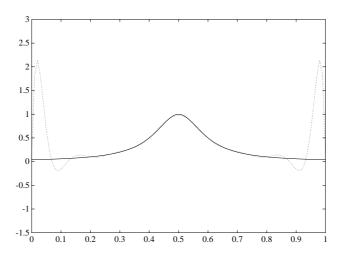


Figura 6.2: Polinomio di interpolazione $P_{15}(x)$ (linea tratteggiata) a confronto con la funzione di Runge (linea continua).

Si vede dalla Fig. 6.2 che l'errore $E_k(x)$ corrispondente al polinomio di interpolazione $P_k(x)$, in prossimità degli estremi dell'intervallo, assume valori elevati.

Si può anche dimostrare che

$$\lim_{k \to \infty} \max_{0 \le x \le 1} \mid E_k(x) \mid = +\infty.$$

In generale, il comportamento dell'errore dipende dalla particolare scelta dei punti $x_i, i = 0, 1, \ldots, k$. Per esempio, se si scelgono come nodi gli zeri dei polinomi di Chebyshev di prima specie (cfr. 7.4) si dimostra che, per ogni $f(x) \in C^2([-1,1]), P_k(x)$ converge uniformemente ad f(x) su [-1,1] per $k \to \infty$ e si ha $||f(x) - P_k(x)||_{\infty} = O\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$

Una interessante applicazione delle differenze divise si ha nell'esempio che segue, in cui si espone il metodo di *Pasquini-Trigiante* che permette di approssimare simultaneamente tutte le radici di un'equazione algebrica.

Esempio 6.8.3 Si supponga che l'equazione

$$f(x) = x^m + a_{m-1}x^{m-1} + \dots + a_0 = 0 \quad (a_i \in \mathbb{R})$$
 (6.23)

abbia m radici reali. Dalla (6.2) relativa ai punti x_1, \ldots, x_m , non necessariamente tutti distinti (cfr. Osservazione 6.8.1) si ha

$$f(x) = f[x_1] + (x - x_1)f[x_1, x_2] + \cdots + (x - x_1) \cdots (x - x_{m-1})f[x_1, \dots, x_m] + (x - x_1) \cdots (x - x_m)f[x_1, \dots, x_m, x]$$

(dove si è posto $f[x_1] = f(x_1)$). Ne segue che se i numeri x_1, \ldots, x_m , verificano il sistema

$$f[x_{1}] = 0$$

$$f[x_{1}, x_{2}] = 0$$

$$f[x_{1}, x_{2}, x_{3}] = 0$$

$$\cdots \cdots \cdots \cdots$$

$$f[x_{1}, x_{2}, \dots, x_{m}] = 0$$
, (6.24)

allora coincidono con le radici dell'equazione (6.23) e viceversa.

Si può dimostrare che il metodo di Newton-Raphson applicato al sistema (6.24) è convergente, comunque si scelga il vettore iniziale $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_m^{(0)})^T \in \mathbb{R}^m$, con l'esclusione al più di un insieme di punti di \mathbb{R}^m di misura nulla.

Utilizzando note proprietà delle differenze divise e delle equazioni algebriche è possibile porre le iterazioni di Newton per il sistema (6.24) nella

forma

$$x_k^{(n+1)} = x_k^{(n)} - \Delta_k, \quad k = 1, 2, \dots, m-1,$$

 $x_m^{(n+1)} = -a_{m-1} - \sum_{k=1}^{m-1} x_k^{(n)}.$

Gli incrementi Δ_k si costruiscono col seguente algoritmo:

$$\begin{aligned} &\text{per } k = 1, 2, \dots, m-1 \\ &p_{0,k} := 1; \\ &\text{per } i = 1, 2, \dots, m-k+1 \\ &p_{i,0} := 0, \\ &p_{i,k} = p_{i,k-1} + p_{i-1,k} x_k^{(n)}; \\ &P_k = \sum_{r=0}^{m-k+1} a_{r+k-1} p_{r,k}; \\ &\text{per } j = 1, 2, \dots, k \\ &q_{0,k}^{[j]} := 1, \\ &\text{per } h = 1, 2, \dots, m-k \\ &q_{h,k}^{[j]} = p_{h,k} + q_{h-1,k}^{[j]} x_j^{(n)}; \\ &Q_{j,k} = \sum_{r=0}^{m-k} a_{r+k} q_{r,k}^{[j]}; \\ &\Delta_k = (P_k - \sum_{r=1}^{k-1} Q_{r,k})/Q_{k,k}. \end{aligned}$$

Nell'algoritmo si è assunto $a_m = 1$ e $\sum_{r=1}^0 = 0$. Per esempio, si consideri l'equazione algebrica

$$x^6 - 4x^5 - 2x^4 + 32x^3 - 59x^2 + 44x - 12 = 0$$

le cui soluzioni sono $x_1 = x_2 = x_3 = 1$, $x_4 = x_5 = 2$, $x_6 = -3$.

Scegliendo $x^{(0)} = (0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$, il metodo di Pasquini-Trigiante, programmato in precisione doppia, fornisce, dopo n iterazioni, i seguenti risultati che si riportano con 7 cifre decimali.

n	$x_1^{(n)}$	$x_2^{(n)}$	$x_3^{(n)}$	$x_4^{(n)}$	$x_5^{(n)}$	$x_6^{(n)}$	
1	0.2727272	0.4730354	1.0979872	14.1562500	4.5000000	-16.5000000	
5	0.8120109	1.1411024	0.9627325	3.5977632	0.7398782	-3.2534874	
10	0.9720920	0.9717788	1.0563354	2.0696312	1.9301192	-2.9999568	
20	0.9995045	0.9984509	1.0006503	2.0000913	1.9999086	-2.9999999	
30	0.9999282	1.0000030	1.0000041	2.0000000	1.9999999	-3.0000000	

6.8.2 Interpolazione inversa

In alcune applicazioni si presenta il problema di determinare per quali valori reali di x una funzione, nota per punti, assume un dato valore c.

Un modo di procedere consiste nel sostituire alla funzione f(x) il polinomio di interpolazione $P_k(x)$ relativo ai punti dati e nel risolvere l'equazione algebrica

$$P_k(x) - c = 0 \tag{6.25}$$

ricorrendo, se necessario, alle tecniche esposte nel Capitolo 4.

Tuttavia, nel caso in cui la funzione f(x) sia monotona, almeno su un intervallo contenente tutti i valori x_i , e quindi risulti invertibile su tale intervallo, si può evitare la risoluzione della (6.25).

Infatti, posto $y_i = f(x_i)$, i = 0, 1, ..., k, si costruisce il polinomio di interpolazione $Q_k(y)$ tale che $Q_k(y_i) = x_i$, i = 0, 1, ..., k, e si approssima il valore richiesto calcolando $Q_k(c)$.

Questa tecnica prende il nome di interpolazione inversa.

Esempio 6.8.4 È data la seguente tabella di valori

Si vuole una stima del valore α per il quale $y(\alpha) = 0.5$.

Dai dati appare ragionevole supporre che la funzione y(x) sia monotona al variare di x nell'intervallo contenente i quattro valori assegnati; si costruisce quindi il polinomio $Q_3(y)$ usando il seguente quadro delle differenze divise

Risulta

$$Q_3(y) = -1 - \frac{1}{2}(y - 4) - \frac{1}{48}y(y - 4)(y - 2)$$
$$= -\frac{1}{48}(y^3 + 6y^2 - 32y + 48).$$

Una stima di α è data da

$$\alpha \simeq Q_3(0.5) = \frac{801}{1152} = 0.6953125.$$

Usando invece l'interpolazione diretta, si ha il polinomio $P_3(x) = \frac{1}{12}(x^3 - 25x + 24)$; si risolve quindi l'equazione $P_3(x) - 0.5 = 0$, ossia $x^3 - 25x + 18 = 0$, che ha un'unica soluzione nell'intervallo [-1,3]. Applicando, ad esempio, il metodo di Newton si ottiene

$$\alpha \simeq 0.7359438 \ .$$

6.8.3 Altri esempi di interpolazione

Esempio 6.8.5 È data la tabella di valori

Si vogliono interpolare tali valori con la funzione

$$R_2^2(x) = \frac{a_2x^2 + a_1x + a_0}{b_2x^2 + b_1x + b_0} .$$

I coefficienti reali $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2$, sono determinati dalle condizioni $R_2^2(x_i) = y_i, i = 0, 1, 2, 3, 4$, che forniscono il sistema lineare omogeneo di 5 equazioni in 6 incognite

Ovviamente esistono infinite soluzioni. Ponendo, per esempio, $b_2=1,$ si ha

$$a_0 = -2$$
, $a_1 = 1$, $a_2 = 1$, $b_0 = -4$, $b_1 = 3$,

per cui

$$R_2^2(x) = \frac{x^2 + x - 2}{x^2 + 3x - 4}.$$

Si noti che, in questo caso particolare, $R_2^2(x)$ si semplifica nella forma $\frac{x+2}{x+4}$.

Esempio 6.8.6 Si vuole determinare la spline cubica naturale $S_3(x)$ che interpola i valori

$$\begin{array}{c|cccc} x & 0 & 1 & 2 \\ \hline y & a & -a & 2a \end{array}$$

dove $a \in \mathbb{R}$.

La spline $S_3(x)$ è composta da due polinomi $p_1(x), p_2(x)$ (cfr. Teorema 6.4.1), di grado al più tre, relativi agli intervalli [0,1] e [1,2].

Il sistema (6.13), in questo caso, diventa

$$2m_0 + m_1 + m_2 = -6a$$

 $m_0 + 4m_1 + m_2 = 3a$
 $m_1 + 2m_2 = 9a$

ed ha la soluzione

$$m_0 = -\frac{13}{4}a$$
, $m_1 = \frac{1}{2}a$, $m_2 = \frac{17}{4}a$.

Si ha quindi la spline $S_3(x)$ formata dai polinomi

$$\begin{array}{rcl} p_1(x) & = & \frac{5}{4}ax^3 - \frac{13}{4}ax + a \;, & x \in [0,1] \;, \\ p_2(x) & = & -\frac{5}{4}ax^3 + \frac{15}{2}ax^2 - \frac{43}{4}ax + \frac{7}{2}a \;, & x \in [1,2] \;. \end{array}$$

Esempio 6.8.7 Per la funzione $f(x) = \sin(2\pi x)$, sull'intervallo [0, 1], sono assegnate due tabelle di valori che si vogliono interpolare facendo ricorso a diversi tipi di interpolazione.

1. Sia data la tabella di valori

Si ottiene il polinomio di interpolazione di Lagrange

$$L_4(x) = l_1(x) - l_3(x)$$

$$= -\frac{128}{3}x(x - 1/2)(x - 3/4)(x - 1)$$

$$+ \frac{128}{3}x(x - 1/4)(x - 1/2)(x - 1)$$

$$= \frac{32}{3}(2x^3 - 3x^2 + x).$$

2. Sia data la tabella di valori

$$\begin{array}{c|ccc} x & 0 & 1 \\ \hline f(x) & 0 & 0 \\ f'(x) & 2\pi & 2\pi \end{array} .$$

Il polinomio interpolante di Hermite risulta

$$H(x) = h_{10}(x)2\pi + h_{11}(x)2\pi$$
$$= x(x-1)^2 2\pi + (x-1)x^2 2\pi$$
$$= 2\pi (2x^3 - 3x^2 + x).$$

3. La spline cubica naturale $S_3(x)$ che interpola i valori della tabella del punto 1 si ottiene risolvendo il sistema lineare che risulta da (6.13) con h = 1/4, k = 4,

la cui soluzione è

$$m_0 = 6$$
, $m_1 = 0$, $m_2 = -6$, $m_3 = 0$, $m_4 = 6$.

Si ha, quindi, la spline $S_3(x)$

$$\begin{array}{lll} p_1(x) & = & -32x^3 + 6x \;, & x \in [0,1/4] \;, \\ p_2(x) & = & 32x^3 - 48x^2 + 18x - 1 \;, & x \in [1/4,1/2] \;, \\ p_3(x) & = & 32x^3 - 48x^2 + 18x - 1 \;, & x \in [1/2,3/4] \;, \\ p_4(x) & = & -32x^3 + 96x^2 - 90x + 26 \;, & x \in [3/4,1] \;. \end{array}$$

6.8.4 Derivazione numerica

Si considera il problema di valutare le derivate di una funzione della quale sono assegnati i valori in alcuni punti di un intervallo dell'asse reale.

Siano $y_i = f(x_i)$, i = 0, 1, ..., k, con $x_0 < x_1 < \cdots < x_k$, i valori dati. Il problema può essere risolto approssimando f'(x), f''(x), ..., in un punto $x \in]x_0, x_k[$, con le corrispondenti derivate di un polinomio di interpolazione di f(x).

Tuttavia, nell'interpolazione parabolica, polinomi di grado elevato possono scostarsi molto dai valori di f(x) (cfr. Esempio 6.8.2). Inoltre, la proprietà $f(x_i) = P_k(x_i)$, i = 1, 2, ..., k-1, non implica che siano piccoli gli errori

$$|P'_k(x_i) - f'(x_i)|, |P''_k(x_i) - f''(x_i)|, \dots, i = 1, 2, \dots, k-1.$$

Per questo motivo, quando per approssimare una derivata si usa l'interpolazione parabolica, ci si limita a polinomi di grado non elevato e si stimano i valori di $f'(x), f''(x), \ldots$, utilizzando i dati solo in alcuni punti "vicini" al punto x.

In quello che segue, si danno le formule più comuni per la derivata prima e seconda.

Allo scopo si considerano i polinomi di secondo grado

$$q_i(x) = l_{i-1}(x)y_{i-1} + l_i(x)y_i + l_{i+1}(x)y_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, k-1,$$

dove

$$l_{i-1}(x) = \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})},$$

$$l_i(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})},$$
$$l_{i+1}(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)}.$$

Si assume quindi $f'(x) \simeq q_i'(x)$ e $f''(x) \simeq q_i''(x)$, $x \in]x_{i-1}, x_{i+1}[$. Se $x_i = x_0 + ih$, i = 0, 1, ..., k, h > 0, si hanno le cosiddette formule centrali

$$f'(x_i) \simeq q_i'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, \quad i = 1, 2, \dots, k-1,$$
 (6.26)

$$f''(x_i) \simeq q_i''(x_i) = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}, \quad i = 1, 2, \dots, k-1.$$
 (6.27)

L'errore di troncamento della (6.26) è $E_1(x_i) = f'(x_i) - q'_i(x_i)$ e può essere determinato, nel caso che $f(x) \in C^3(]x_0, x_k[)$, considerando, per esempio, gli sviluppi di Taylor

$$y_{i+1} = y_i + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}f^{(3)}(\theta_{i+1})h^3, \ \theta_{i+1} \in]x_i, x_{i+1}[,$$

$$y_{i-1} = y_i - f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}f^{(3)}(\theta_{i-1})h^3, \ \theta_{i-1} \in]x_{i-1}, x_i[.$$

Sottraendo membro a membro queste due relazioni si ottiene,

$$f'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + E_1(x_i) ,$$

dove

$$E_1(x_i) = -\frac{1}{12} \left[f^{(3)}(\theta_{i+1}) + f^{(3)}(\theta_{i-1}) \right] h^2 = -\frac{1}{6} f^{(3)}(\xi_i) h^2,$$

$$\xi_i \in [\theta_{i-1}, \theta_{i+1}].$$

Analogamente, supposto $f(x) \in C^4(]x_0, x_k[)$, si ottiene l'errore di troncamento della (6.27). Dagli sviluppi di Taylor, arrestati ai termini del quarto ordine e sommati membro a membro, si ha

$$f''(x_i) = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} + E_2(x_i) ,$$

dove

$$E_2(x_i) = -\frac{1}{24} \left[f^{(4)}(\tau_{i+1}) + f^{(4)}(\tau_{i-1}) \right] h^2 = -\frac{1}{12} f^{(4)}(\eta_i) h^2 ,$$

con $\tau_{i+1} \in]x_i, x_{i+1}[, \tau_{i-1} \in]x_{i-1}, x_i[e \eta_i \in [\tau_{i-1}, \tau_{i+1}] .$

Esempio 6.8.8 Si consideri il problema differenziale

$$y''(x) = e^{y(x)},$$

 $y(0) = 0,$
 $y(1) = 0,$

la cui soluzione esatta è

$$y(x) = \log \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{c}{\cos \left(\frac{cx}{2} - \frac{c}{4} \right)} \right]^2 \right\} ,$$

essendo la costante c, soluzione dell'equazione $c^2-2\cos^2(c/4)=0$, approssimata da 1.3360556949061.

Fatta una partizione dell'intervallo [0,1] mediante i punti $x_i = ih$, i = 1, 2, ..., k-1, h = 1/k, si vogliono calcolare i valori y_i che approssimano, in tali punti, la soluzione y(x) del problema dato.

Posto $y_0 = y(0) = 0$, $y_k = y(1) = 0$ e tenuto conto che per la (6.27) può scriversi

$$y''(x_i) \simeq \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}, \quad i = 1, 2, \dots, k-1,$$

i valori cercati sono la soluzione del sistema non lineare

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} = e^{y_i}, \quad i = 1, 2, \dots, k - 1.$$

Posto $y^T = (y_1, \dots, y_{k-1})$, tale sistema è della forma g(y) = 0 con $g^T(y) = (g_1(y), g_2(y), \dots, g_{k-1}(y))$,

$$g_1(y) = -2y_1 - h^2 e^{y_1} + y_2 ,$$

$$g_i(y) = y_{i-1} - 2y_i - h^2 e^{y_i} + y_{i+1} , \quad i = 2, \dots, k-2 ,$$

$$g_{k-1}(y) = y_{k-2} - 2y_{k-1} - h^2 e^{y_{k-1}} .$$

Applicando il metodo di Newton $y^{(r+1)}=y^{(r)}-J^{-1}(y^{(r)})g(y^{(r)}), r=0,1,\ldots$, con $k=10,\ y^{(0)}=0$ e arrestando le iterazioni al verificarsi di

 $\|y^{(r+1)} - y^{(r)}\|_{\infty} < 10^{-6},$ si è ottenuto

$$y^{(3)} \simeq \begin{pmatrix} -0.041404 \\ -0.073214 \\ -0.095730 \\ -0.109159 \\ -0.113622 \\ -0.109159 \\ -0.095730 \\ -0.073214 \\ -0.041404 \end{pmatrix},$$

dove l'errore $\max_{1 \le i \le k-1} |y_i^{(3)} - y(x_i)|$ è dell'ordine di 10^{-4} .

Per la derivazione approssimata si possono anche utilizzare funzioni spline. Come è noto, esse hanno grado indipendente dal numero dei punti della partizione, e buone caratteristiche di convergenza (cfr. Teorema 6.4.2).

Se quindi si conosce la spline $S_3(x)$ che interpola i valori $y_i = f(x_i)$, $x_i = x_0 + ih$, i = 0, 1, ..., k, si assume, per ogni $x \in [x_0, x_k]$, $f'(x) \simeq S'_3(x)$ e $f''(x) \simeq S''_3(x)$. In particolare, dalla dimostrazione del Teorema 6.4.1, risulta

$$f'(x_i) \simeq m_i$$
, $i = 0, 1, ..., k$,
 $f''(x_0) \simeq \frac{2}{h^2} [3(y_1 - y_0) - h(m_1 + 2m_0)]$,
 $f''(x_i) \simeq \frac{2}{h^2} [3(y_{i-1} - y_i) + h(2m_i + m_{i-1})]$, $i = 1, 2, ..., k$.

Esempio 6.8.9 È data la seguente tavola dei valori di y = f(x)

inoltre sono assegnati $y'_0 = f'(0) = 0$ e $y'_3 = f'(0.3) = -6000/11881$.

Si vogliono stimare f'(0.1), f''(0.1), e f'(0.2), f''(0.2).

È conveniente ricorrere ad una spline vincolata al fine di utilizzare i valori dati di f'(x) negli estremi dell'intervallo. In casi di questo genere, poiché i momenti m_0 e m_k sono noti, nel sistema (6.13) la prima e l'ultima equazione vengono soppresse mentre nella seconda e nella penultima si portano m_0 e m_k a secondo membro. Il sistema quindi si riduce a sole k-1 equazioni in altrettante incognite.

Nella fattispecie si ha

$$4m_1 + m_2 = \frac{3}{h}(y_2 - y_0) - y_0'$$

$$m_1 + 4m_2 = \frac{3}{h}(y_3 - y_1) - y_3'$$

Posto h = 0.1, inserendo i dati e arrotondando i calcoli alla sesta cifra dopo la virgola, si ricava

$$m_1 = -0.196024$$
, $m_2 = -0.369750$,

che possono essere assunti come stime di f'(0.1) e f'(0.2) rispettivamente. Le derivate seconde possono essere approssimate con (cfr. 6.4)

$$p_2''(x_1) = \frac{2}{h^2} \left[3(y_2 - y_1) - h(m_2 + 2m_1) \right] ,$$

$$p_2''(x_2) = \frac{2}{h^2} \left[3(y_1 - y_2) + h(2m_2 + m_1) \right] .$$

Sostituendo i valori trovati per m_1 ed m_2 ed arrotondando i calcoli come sopra si ottiene

$$p_2''(0.1) = -1.900369, \quad p_2''(0.2) = -1.574151,$$

che si assumono come stime di f''(0.1) e f''(0.2).

Al fine di evidenziare la bontà delle approssimazioni ottenute, si effettua il confronto con i valori esatti essendo i dati della tavola quelli della funzione $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$. Si ha:

$$|m_1 - f'(0.1)| \simeq 3.5 \times 10^{-5}, \quad |m_2 - f'(0.2)| \simeq 7.2 \times 10^{-5},$$

 $|p_2''(0.1) - f''(0.1)| \simeq 1.7 \times 10^{-2}, \quad |p_2''(0.2) - f''(0.2)| \simeq 1.3 \times 10^{-1}.$

Se, in luogo della spline vincolata, si usano le formule (6.26) e (6.27) si ottiene:

$$f'(0.1) \simeq q'_1(0.1) = -0.192307,$$

 $f'(0.2) \simeq q'_2(0.2) = -0.363339,$
 $f''(0.1) \simeq q''_2(0.1) = -1.865956,$
 $f''(0.2) \simeq q''_2(0.2) = -1.554672,$

da cui gli errori

$$|q'_1(0.1) - f'(0.1)| \simeq 3.8 \times 10^{-3}, \quad |q'_2(0.2) - f'(0.2)| \simeq 6.5 \times 10^{-3},$$

 $|q''_1(0.1) - f''(0.1)| \simeq 1.7 \times 10^{-2}, \quad |q''_2(0.2) - f''(0.2)| \simeq 1.5 \times 10^{-1}.$

Si spiega la minore precisione raggiunta in questo secondo caso con il fatto che le formule (6.26) e (6.27) non tengono conto dei dati f'(0) e f'(0.3).

6.8.5 Sistemi lineari sovradeterminati

Siano k e m due numeri naturali con k > m e inoltre si abbiano $A \in \mathbb{R}^{k \times m}$ e $b \in \mathbb{R}^k$. Il sistema lineare sovradeterminato

$$Ax = b ag{6.28}$$

ha soluzione se e solo se $r(A) = r(A \mid b)$ (cfr. Teorema 2.5.1).

Nel caso $r(A) < r(A \mid b)$, il sistema (6.28) non ha soluzione e quindi per ogni vettore $x \in \mathbb{R}^m$ si ha

$$b - Ax = r$$

dove $r \in \mathbb{R}^k$, il vettore dei residui, risulta non nullo.

Si dice che si risolve il sistema (6.28) nel senso dei minimi quadrati se si determina un vettore $x \in \mathbb{R}^m$ che renda minimo il prodotto scalare

$$\Psi(x) = (b - Ax)^{T}(b - Ax) = r^{T}r = \sum_{i=1}^{k} r_{i}^{2} = ||r||_{2}^{2}.$$
 (6.29)

La determinazione di un punto di minimo è ricondotta alla ricerca dei punti che annullano tutte le derivate parziali prime della $\Psi(x)$ ossia alla risoluzione del sistema lineare

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left((b - Ax)^T (b - Ax) \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

che si può scrivere nella forma

$$A^T A x = A^T b \,, \tag{6.30}$$

la cui risolubilità risulta da quanto si è detto per il sistema (6.22).

La risoluzione del sistema (6.28) nel senso dei minimi quadrati è semplificata se della matrice A si conosce una decomposizione ai valori singolari (cfr. 2.9) $A = U\Sigma V^T$ con $\Sigma \in \mathbb{R}^{k\times m}$, mentre $U \in \mathbb{R}^{k\times k}$ e $V \in \mathbb{R}^{m\times m}$ sono matrici unitarie.

Si può dimostrare che, indicando con u_i e v_i le colonne, rispettivamente, delle matrici U e V e con σ_i , $i=1,2,\ldots,s$ (s=r(A)), i valori singolari non nulli della matrice A, un vettore c che minimizza la $\Psi(x)$ è dato da

$$c = \sum_{i=1}^{s} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i . (6.31)$$

Si può verificare che a tale vettore corrisponde lo scarto quadratico

$$(b - Ac)^{T}(b - Ac) = \sum_{i=s+1}^{k} |u_{i}^{T}b|^{2}.$$

Se $s=m,\ c$ è l'unica soluzione del sistema (6.30) mentre se s< m nello spazio delle soluzioni del sistema (6.30) c è il vettore con norma euclidea minima.

Esempio 6.8.10 Si consideri il sistema lineare sovradeterminato

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = 1 \\ -x_1 + x_2 = 0 \\ x_1 + 2x_2 = 1. \end{cases}$$

La matrice del sistema è quindi

$$A = \left(\begin{array}{cc} 2 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 2 \end{array}\right).$$

I valori singolari della matrice A, ricavati in base al Teorema 2.9.2, sono $\sigma_1=\sqrt{7}$ e $\sigma_2=\sqrt{5}$ ed una decomposizione ai valori singolari è $A=U\Sigma V^T$ con

$$U = \frac{\sqrt{70}}{70} \begin{pmatrix} 3\sqrt{5} & \sqrt{7} & 3\sqrt{2} \\ -2\sqrt{5} & 0 & 5\sqrt{2} \\ -\sqrt{5} & 3\sqrt{7} & -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{7} & 0 \\ 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$V = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

La (6.31) fornisce la soluzione del sistema nel senso dei minimi quadrati

$$c = \left(\frac{19}{35}, \frac{9}{35}\right)^T$$
.

Alla stessa soluzione si giunge risolvendo il sistema (6.30).

Esempio 6.8.11 Si consideri il sistema lineare Ax = b con $A \in \mathbb{R}^{n \times 2}$ e $b \in \mathbb{R}^n$ dati da

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ n-1 \\ n \end{pmatrix}.$$

La matrice A ha un unico valore singolare positivo $\sigma_1 = \sqrt{2n}$ e gli autovettori delle matrici AA^T e A^TA associati a σ_1^2 sono, rispettivamente,

$$u = \frac{\sqrt{n}}{n} \begin{pmatrix} 1\\1\\\vdots\\1 \end{pmatrix}, \quad v = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix}.$$

Un vettore che minimizza la $\Psi(x)$ è, per la (6.31),

$$c = \frac{u^T b v}{\sigma_1} = \frac{n+1}{4} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 1 \end{array} \right) \ .$$

Poiché in questo caso è r(A) = 1 (quindi s < m), il vettore c ha norma euclidea minima tra tutte le soluzioni del sistema (6.30). Allo stesso risultato si giunge risolvendo direttamente il sistema (6.30) che assume ora la forma

$$\left(\begin{array}{cc} n & n \\ n & n \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} c_1 \\ c_2 \end{array}\right) = n \frac{n+1}{2} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 1 \end{array}\right)$$

e le cui soluzioni sono

$$c = \left(\begin{array}{c} c_1\\ \frac{n+1}{2} - c_1 \end{array}\right) .$$

La norma euclidea

$$||c||_2 = \sqrt{c_1^2 + \left(\frac{n+1}{2} - c_1\right)^2}$$

è minima se $c_1 = (n+1)/4$.

Bibliografia: [1], [19], [26] [29], [27].