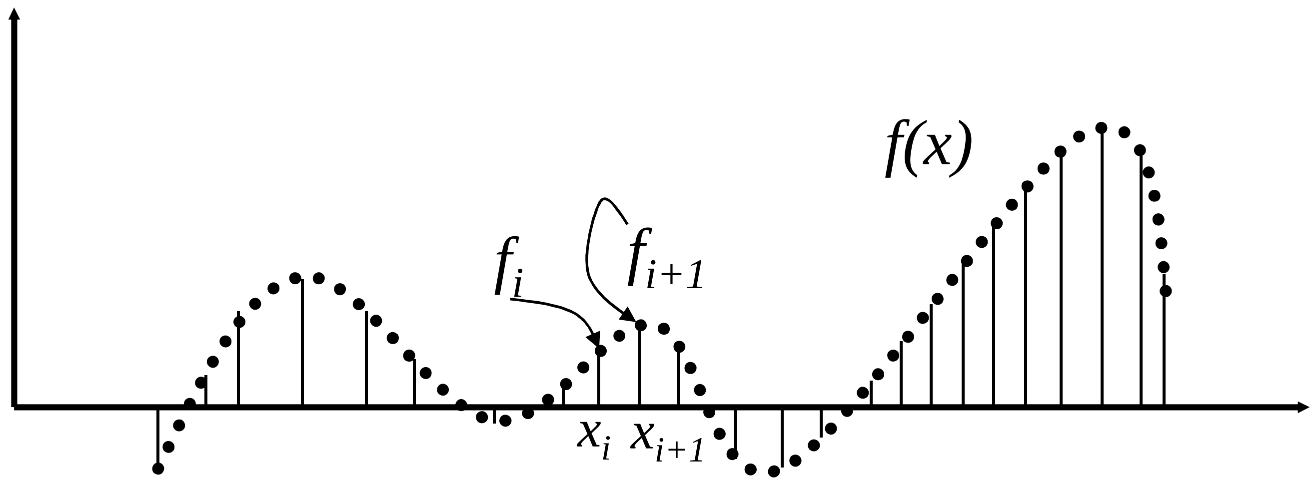
Metodi Computazionali della Fisica

Interpolazione

Problema da risolvere

- Data una lista di punti $[x_i, f_i]$, $i=1,\ldots n$, stimare $f(x)$ per valori arbitrari di x ;
- graficamente: disegnare una curva regolare attraverso i vari punti.



Interpolazione & Curve-fitting

Spesso si hanno a disposizione insiemi di dati provenienti da misure sperimentali.

- Tipicamente, si vede che i dati di (output) variano ...
- …al variare dei parametri di controllo (input).
- Esempi:
  - variazione della pressione con la profondità
  - variazione temporale della velocità del vento
  - variazione spaziale della temperatura

Metodo scientifico: i dati identificano una relazione da trovare.

Processo noto come curve fitting

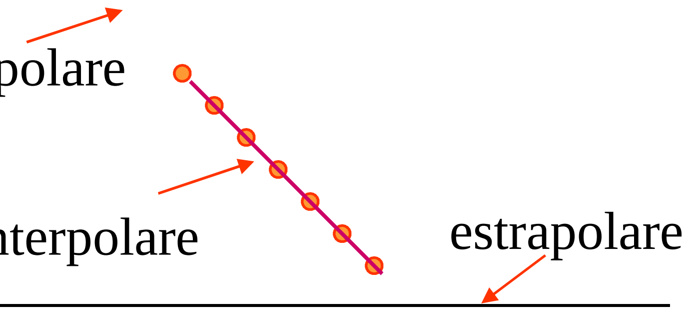
Interpolazione & Curve-fitting

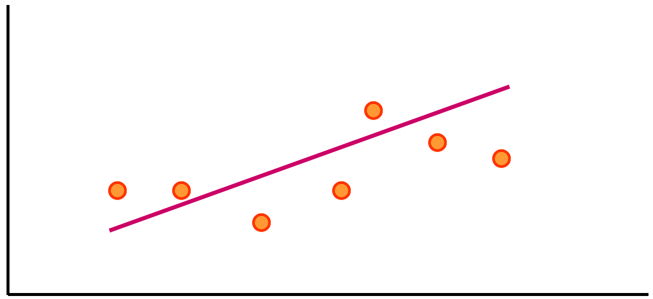
- Dato un'insieme di dati di *n+1* punti (x_i,y_i) identificare una funzione $f(x)$ (la curva), che sia in qualche (ben-definito) modo il ***best fit*** dei dati

- Utilizzato per:
  - Identificare una ***relazione*** sottesa (modello/predizione)
  - ***Interpolazione*** (riempimento dei vuoti)
  - ***Estrapolazione*** (predizione al di fuori del range dei dati)

Interpolazione Vs Regressione

econda della qualità dei dati si possono usare diversi approcci.





confidenza e bassa dispersione nei dati:
c’è una relazione ***polinomiale***
Si vuole trovare un’espressione

Non si sa quale sia la relazione giusta
Chiara dispersione dei dati
Si vuole trovare un’espressione

Interpolazione

nsideriamo il caso in cui non vi siano errori nei dati.

na quindi $y_i = f(x_i)$ negli $n+1$ punti $x_0, x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_n$ rdinati ($x_j > x_{j-1}$) e spesso (ma non sempre) quispaziati.

generale, non si conosce la funzione $f(x)$.

ncettualmente, l'interpolazione consiste di due parti:

– Sviluppare una semplice funzione $g(x)$ che
  - approssimi $f(x)$
  - passi attraverso tutti i punti x_i

Interpolazione

ell'interpolazione è cruciale la selezione della funzione *g(x)*.

tipi di funzione che in genere si considerano:

- **Polinomi**
- Splines
- Funzioni trigonometriche (per f periodiche)
- Funzioni spettrali (Fourier)
- Funzioni razionali (Padè)

Interpolazione polinomiale

consideri un insieme di $n+1$ valori $y_i=f(x_i)$ negli
$n+1$ punti $x_0, x_1 \ldots x_i, \ldots x_n$ ordinati $(x_j > x_{j-1})$

in generale, dati $n+1$ punti, esiste un unico
polinomio $g_n(x)$ di ordine n:

$$g_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$$

e passa attraverso tutti gli $n+1$ punti.

Interpolazione polinomiale

Vi è una varietà di modi per esprimere lo stesso polinomio.

Qui consideriamo il caso dei:

Polinomi interpolanti di Lagrange

Interpolazione polinomiale

Esistenza – esiste un polinomio che passa **esattamente** attraverso gli $n+1$ punti ?

SI. Lo si dimostra costruendolo.

Unicità – Vi è più di un tale polinomio ?

NO. Lo si dimostra.

Polinomio di Lagrange (n+1 punti)

na di *n+1* termini, dove
-*esimo termine*
Sia uguale a $f(x_i)$.
Sia uguale a zero in tutti
gli altri punti assegnati
radici del polinomio *i*-
esimo).
Ogni *i*-esimo termine è
polinomio di grado *n*

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)$$

$$L_i(x) = \prod_{k=0, k\neq i}^{n} \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}$$

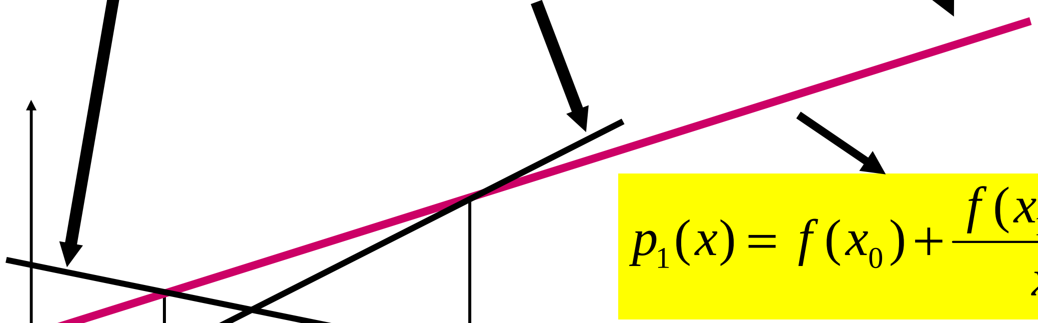
$$L_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Interpolazione lineare (n+1=2)

$n+1=2$ ➔ 2 polinomi di ordine $n=1$ (2 rette)

$$p_1(x)=\sum_{i=0}^{1}L_i(x)\,f(x_i)$$

$$=\frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}f(x_0)\;+\;\frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}f(x_1)$$



$$p_1(x)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)$$

Polinomi di lagrange

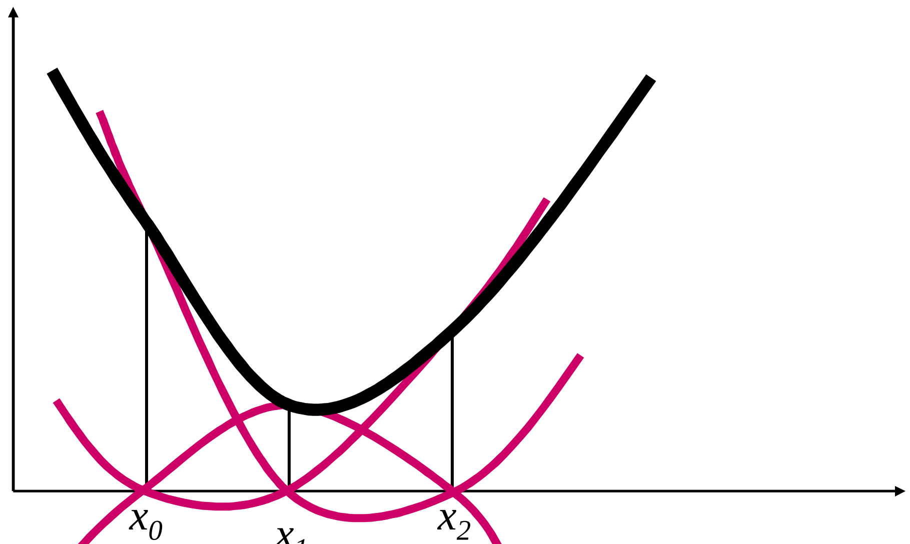
Approssimazione del secondo ordine *n+1 =3*

=> *3* polinomi quadratici (parabole)

terza forma quadratica
radici in x_0 e x_1 ed un
ore uguale a quello
la funzione data in x_2.

$P(x_0) = 0$

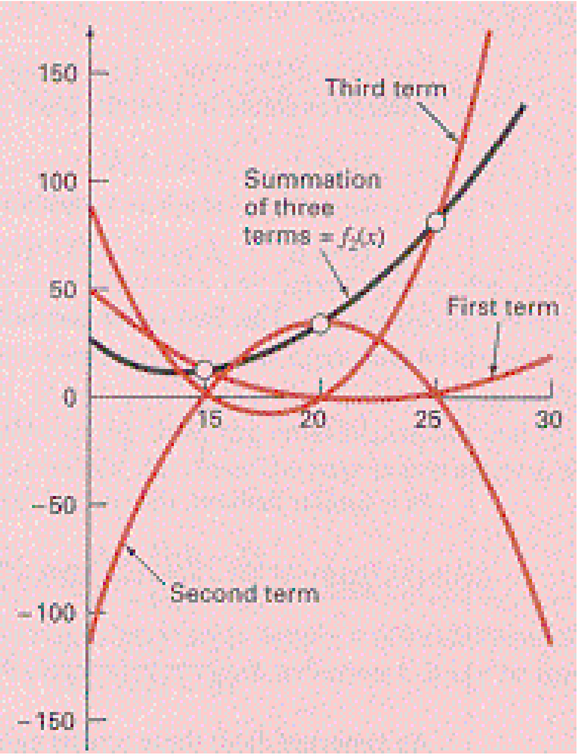
- $P(x_1) = 0$
- $P(x_2) = f_2$



Polinomi di Lagrange

La somma deve essere un unico polinomio del secondo ordine che passa attraverso tutti i punti assegnati.

Quale può essere un'implementazione efficiente di questo metodo?



Polinomi di Lagrange

isto che per ogni insieme di *n+1* punti esiste un unico polinomio olante di ordine *n* definito dalla formula di Lagrange:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \left(\prod_{k=0,\, k \neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right) f(x_i)$$

npi:

$$n = 0 \Rightarrow p_0(x) = f(x_0),$$

$$n = 1 \Rightarrow p_1(x) = f(x_0)\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1)\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

Usare un algoritmo che esprima direttamente tale formula

Algoritmo di Neville (metodo recursivo)

arte dai polinomi di ordine zero
alori $y_i = f(x_i)$) e si costruisce una
uenza di interpolazioni *lineari* :

$$S_{00} = f(x_0)$$

$$S_{10} = f(x_1)$$

....

$$S_{i0} = f(x_i)$$

....

$$S_{n0} = f(x_n)$$

S_{00}, S_{10} si costruisce il polinomio che passa da x_0 e x_1 con la formula:

$$S_{11} = \frac{(x - x_0)S_{10} + (x_1 - x)S_{00}}{}$$

Algorithmo di Neville

o stesso modo, dati S_{10}, S_{20} si ha il polinomio che passa da x_1 e x_2:

$$S_{21} = \frac{(x - x_1)S_{20} + (x_2 - x)S_{10}}{x_2 - x_1}$$

rdine successivo, dati S_{11}, S_{21} si costruisce il polinomio che passa da x_0 e x_2 cioè:

$$S \quad = \frac{(x - x_0)S_{21} + (x_2 - x)S_{11}}{}$$

Algoritmo di Neville

ella
rsiva
3):

$$\begin{array}{lllll}
x_0 :\longrightarrow \; f(x_0) = S_{00} & & & & \\
 & S_{11} & & & \\
x_1 :\longrightarrow \; f(x_1) = S_{10} & & S_{22} & & \\
 & S_{21} & & S_{33} & \\
x_2 :\longrightarrow \; f(x_2) = S_{20} & & S_{32} & & \\
 & S_{31} & & & \\
x_3 :\longrightarrow \; f(x_3) = S_{30} & & & &
\end{array}$$

per esempio:

$$\frac{x-x_0)S_{21}+(x_2-x)S_{11}}{(x_2-x_0)}$$

$$\left\{ (x-x \right. \left[\left(\frac{x-x_1}{\;}\right) f(x \;) + \left(\frac{x_2-x}{\;}\right) f(x \;) \right] + (x \;-x) \left[\left(\frac{x-x_0}{\;}\right) f(x \;) + \left(\frac{x_1-x}{\;}\right) f(x \;) \right] \left. \right\}$$

Algoritmo di Neville (pseudocodice)

array $(x_i)_{0:n}, (y_i)_{0:n}$ → Valori assegnati (input)
Arrays unidimensionali

l array $(S_{ij})_{0:n \times 0:n}$ → Valori uscenti (output)
Array bidimensionale

eger i, j, n

i=0 to n do

$S_{i0} \leftarrow y_i$

$S_{00} = f(x_0)$
$S_{10} = f(x_1)$
....
$S_{i0} = f(x_i)$
....
$S_{n0} = f(x_n)$

l for

r j=1 to n do

for i=j to n do

$$S_{ij} \leftarrow \frac{x - x_{i-j}}{x_i - x_{i-j}} S_{i,j-1} + \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-j}} S_{i-1,j-1}$$

$$S_{22} = \frac{(x - x_0)S_{21} + (x_2 - x)S_{11}}{(x_2 - x_0)}$$

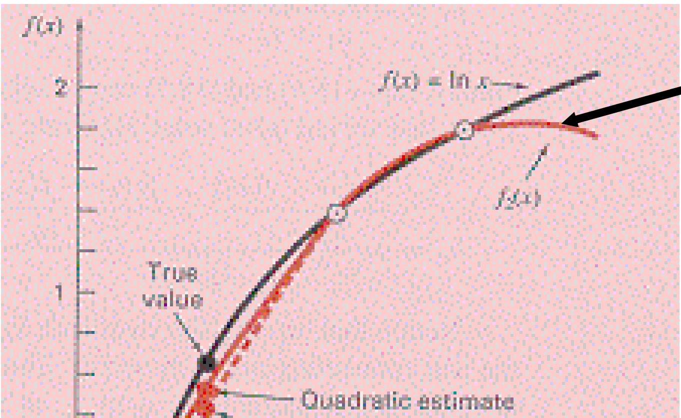
end for

Esempio: ln(x)

Interpolazione di ln(2) assegnati i valori ln(1), ln(4) e ln(6)

- Punti assegnati: {(1,0), (4,1.3863), (6,1.79176)}
- Interpolazione lineare: $0 + \{(1.3863-0)/(4-1)\}(x-1) = 0.4621(x-1)$
- Interpolazione quadratica: $0.4621(x-1)+((0.40546-1.3863)/2)(x-1)(x-4)$

  $= 0.4621(x-1) - 0.49(x-1)(x-4)$



Notare la divergenza
per valori esterni al range
dei dati assegnati.

Esempio: ln(x)

L'interpolazione quadratica coglie un pò della curvatura.

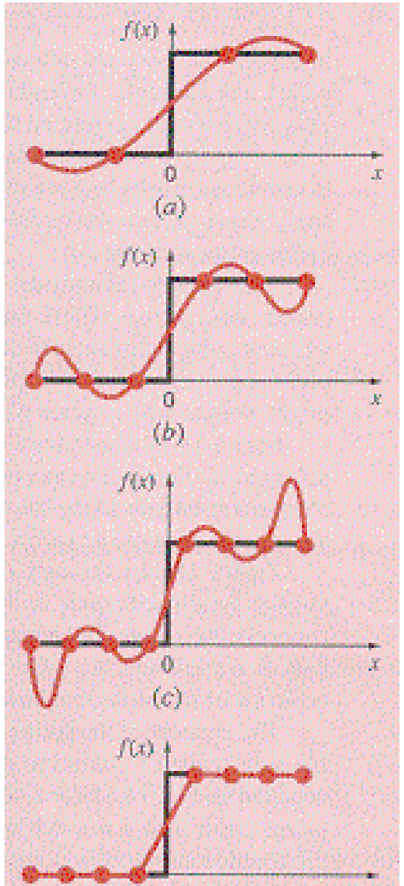
In qualche modo c'è un miglioramento dei risultati.

Non è sempre una buona idea aumentare l'ordine del polinomio.

Problemi

E’ sembre una buona idea usare polinomi di ordine via via superiore ?

Tendenza del polinomio a “oscillare”



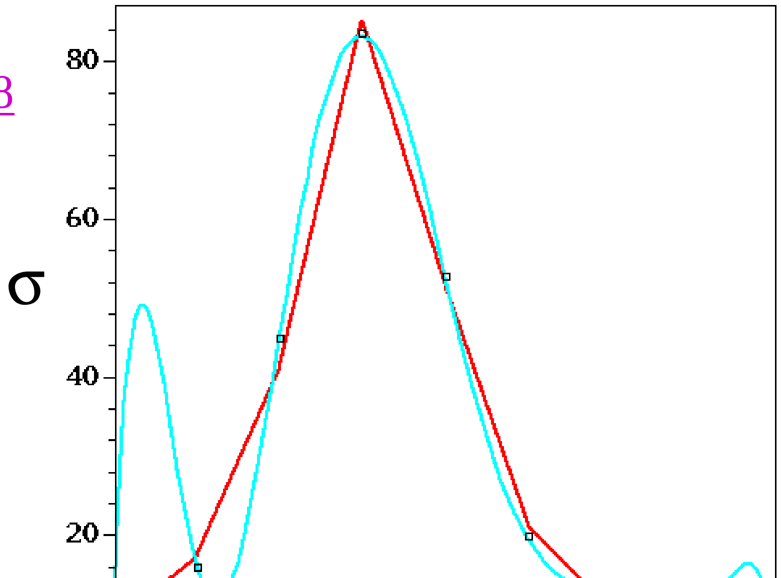
Esempio

Dati da esperimento di scattering di neutroni (9 punti)

Interpolazione con polinomio di ordine 8

Curva teorica (campionata in 8 punti)

.1155169514e-12*t^8
)76360564e-10*t^7
3542968868e-7*t^6
.6631473745e-5*t^5
6942546193e-3*t^4
.3955373764e-1*t^3
093302933*t^2
..40713806*t
).6



L’ordine elevato del polinomio comporta oscillazioni indesiderate.