5. Minimi quadrati

5. Minimi quadrati
- Definizione del problema
  - Problema di ottimizzazione dei minimi quadrati
  - Problema di ottimizzazione min-max
  - Legame tra norme e problemi di ottimizzazione
- Norma di funzioni
  - Non equivalenza delle norme in spazi infinito-dimensionali
- Miglior polinomio approssimante
  - Problemi sottoposti
  - Teorema dell'approssimazione di Weierstrass
- Problema discreto ai minimi quadrati
  - Costruzione del miglior polinomio approssimante
  - Teorema (Sistema classico corrispondente)
  - Svantaggi del metodo dei M.Q. discreto
- Problema continuo ai minimi quadrati
  - Conoscenze preliminari
    - Prodotto scalare
    - informazioni importanti sul prodotto scalare
    - Norma indotta dal prodotto scalare
    - Disuguaglianza di Cauchy-Schwarz
    - Base ortogonale
    - Vettori ortonormali
    - Base ortonormale
    - Normalizzazione di un vettore
    - Settings del problema
  - Ridefinizione problema continuo ai MQ
  - Teorema di Fourier delle equazioni normali
    - Problemi correlati alla risoluzione
    - Problema del malcondizionamento
  - Digressione sulla funzione peso
  - Polinomi ortogonali
  - Teorema (lineare indipendenza e ortogonalità)
  - Teorema (zeri dei polinomi ortogonali)
  - Ortogonalizzazione di Gram-Schmidt
  - Famiglie di polinomi ortogonali standard
  - Errore di approssimazione ai minimi quadrati
    - Teorema del calcolo puntuale dell'errore di approssimazione
  - 🔥 RIASSUNTAZZO: COME CALCOLO IL POLINOMIO APPROSSIMANTE?

Definizione del problema

Vogliamo creare un polinomio interpolante che passi il più vicino possibile ai campioni indicati, pur mantenendo minimo il grado del polinomio stesso (condizione di interpolazione viene rilassata).

Problema di ottimizzazione dei minimi quadrati

Si definisce **polinomio approssimante ottimo** per un certo insieme di campioni $f(x_i)$ un polinomio p tale che:

$$\min \sum_{i=0}^{n} (f(x_i) - p(x_i))^2 \tag{1}$$

Problema di ottimizzazione min-max

Si definisce **polinomio approssimante ottimo** per un certo insieme di campioni $f(x_i)$ un polinomio p tale che:

$$\min \max |f(x_i) - p(x_i)| \tag{2}$$

Legame tra norme e problemi di ottimizzazione

La norma è anche utilizzata per definire la distanza tra due punti nello spazio, quindi data una tolleranza $\epsilon \in \mathbb{R}$, possiamo dire che p approssima f se

$$\|f - p\| \leq \epsilon \tag{3}$$

Norma di funzioni

Si può provare che lo spazio delle funzioni continue sull'intervallo $[a, b]$ è uno spazio vettoriale. Lo spazio delle funzioni continue è uno spazio **infinito-dimensionale**. Uno spazio in cui è definita una funzione norma, è detto **spazio normato**.

Sia definita una funzione $w : [a, b] \to \mathbb{R}^+$ continua ed integrabile in $[a, b]$, detta **funzione peso**. Definiamo le tre norme precedenti nel caso continuo come segue:

$$\begin{aligned}
\text{Norma 1} \quad & \|f\|_1 = \int_a^b |f(x)|w(x)dx \\
\text{Norma 2} \quad & \|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b f^2(x)w(x)dx} \\
\text{Norma infinito} \quad & \|f\|_\infty = \max_{x \in [a,b]} |f(x)|
\end{aligned} \tag{4}$$

Non equivalenza delle norme in spazi infinito-dimensionali

Abbiamo visto precedentemente l'equivalenza delle norme in spazi vettoriali di dimensione finita. Per spazi infinito-dimensionali questo non vale. Possiamo osservarlo attraverso la seguente classe di funzioni:

$$f_k(x) = \begin{cases} k(k^2x - 1) & \frac{1}{k^2} \leq x \leq \frac{2}{k^2} \\ -k(k^2x - 3) & \frac{2}{k^2} \leq x \leq \frac{3}{k^2} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{5}$$

Sia $f(x) = 0$ la funzione nulla, abbiamo che:

$$\|f - f_k\| = \frac{1}{k} \qquad \|f - f_k\|_2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \qquad \|f - f_k\|_\infty = k \tag{6}$$

Per $k \to \infty$ si ottiene:

$$\lim_{k\to\infty} \|f - f_k\| = 0^+ \qquad \lim_{k\to\infty} \|f - f_k\|_2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \qquad \lim_{k\to\infty} \|f - f_k\|_\infty = +\infty \tag{7}$$

Le tre norme sono asintoticamente non equivalenti al variare del parametro k, il quale identifica la signola funzione all'interno della classe di funzioni.

> D'ora in poi faremo implicitamente riferimento alla norma 2 come norma di funzioni.

Miglior polinomio approssimante

Sia V uno spazio infinito-dimensionale normato (es. spazio delle funzioni continue in un certo intervallo) e sia $W \subset V$ uno spazio finito-dimensionale con dimensione $\dim(W) = n$ (es. polinomi di grado n). Diremo che $w^* \in W$ è la migliore approssimazione di $f \in V$ se:

$$\|f - w^*\| \leq \|f - w\| \qquad \forall w \in W \tag{8}$$

Problemi sottoposti

1. (analitico) Esistenza di w^*
   - Esiste se V è uno spazio normato.
2. (analitico) Unicità di w^*
   - Esiste unico in uno spazio V in cui è definito il prodotto scalare.
3. (numerico) Costruzione w^*
   - Nel caso della norma due, attraverso i minimi quadrati.
   - Nel caso della norma del massimo, attraverso il metodo min-max.

Teorema dell'approssimazione di Weierstrass

Se $f \in C[a, b]$ allora per ogni $\epsilon > 0$ esiste un polinomio $p \in P_n$ (n non fissato) tale che

$$\|f - p\| < \epsilon \tag{9}$$

> Questo implica che per qualunque tolleranza ϵ scelta esiste un polinomio di un certo grado che riesce ad approssimare la funzione nei termini di tolleranza.

Problema discreto ai minimi quadrati

Supponiamo di avere un insieme discreto di punti $\{(x_0, y_0), \ldots, (x_m, y_m)\}$ e di voler costruire il miglior polinomio approssimante $p^* \in P_n$. In tal caso:

$$p^* = arg \min_{p\in P_n} \sum_{i=0}^{m} w_i [p^*(x_i) - y_i]^2 \tag{10}$$

Dove il generico w_i pesa l'i-esimo errore di misura. Nel caso generale porremo $w_i = 1$, quindi si avrà il seguente problema di ottimizzazione:

$$p^* = arg \min_{p \in P_n} \sum_{i=0}^{m} [p^*(x_i) - y_i]^2 \tag{11}$$

Costruzione del miglior polinomio approssimante

Solitamente il problema di ottimizzazione proposto si traduce in un sistema lineare sovradimensionato, quindi con m equazioni ed n incognite e dove $m > n$. Un sistema del genere ha soluzione solo se b si trova nell'immagine di Ax. Spesso però questo tipo di sistema non ha una soluzione, ma è comunque possibile calcolare un punto $\bar{x}$ tale che:

$$\|A\bar{x} - b\| \leq \|Ax - b\| \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n \tag{12}$$

In pratica, $\bar{x}$ deve essere minimo rispetto ad ogni altra soluzione. Il seguente teorema ci fornisce un metodo di costruzione di tale punto, ovvero il **metodo dei minimi quadrati discreto**.

Teorema (Sistema classico corrispondente)

Sia $Ax = b$ un sistema lineare sovradimensionato, allora $\bar{x}$ tale che

$$\|A\bar{x} - b\| \leq \|Ax - b\| \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n \tag{13}$$

Sarà soluzione del sistema quadrato

$$A^T Ax = A^T b \tag{14}$$

Svantaggi del metodo dei M.Q. discreto

La matrice $A^T A$ diventa malcondizionata per il problema dei sistemi lineari al crescere della dimensione di A.

Problema continuo ai minimi quadrati

Sia $f \in C[a,b]$ la funzione da approssimare e sia $w \in C^+[a,b]$ la funzione peso, si deve trovare il polinomio $p^* \in P_n$ tale che:

$$p^* = arg \min_{p \in P_n} \int_a^b w(x)[p^*(x) - f(x)]^2 dx \tag{15}$$

Conoscenze preliminari

Richiamiamo dei concetti necessari alla comprensione dell'argomento.

Prodotto scalare

Sia V uno spazio vettoriale, il prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{R}$ è definito da una qualunque funzione che rispetti le seguenti proprietà $\forall v, v_1, v_2 \in V$ e per ogni $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$:

- Linearità rispetto alla prima componente

$$\langle \alpha v_1 + \beta v_2, v \rangle = \alpha \langle v_1, v \rangle + \beta \langle v_2, v \rangle \tag{16}$$

- Simmetria

$$\langle v_1, v_2 \rangle = \langle v_2, v_1 \rangle \tag{17}$$

- Linearità rispetto alla seconda componente

$$\langle v, \alpha v_1 + \beta v_2 \rangle = \alpha \langle v, v_1 \rangle + \beta \langle v, v_2 \rangle \tag{18}$$

- Se almeno una delle due componenti è il vettore nullo 0_V allora il risultato è 0

$$\langle v, 0_V \rangle = \langle 0_V, v \rangle = 0 \tag{19}$$

informazioni importanti sul prodotto scalare

- Se $\langle v, v \rangle > 0$ per ogni $v \in V, v \neq 0$ allora il prodotto scalare è definito positivo
- Se $\langle f, g \rangle = 0$ allora $f, g \in V$ sono ortogonali rispetto al prodotto scalare

Norma indotta dal prodotto scalare

Sia V uno spazio vettoriale in cui è definito un prodotto scalare definito positivo, e sia $f \in V$. Si chiama norma indotta dal prodotto scalare la norma definita come segue:

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle} \tag{20}$$

Disuguaglianza di Cauchy-Schwarz

Siano $f, g \in V$ due funzioni linearmente indipendenti tra loro, allora vale la disuguaglianza di Cauchy-Schwarz:

$$|\langle f, g \rangle| \leq \|f\| \cdot \|g\| \tag{21}$$

Base ortogonale

Sia $v_1, \ldots, v_n \in V$, dove è definito un prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e la dimensione $\dim(V) = n$, allora $\{v_1, \ldots, v_n\}$ è una base ortogonale di V se

- $\{v_1, \ldots, v_n\}$ è una base di V
- $i, j = 1, \ldots, n$ e $i \neq j$ si ha $\langle v_i, v_j \rangle = 0$

Vettori ortonormali

Siano $v_1, v_2 \in V$, dove è definito un prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Si definisce v_1 ortonormale a v_2 se:

- $\langle v_1, v_2 \rangle = 0$
- $\|v_1\| = \|v_2\| = 1$

Base ortonormale

Sia $v_1, \ldots, v_n \in V$, dove è definito un prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e la dimensione $\dim(V) = n$, allora $\{v_1, \ldots, v_n\}$ è una base ortonormale di V se

- $\{v_1, \ldots, v_n\}$ è una base di V
- $i, j = 1, \ldots, n$ e $i \neq j$ si ha $\langle v_i, v_j \rangle = 0$
- $\|v_i\| = 1$ per $i = 1, \ldots, n$

> Oss. Una base ortonormale è anche una base ortogonale.

Normalizzazione di un vettore

Sia $\{v_1, \ldots, v_n\}$ una base ortogonale di uno spazio vettoriale V in cui è definito un prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$, ed una norma $\| \cdot \|$ indotta dal prodotto scalare. Allora è possibile ricavare la rispettiva base ortonormale $\{w_1, \ldots, w_n\}$ nel seguente modo:

$$w_i = \frac{v_i}{\|v_i\|} \qquad i = 1, \ldots, n \tag{22}$$

Settings del problema

Nel problema che ispezioneremo assumeremo che lo spazio vettoriale sia $C[a, b]$ lo spazio delle funzioni continue definite in un intervallo generico $[a, b]$. Il prodotto scalare tra due funzioni continue $f, g \in C[a, b]$ sarà definito come segue:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x) f(x) g(x) dx \tag{23}$$

La norma scelta è la norma 2, definita come segue:

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle} = \sqrt{\int_a^b w(x) f^2(x) dx} \tag{24}$$

Dopodiché è necessario porsi nel caso in cui sia la norma che il prodotto scalare siano quantità definite. Per fare ciò si definisce lo spazio $L^2_w(a, b)$ ovvero l'insieme delle funzioni a valori reali definite su (a, b) tali che la quantità $w(x)|f(x)^2|$ sia integrabile.

> Si può dimostrare che $C[a, b] \subset L^2_w(a, b)$

> **A CHE SERVE?** Semplicemente a garantire che l'integrale all'interno del prodotto scalare (e quindi anche nella norma) sia sempre definito, e mai infinito o indeterminabile.

Se poniamo la funzione peso $w(x) = 1$ allora lo spazio si può esprimere come $L^2(a, b)$.

Ridefinizione problema continuo ai MQ

Dopo le conoscenze preliminari ed il setting del problema, possiamo fornire una definizione più chiara. Sia $f \in L^2_w(a, b)$, lo scopo sarà quello di trovare il miglior polinomio approssimante p^* di grado n, quindi tale che:

$$\|f - p^*\|_2 = \inf_{q \in P_n} \|f - q\|_2 \tag{27}$$

> Usiamo la norma per definire un concetto di errore di approssimazione.

> Usiamo $\inf$ anziché $\min$ poiché P_n è un insieme denso e non è detto che abbia il minimo.

Teorema di Fourier delle equazioni normali

Sia V uno spazio vettoriale infinito dimensionale in cui è definito un prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e sia $W \subseteq V$ uno spazio finito dimensionale $\dim(W) = n$. Sia $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$ una base di W. Allora

$$\forall f \in V, \exists_1 w^* \in W : \|f - w^*\| = \inf_{q \in W} \|f - q\| \tag{28}$$

Ovvero w^* è soluzione del problema continuo ai minimi quadrati. Dato che $w^* \in W$, allora può essere espresso come combinazione lineare della sua base, ovvero esistono $a_1, \ldots, a_n$ tale che:

$$w^* = \sum_{i=1}^{n} a_i \varphi_i \tag{29}$$

È possibile ottenere i coefficienti ponendoli incognite del seguente sistema quadrato, che prende il nome di **sistema delle equazioni normali**:

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^n a_i \langle \varphi_i, \varphi_1 \rangle = \langle f, \varphi_1 \rangle \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^n a_i \langle \varphi_i, \varphi_n \rangle = \langle f, \varphi_n \rangle \end{cases} \tag{30}$$

Problemi correlati alla risoluzione

1. I prodotti scalari sono degli integrali
2. La matrice rimane malcondizionata (analogamente al caso discreto)

Problema del malcondizionamento

Si può dimostrare in particolari circostanze che la matrice ottenuta nel sistema lineare è proporzionale alla matrice di Hilbert, per cui è malcondizionata. La causa numerica del malcondizionamento è da attribuirsi alla base scelta per lo spazio W. Si dimostra che per risolvere tale problema è sufficiente utilizzare una base di W ortogonale. Il metodo non dovrebbe essere però legato alla base, per cui sono stati costruiti metodi che prendono in input una base qualunque e la ortogonalizzano, o addirittura ortonormalizzano (prima ortogonalizzazione, poi normalizzazione). Si dimostra che così facendo, la matrice ottenuta nel sistema lineare sarà una matrice diagonale. Il metodo principale di ortogonalizzazione è quello di **Gram-schmidt**, di cui parleremo dopo.

Digressione sulla funzione peso

Variare la funzione peso $w(x)$ provoca un cambiamento nel prodotto scalare. Essa diventa quindi un selettore per ottenere diverse famiglie di polinomi relative a tale specifico prodotto scalare. Un esempio è proprio la famiglia dei polinomi di Chebichev, ottenuta tramite il prodotto scalare definito tramite la funzione peso

$$w(x) = \frac{1}{1-x^2} \tag{31}$$

Polinomi ortogonali

Data una funzione peso $w(x)$ su (a, b), diremo che la successione di polinomi φ_j per $j = 0, 1, \dots$ forma un sistema di polinomi ortogonali su (a, b) rispetto a w, se ogni φ_j di grado j è tale che:

$$\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle = \int_a^b w(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)dx = \begin{cases} 0 & \forall k \neq j \\ \neq 0 & k = j \end{cases} \tag{32}$$

In particolare se $\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle = 1$ allora i polinomi si dicono ortonormali. Indicheremo l'insieme dei polinomi ortogonali di grado n con Π_n.

Osservazione. Se i polinomi sono ortonormali, il sistema normale diventa:

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^n a_i \langle \varphi_i, \varphi_1 \rangle = \langle f, \varphi_1 \rangle \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^n a_i \langle \varphi_i, \varphi_n \rangle = \langle f, \varphi_n \rangle \end{cases} \quad \rightarrow \quad \begin{cases} a_1 = \langle f, \varphi_1 \rangle \\ \vdots \\ a_n = \langle f, \varphi_n \rangle \end{cases} \tag{33}$$

In pratica la matrice del sistema lineare diventa **diagonale**, se i polinomi sono ortogonali, o una matrice **identità** se i polinomi sono ortonormali.

Teorema (lineare indipendenza e ortogonalità)

Se $\varphi_0, \dots, \varphi_n$ sono ortogonali tra loro, allora sono linearmente indipendenti, ciò formano una base. Viceversa, dati n polinomi linearmente indipendenti è possibile trovare una loro combinazione lineare per cui essi risultino ortogonali.

Teorema (zeri dei polinomi ortogonali)

Se $p \in \Pi_n[a, b]$ (polinomio ortogonale) allora esso ha n zeri **reali**, **distinti** ed **interni** ad $[a, b]$.

Ortogonalizzazione di Gram-Schmidt

Il metodo è generalizzabile per una qualsiasi base, ma lo utilizzermo per diagonalizzare la base canonica S dello spazio dei polinomi P_n

$$S = \{1, x, x^2, \dots, x^n\} \tag{34}$$

Tale base non è ortogonale rispetto ad un qualsiasi prodotto interno. L'ortogonalizzazione procede calcolando per ogni polinomio $p_i(x) \in S$ della base canonica il rispettivo polinomio ortogonale $q_i(x)$. Nel caso della base canonica, $q_k(x)$ si ricava ricorsivamente dai precedenti:

$$q_k(x) = x^k - \sum_{i=0}^{k-1} \langle x^k, p_i \rangle \cdot p_i(x) \tag{35}$$

Per p_i intendiamo il polinomio q_i normalizzato (diviso per la sua norma). Bisogna necessariamente definire il caso base, che sarà:

$$q_0(x) = 1 \tag{36}$$

> Il metodo è molto oneroso anche per n piccolo. È possibile però ricavarsi l'equazione di ricorrenza nel caso specifico, per velocizzare il tutto (come nei polinomi di Chebicev).

Famiglie di polinomi ortogonali standard

Modificando la funzione peso $w(x)$ cambiano le famiglie di polinomi che si ottengono dall'ortogonalizzazione:

- Per $w(x) = 1$ si ottengono i **polinomi di Legendre**
- Per $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ si ottengono i **polinomi di Chebichev**

Errore di approssimazione ai minimi quadrati

Il risultato si basa sull'identità di Parseval, che segue da considerazioni quali il teorema dell'approssimazione di Weierstrass affrontato precedentemente, e la disuguaglianza di Bessel. Tale identità è la seguente:

$$\|f - p_n^*\|_2^2 = \sum_{j=n+1}^{\infty} \langle f, p_j \rangle^2 \tag{37}$$

Tale errore dipende dai coefficienti di Fourier per $j = n+1, \dots$ Ma cosa sono i **coefficienti di Fourier**? Abbiamo visto che ortogonalizzando una base, il rispettivo sistema normale è calcolabile direttamente:

$$\begin{cases} a_1 = \langle f, \varphi_1 \rangle \\ \vdots \\ a_n = \langle f, \varphi_n \rangle \end{cases} \tag{38}$$

Ed $a_1, \dots, a_n$ sono proprio i coefficienti di Fourier.

Per calcolare l'errore puntuale è possibile utilizzare il seguente teorema.

Teorema del calcolo puntuale dell'errore di approssimazione

Sia $p_n^*(x)$ il polinomio ai minimi quadrati di $f \in C^2[-1,1]$, allora

$$\exists \epsilon > 0, \forall x \in [-1,1] \implies |f(x) - p_n^*(x)| \leq \frac{\epsilon}{\sqrt{n}} \tag{39}$$

🔥 RIASSUNTAZZO: COME CALCOLO IL POLINOMIO APPROSSIMANTE?

1. Calcolo la base ortonormale attraverso la procedura di Gram-Schmidt
2. Calcolo i coefficienti del polinomio attraverso le formule dirette
3. Costruisco il polinomio come mostrato nel teorema di Fourier delle equazioni normali