

# APPUNTI DI CALCOLO NUMERICO

## Approssimazione di dati e di funzioni

### Generalità

Caso 1: siano dati  $(x_i, y_i)$  con  $i = 0, 1, \dots, n$  e si voglia approssimarli con una funzione analitica  $g(x)$  in modo tale da poter stimare l'andamento dei dati per  $x \neq x_i$ .

Caso 2: data una funzione  $f(x)$  si voglia trovarne un'altra  $g(x)$ , più semplice, che approssimi la  $f(x)$  più complicata. Questo ragionamento è molto utile per poter lavorare con la  $g(x)$  al posto della  $f(x)$ ; ad esempio per calcolare  $\int_a^b e^{-x^2} dx$  e si ha

che  $e^{-x^2} \cong g$  e che  $g$  è più semplice di  $f$ , allora si può porre  $\int_a^b e^{-x^2} dx \cong \int_a^b g(x) dx$ . Una funzione  $g(x)$  polinomiale sarà nettamente più facile da trattare che la funzione  $f(x)$ .

Il caso 2 può essere ricondotto al caso 1 ponendo  $(x_i, f(x_i))$  con  $i = 0, 1, \dots, n$ .

### Richiami

Se un certo teorema afferma che se  $f \in C^2[a, b]$  allora vale una certa cosa, il teorema è valido per tutti gli spazi  $C^k$  con  $k \geq 2$ . Quindi il teorema vale anche per la funzione  $f(x) = \sin x \in C^\infty$ .

Si ricorda che il simbolo  $C^\infty$  significa che la funzione è infinitamente derivabile e tutte le derivate sono continue. Genericamente  $C^k$  indica le funzioni che sono derivabili fino alla derivata di ordine  $k$  e tutte le derivate che esistono sono continue.

*Esempio:*

La funzione  $f(x) = |x| \in C^0$  cioè non è derivabile.

La funzione  $f(x) = x^2 \in C^\infty$ .

La dimensione di uno spazio vettoriale coincide con il numero degli elementi della base dello spazio, ossia con il numero di parametri che individua una certa  $f_m \in F_m$ , ossia ancora con il numero delle condizioni da imporre in un problema.

Si consideri lo spazio vettoriale  $V = \mathfrak{R}^3$  dei vettori nello spazio. Tutti i vettori di  $V$  sono formati da un'opportuna combinazione lineare della base dello spazio. Ad esempio  $(x, y, z) = x(1, 0, 0) + y(0, 1, 0) + z(0, 0, 1)$ . Si dice che  $\mathfrak{R}^3 = \text{span}\{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$  e che  $\langle (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1) \rangle$  è la base dello spazio (questa, in particolare, è la base canonica). Gli elementi della base sono tutti linearmente indipendenti. Le triplete

$\langle(1,0,0),(2,0,0),(0,1,0)\rangle$  e  $\langle(1,0,0),(0,0,1),(1,0,1)\rangle$  non sono basi lecite in quanto gli elementi che le compongono sono linearmente dipendenti. Quindi  $\dim \mathfrak{R}^3 = 3$ .

## Approssimazione di funzioni

Come si procede per approssimare una funzione?

Data una funzione  $f \in F = C^k[a,b]$ , si individua dapprima un sottospazio  $F_m$  di funzioni, di dimensione finita, in cui cercare la funzione  $f_m$  che approssimi la  $f$ . Ad esempio sottospazi che si possono scegliere, e loro dimensione, sono:

- $P_m$ , polinomi algebrici di grado  $m$ ,  $\dim P_m = m+1$ ;
- $P_m^T$ , polinomi a tratti di grado  $m$  generalmente basso,  $\dim P_m^T = (r+1) \times (\text{numero di intervalli})$ ;
- $S_r$ , funzioni spline di ordine  $r$ ,  $\dim S_m = \dots$ ;
- $\Pi_m$ , polinomi trigonometrici (per funzioni periodiche),  $\dim \Pi_m = 2m+1$ ;
- ...

Successivamente si determina un criterio per trovare la unica  $f_m \in F_m$  che approssimi i dati:

- interpolazione:  $f_m(x_i) = y_i$  con  $i = 0, 1, \dots, n$ ;
- minimi quadrati:  $\min \sum_{i=0}^n (f_m(x_i) - y_i)^2$ .

Per quanto riguarda l'interpolazione, è possibile affermare che il numero di nodi  $n+1$  coincide con  $m+1$ , cioè con il grado del polinomio interpolante aumentato di uno. Inoltre, se i punti rappresentativi dei dati si trovano distribuiti in modo tale da assomigliare al grafico di una funzione, l'approssimante dovrà essere proprio quella funzione, di qualunque grado essa sia, purché minore del numero dei dati.

Ci si aspetta che maggiore sia il grado  $m$  del polinomio approssimante, migliore sia l'approssimazione.

## Norma di funzione

Definiamo solamente la norma infinito, detta anche norma uniforme:

$$\|f\|_{\infty} = \max_{x \in [a,b]} |f(x)|.$$

Le norme di funzione non sono equivalenti. Quindi la convergenza in una norma, non implica la convergenza in tutte le altre. Si parla quindi di convergenza in norma uniforme.

## Convergenza uniforme

Data una successione  $\{F_m\}_{m \geq 0}$  di spazi vettoriali e una funzione  $f_m \in F_m$ , se si verifica che

$$\lim_{m \rightarrow 0} \|f - f_m\|_{\infty} = 0$$

allora si dice che si ha convergenza uniforme di  $f_m$  a  $f$ , cioè si ha convergenza uniforme dell'approssimazione.

## Interpolazione polinomiale

Consideriamo lo spazio dei polinomi di grado al più  $m$ . Cerchiamo un polinomio che passi esattamente per i nodi dell'interpolazione, cioè che i dati appartengano al grafico della funzione approssimante.

Dati degli  $(x_i, y_i)$  con  $i = 0, 1, \dots, n$ , detti nodi, vogliamo trovare un polinomio  $p_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k \phi_k(x)$  dove le funzioni  $\phi_k$  sono funzioni base dello spazio vettoriale, ossia siano tali che  $P_n = \text{span}\{\phi_0(x), \dots, \phi_n(x)\}$ .

Ad esempio possiamo scegliere la base monomiale  $\langle 1, x, x^2, \dots, x^n \rangle$

Cerchiamo ora un criterio di interpolazione.

Sappiamo che  $p_n(x_i) = y_i$  con  $i = 0, 1, \dots, n$ . Allora, generalizzando, si ottiene

$$\sum_{k=0}^n a_k \phi_k(x_i) = y_i.$$

Introduciamo la matrice di Grahm:

$$G = \begin{pmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_0) & \dots & \phi_n(x_0) \\ \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \dots & \phi_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_0(x_n) & \phi_1(x_n) & \dots & \phi_n(x_n) \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{(n+1) \times (n+1)}$$

e i vettori  $a = \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{n+1}$  e  $y = \begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{n+1}$ . Le incognite sono i coefficienti  $a_i$  del

vettore  $a$ .

Queste  $n+1$  equazioni corrispondono al sistema lineare  $Ga = y$ .

Non è detto che si riesca a trovare sempre un polinomio interpolante, comunque siano i dati. Si può dimostrare che esiste ed è unico un polinomio interpolante se

e solo se il sistema  $Ga = y$  ammette una e una sola soluzione, cioè se la matrice  $G$  è invertibile.

*Proposizione:* se le funzioni  $\phi_k(x)$ , con  $k = 0, 1, \dots, n$ , sono linearmente indipendenti e i nodi sono tutti distinti, allora una matrice della forma della matrice di Gram è invertibile.

Dato che le  $\phi_k(x)$  formano una base dello spazio vettoriale, esse sono certamente linearmente indipendenti. Basta quindi verificare solamente che i nodi siano tutti distinti, cioè che si abbia  $x_i \neq x_j$  per ogni  $i \neq j$ .

Come si determinano i coefficienti  $a_k$ ? Una strada sarebbe quella di risolvere il sistema. Tuttavia questo metodo è molto gravoso dal punto di vista computazionale e, inoltre, il sistema potrebbe essere molto mal condizionato.

Ad esempio, se si sceglie la base monomiale  $\langle 1, x, x^2, \dots, x^n \rangle$ , la matrice  $G$  ha una forma molto particolare e si definisce matrice di Vandermonde:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{pmatrix}.$$

Questa matrice tende a diventare molto mal condizionata.

L'uso di basi differenti può portare a metodi diversi per calcolare i coefficienti  $a_k$ .

## Base di Lagrange

È definita in modo tale che il calcolo dei coefficienti  $a_k$  sia il più semplice possibile. Chiamiamo  $\phi_k(x) = l_k(x)$  e questi termini siano tali che  $l_k(x_i) = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$  e precisamente valgano 1 se  $i = k$  e valgano 0 se  $i \neq k$ .

Quindi  $y_i = p_n(x_i) = \sum_{k=0}^n a_k l_k(x_i) = a_i l_i(x_i) = a_i$ , ossia

$$a_i = y_i, \quad \forall i.$$

Come è fatto un elemento  $l_k$ ? Si deve azzerare in  $x_i$  e deve valere 1 in  $x_k$ , quindi avrà questa forma

$$l_k(x) = \frac{\prod_{i \neq k} (x - x_i)}{\prod_{i \neq k} (x_k - x_i)}$$

*Esempio:*

Siano dati  $(x_0, y_0) = (-2, 3)$ ,  $(x_1, y_1) = (1, -7)$  e  $(x_2, y_2) = (3, -5)$ . Calcolare il polinomio  $p_2(x)$  con la base di Lagrange.

Si verifica immediatamente che i nodi sono distinti.

$$l_0(x) = \frac{(x-1)(x-3)}{(-2-1)(-2-7)}$$

$$l_1(x) = \frac{(x+2)(x-3)}{(1+2)(1-3)}$$

$$l_2(x) = \frac{(x+2)(x-1)}{(3+2)(3-1)}$$

e il polinomio risulta

$$p_2(x) = 3l_0(x) - 7l_1(x) - 5l_2(x).$$

Con la base di Lagrange si ha che la matrice di Gram coincide con la matrice identità:  $G = I$ .

## Base di Newton

Immaginiamo di avere  $n+1$  dati e di conoscerne il polinomio interpolante  $p_n(x)$ . Aggiungiamo un nuovo dato  $(x_{n+1}, y_{n+1})$ . Cerchiamo il nuovo polinomio interpolante  $p_{n+1}(x)$  sfruttando quello vecchio. Poniamo quindi

$$p_{n+1}(x) = p_n(x) + q_n(x)$$

dove  $q_n(x)$  rappresenta un termine correttivo da sommare algebricamente a  $p_n(x)$  per ottenere  $p_{n+1}(x)$ . Di questo termine correttivo conosciamo il grado  $n+1$ . Sappiamo inoltre che deve essere vera la relazione  $p_{n+1}(x_i) = p_n(x_i) + q_n(x_i)$  per  $i = 0, 1, \dots, n$ . Deve perciò valere  $y_i = y_i + q_n(x_i)$  da cui si deduce che  $q_n(x_i) = 0$  per  $i = 0, 1, \dots, n$ . Analogamente, si può dire che  $q_n(x_i)$  ha esattamente come radici le  $x_i$  per  $i = 0, 1, \dots, n$  che in formule si traduce in

$$q_n(x) = a_{n+1}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) = a_{n+1}\omega_{n+1}(x)$$

dove  $n+1$  è il numero dei fattori e anche il grado del polinomio.

Dato che  $p_{n+1}(x_{n+1}) = y_{n+1}$  (condizione di interpolazione sul nuovo dato), possiamo

determinare  $a_{n+1} = \frac{y_{n+1} - p_n(x_{n+1})}{\omega_{n+1}(x_{n+1})}$  imponendo che il nuovo polinomio interpoli esattamente il nuovo dato.

Un generico polinomio interpolante può essere scritto, estendendo il ragionamento all'indietro, come

$$p_{n+1}(x) = \sum_{k=0}^{n+1} a_k \omega_k(x).$$

Abbiamo così costruito la base di Newton  $\omega$ :

$$\begin{aligned} \omega_0(x) &= 1 \\ \omega_1(x) &= x - x_0 \\ \omega_2(x) &= (x - x_0)(x - x_1) \\ &\vdots \\ \omega_n(x) &= \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k) \end{aligned}$$

in cui  $n$  rappresenta il grado, e quindi il numero di fattori.

Un modo semplificato per calcolare i coefficienti  $a_k$  si basa sulle differenze divise.

Siano  $x_i$ , con  $i = 0, 1, \dots, n$ ,  $n$  nodi distinti.

Si dice differenza divisa di ordine zero di  $f$  relativa al nodo  $x_k$  la quantità

$$f[x_k] = f(x_k).$$

Si dice differenza divisa di ordine  $k \geq 0$  relativa ai nodi  $x_{i,0}, x_{i,1}, \dots, x_{i,k}$  la quantità

$$f[x_{i,0}, x_{i,1}, \dots, x_{i,k}] = \frac{f[x_{i,1}, \dots, x_{i,k}] - f[x_{i,0}, x_{i,1}, \dots, x_{i,k-1}]}{x_{i,k} - x_{i,0}}.$$

Si dimostra che, per la base di Newton, si ha  $a_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ .

Costruiamo ora la tavola delle differenze finite. Siano dati  $(x_0, y_0) = (-2, 3)$ ,  $(x_1, y_1) = (1, -7)$ ,  $(x_2, y_2) = (3, -5)$  e  $(x_3, y_3) = (4, -7)$  dove  $y_i = f(x_i)$ . La tavola risulta:

$x_k$	$f[x_k]$	$f[x_k, x_{k+1}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}, x_{k+3}]$
-2	2			
1	-7	-3		
3	-5	1	$\frac{4}{5}$	
4	-7	-2	-1	$-\frac{3}{10}$

Il polinomio approssimante così determinato risulta il seguente:

$$p_3(x) = 2 - 3(x+2) + \frac{4}{5}(x+2)(x-1) - \frac{3}{10}(x+2)(x-1)(x-3).$$

I coefficienti si determinano a partire dalla tavola delle differenze divise prendendo il primo risultato (quello più in alto) di ciascuna colonna.

*Proprietà:* le differenze divise non dipendono dall'ordine dei nodi.

I denominatori delle differenze divise, in caso di nodi tutti distinti, sono tutti non nulli. Si dice in questo caso che la tavola delle differenze divise è ben definita.

Per considerare un dato ulteriore basta aggiungere una riga e una colonna alla tavola delle differenze divise e si ottiene immediatamente il nuovo polinomio approssimante.

## Convergenza dell'interpolazione polinomiale

Definiamo errore di interpolazione la quantità

$$E_n(x) = f(x) - p_n(x).$$

Considerando lo spazio dei polinomi di grado al più  $n$ , sicuramente  $E_n(x_i) = 0$  ossia nei nodi l'errore è nullo, per come è stata definita l'interpolazione, e  $E_n(x) \equiv 0$  quando  $f$  è già un polinomio di grado minore o uguale a  $n$ . Ad esempio, se cerco l'approssimazione di una funzione in un determinato spazio vettoriale, e la funzione stessa appartiene a quel medesimo spazio vettoriale, devo trovare la funzione che voglio approssimare come approssimante.

*Teorema:* sia  $f \in C^{n+1}[a, b]$ , allora l'errore di interpolazione assume la seguente forma  $E_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x)$  con  $\xi \in [a, b]$ .

Questo teorema non è molto utile dal punto di vista pratico. Quello che vorremmo sapere è il comportamento dell'errore all'aumentare del grado del polinomio approssimante. In sostanza vogliamo sapere il risultato del seguente limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|E_n(x)\|_{\infty}.$$

La risposta dipende sia dalla funzione  $f$ , sia dalla scelta dei nodi.

Generiamo una successione di nodi:

$$\begin{array}{cccc}
 x_0^{(1)} & & & \\
 x_0^{(2)} & x_1^{(2)} & & \\
 \vdots & \vdots & & \\
 x_0^{(n+1)} & x_1^{(n+1)} & \dots & x_n^{(n+1)}
 \end{array}$$

possiamo enunciare un nuovo teorema che è più semplice e più utile ai fini pratici.

*Teorema:* sia  $f \in C^0([a,b])$ , allora

$$\|E_n\|_\infty \leq (1 + \Lambda_n) \min_{q \in P_n} \|f - q\|_\infty$$

dove  $\Lambda_n$  è la costante di Lebesgue.

Da questo teorema deriva un risultato già noto: se la funzione  $f$  appartiene allo spazio dei polinomi di grado al più  $n$ , allora il termine  $\min_{q \in P_n} \|f - q\|_\infty$  è nullo.

Il teorema di Weierstrass afferma che esiste sempre un polinomio di grado  $n$  tale da essere vicino alla funzione  $f$  meno di  $\varepsilon$ , comunque si prendano la funzione  $f$  e la costante  $\varepsilon$  (piccola a piacere).

Questo ci permette di affermare che quando  $n \rightarrow \infty$  allora  $\min_{q \in P_n} \|f - q\|_\infty \rightarrow 0$ . Tuttavia la costante di Lebesgue tende a  $\infty$  per  $n \rightarrow \infty$ . Quindi il comportamento di  $(1 + \Lambda_n) \min_{q \in P_n} \|f - q\|_\infty$  per  $n \rightarrow \infty$  dipende dal modo in cui i due termini tendono all'infinito (il primo) e a zero (il secondo).

Come è fatta la costante di Lebesgue? Dipende dai nodi. Se i nodi sono tutti equidistanti, allora  $\Lambda_n \geq e^{\frac{n}{2}}$  e quindi tende all'infinito molto rapidamente al crescere di  $n$ . Se i nodi sono distribuiti secondo Chebychev, ossia vale

$$x_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right) \in (-1,1) \text{ per } i = 0,1,\dots,n,$$

allora  $\Lambda_n \sim \frac{\pi}{2} \log n$  e tende all'infinito molto lentamente per  $n \rightarrow \infty$ . Si può dimostrare che questo valore della costante di Lebesgue è il migliore.

Allora quale disposizione dei nodi è meglio scegliere? Non esiste una risposta assoluta. Ad esempio consideriamo la funzione  $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$  con  $x \in [a,b]$ , detta funzione di Runge, ed evidenziamo quello che si chiama fenomeno di Runge. Se interpoliamo la funzione  $f$  sull'intervallo  $[1,2]$  prendendo nodi equidistanti



notiamo che l'interpolazione ottenuta è perfetta già con 5 nodi e non vediamo alcun cambiamento se ragioniamo con 9 o con 13 nodi. Se tuttavia proviamo ad interpolare la medesima funzione su altri intervalli, ad esempio  $[-5,5]$ , con nodi equidistanti notiamo che i polinomi interpolanti iniziano ad oscillare verso gli estremi dell'intervallo considerato. E le oscillazioni aumentano all'aumentare di  $n$ . Se interpoliamo la stessa funzione, nello stesso intervallo, ma utilizzando i nodi di Chebychev le oscillazioni dei polinomi interpolanti agli estremi dell'intervallo sono più contenute.

Quattro teoremi riassumono quello che si evince da questo esempio.

*Teorema 1:* se  $f \in C^0[a,b]$ , esiste una successione di nodi in  $[a,b]$  tale che la successione di polinomi interpolanti costruita su di essi converge uniformemente a  $f$  per  $n \rightarrow \infty$ .

*Teorema 2 o teorema di Faber:* data una qualunque successione di nodi distinti su  $[a,b]$ , allora esiste sempre una funzione  $f \in C^0[a,b]$  per cui la successione di polinomi interpolanti costruita su di essi NON converge uniformemente.

*Teorema 3 o teorema di Bernstein:* se  $f \in C^1[a,b]$ , allora la successione dei nodi di Chebychev converge uniformemente a  $f$  in  $[a,b]$ . Se inoltre  $f \in C^2[a,b]$  allora

$$\|E_n\|_\infty = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right).$$

*Teorema 4:* se la funzione, di variabile complessa  $z$ ,  $f(z)$  è analitica in un dominio del piano complesso che contiene  $[a,b]$  e se le singolarità di  $f$  distano dall'intervallo  $[a,b]$  più della sua ampiezza  $b-a$ , allora vale  $\lim_{n \rightarrow \infty} \|E_n\|_\infty = 0$ , ossia c'è convergenza polinomiale.

Quanto è stato detto vale se vogliamo approssimare la funzione  $f$  con un unico polinomio che interpoli tutti i nodi.

## Interpolazione polinomiale a tratti non raccordata

L'infittimento dei nodi non garantisce in generale un miglior comportamento del polinomio interpolante.

Nell'interpolazione polinomiale a tratti si stabilisce a priori il grado  $r$  del polinomio, generalmente piccolo. Si suddivide successivamente l'intervallo  $[a,b]$  in tanti intervallini per mezzo di  $n+1$  nodi  $x_i$ . Ogni  $r+1$  nodi si costruisce un polinomio interpolante diverso.

In questo caso infittire il numero dei nodi equivale ad aumentare i tratti di polinomio interpolante. Inoltre se la funzione  $f$  è regolare, allora è garantita la convergenza uniforme, indipendentemente dalla scelta dei nodi.

## Interpolazione polinomiale a tratti raccordata o tramite spline

Definiamo una funzione spline: siano  $x_i$  nodi che partizionano l'intervallo  $[a, b]$  in  $n$  intervallini. Fissato l'ordine o grado della spline  $d \geq 1$ , la funzione  $s_d(x)$  è detta spline relativa ad  $[a, b]$  se

- $s_d(x)$  è un polinomio di grado al più  $d$  su ciascun intervallino;
- $s_d^{(k)}(x)$  è una funzione continua in  $[a, b]$  per ogni  $k = 0, 1, \dots, d-1$ .

Si dice spline interpolante i dati una funzione spline  $s_d(x)$  che, dati  $(x_i, y_i)$  con  $i = 0, 1, \dots, n$ , soddisfa le seguenti condizioni:

- $s_d(x)$  è una spline relativa alla partizione  $\{x_i\}$ ;
- $s_d(x_i) = y_i$  per  $i = 0, 1, \dots, n$ .

Determiniamo i gradi di libertà di una spline.

Il numero di parametri di cui abbiamo bisogno è  $(d+1) \cdot n = dn + n$ , dove  $n$  è il numero di intervallini. Il numero di condizioni che possiamo scrivere è  $n+1+d \cdot (n-1) = dn - d + n + 1$ , dove  $n+1$  sono le condizioni di interpolazione e  $(n-1) \cdot d$  sono le condizioni di raccordo nei nodi interni.

La differenza tra questi due valori è pari a  $d-1$ . Abbiamo quindi  $d-1$  gradi di libertà.

Le spline più utilizzate sono quelle di ordine  $d=3$ , per questo dette spline cubiche. In questo caso abbiamo  $3-1=2$  gradi di libertà.

Le due condizioni mancanti per determinare univocamente tutti i parametri possono essere scelte anche arbitrariamente. Tuttavia, si elencano nel seguito quattro modi per determinare le due condizioni mancanti:

- spline naturali:  $s_3''(x_0) = 0, s_3''(x_n) = 0$ ;
- spline periodiche:  $s_3'(x_0) = s_3'(x_n), s_3''(x_0) = s_3''(x_n)$ ;
- spline vincolate:  $s_3'(x_0) = y_0', s_3'(x_n) = y_n'$  con  $y_0'$  e  $y_n'$  dati;
- spline not-a-knot:  $s_3'''(x)$  continua in due nodi (ad esempio il primo e l'ultimo nodo interno  $x_1$  e  $x_{n-1}$ ).

L'ultima condizione richiede la continuità della funzione e delle derivate prima, seconda e terza in un nodo interno.

L'unico modo per cui questo avvenga è che i due polinomi approssimanti, che si uniscono nel nodo in esame, siano in realtà la stessa.

Quindi il nodo interno considerato NON è un nodo (not-a-knot).

Ci resta da verificare la convergenza dell'interpolazione polinomiale tramite spline.

## Convergenza dell'interpolazione tramite spline

Come si comporta la spline cubica all'aumentare del numero dei nodi?

*Teorema (convergenza delle spline cubiche):* sia  $s_3(x)$  la spline cubica interpolante i dati  $(x_i, y_i)$  per  $i=0,1,\dots,n$  determinata con le condizioni per le spline naturali o quelle periodiche o, ancora, quelle vincolate. Sia  $h = \max_i h_i$ , con  $h_i = x_i - x_{i-1}$  la distanza fra due nodi consecutivi. Se  $f \in C^2[a,b]$  per  $h \rightarrow 0$  si ha:

$$\left\| s_3^{(p)} - f^{(p)} \right\|_{\infty} = o(h^{2-p})$$

con  $p=0,1,2$ . Ossia, per  $h \rightarrow 0$ , la spline cubica converge alla funzione che approssima e convergono anche le derivate prima e seconda della spline, rispettivamente alle derivate prima e seconda della funzione.

Inoltre se  $f \in C^k[a,b]$  con  $k=3,4$  e  $\frac{h}{h_i} \leq \text{costante}$  si ha, per  $h \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \left\| s_3^{(p)} - f^{(p)} \right\|_{\infty} &= o(h^{3-p}) \text{ per } k=3; \\ \left\| s_3^{(p)} - f^{(p)} \right\|_{\infty} &= O(h^{4-p}) \text{ per } k=4. \end{aligned}$$

Quindi si ha convergenza per la derivata terza come sopra, mentre per quanto riguarda la derivata quarta della spline è possibile solamente affermare che tende alla derivata quarta della funzione da approssimare come  $h^4$  tende a zero.

Le proprietà delle spline cubiche sono riassunte dal seguente

*Teorema:* tra tutte le funzioni  $f \in C^2[a,b]$  che assumono valori  $y_i$  nei nodi  $x_i$  le spline cubiche sono le sole funzioni che minimizzano l'integrale

$$E(f) = \int_{x_0}^{x_n} [f''(x)]^2 dx.$$

In particolare le spline naturali godono di una proprietà di minimo assoluto.

Definiamo curvatura di  $f$  in  $x$  la quantità  $\frac{f''(x)}{(1+f'(x)^2)^{3/2}}$ . Essa è il reciproco del

raggio di curvatura della funzioni in  $x$ . Se  $|f'(x)|$  è sufficientemente piccolo allora  $E(f)$  è una approssimazione buona della curvatura globale di  $f$  in  $[a,b]$ . Quindi le spline sono le funzioni che passano per i nodi nel modo più gradevole alla vista e con il minor numero di "curve" possibile.

Dal punto di vista fisico, le spline corrispondono alla condizione di minima energia (in particolar modo le spline cubiche naturali).

## Metodo dei minimi quadrati

Quali sono i limiti dell'interpolazione? L'interpolazione polinomiale globale non è adatta a  $n$  grandi. L'interpolazione in generale non è adatta per dati sperimentali, che sono generalmente in grande quantità e sono affetti da errore.

Il metodo dei minimi quadrati consiste nel fissare un modello a priori dei dati in uno spazio di dimensione  $m$ , tipicamente molto minore di  $n$  (numero dei dati). Determiniamo delle funzioni  $\phi_i(x)$  con  $i=1,2,\dots,n$  linearmente indipendenti in modo tale da poter scrivere l'approssimante come combinazione lineare delle  $\phi_i(x)$

$$f_m(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \dots + c_m\phi_m(x).$$

Ad esempio:

- $f_2(x) = c_1 + c_2x$  se cerchiamo una retta;
- $f_3(x) = c_1 + c_2x + c_3x^2$  se cerchiamo una parabola;
- $f_2(x) = c_1 + c_2 \exp(x)$ ;
- $f_4(x) = c_1 + c_2x + c_3 \cos(x) + c_4 \sin(x)$ ;
- ...

Per conoscere la funzione approssimante è necessario determinare i coefficienti  $c_k$ .

Non chiediamo che valga  $y_i = f_m(x_i)$  perché non stiamo cercando un'interpolante. Quello che chiediamo è che sia minima la somma dei quadrati degli scarti:

$$\min_{c \in \mathfrak{R}^m} \sum_{i=1}^n (f_m(x_i) - y_i)^2 = \min_{c \in \mathfrak{R}^m} \sum_{i=1}^n \left( \sum_{k=1}^m c_k \phi_k(x_i) - y_i \right)^2.$$

In sostanza cerchiamo il vettore che minimizza la somma dei quadrati degli scarti. Si dice che  $f_m(x)$  è la migliore approssimazione nel senso dei minimi quadrati.

Possiamo esprimere le stesse cose anche in notazione matriciale:

$$A = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \dots & \phi_m(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \dots & \phi_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_1(x_m) & \phi_2(x_m) & \dots & \phi_m(x_m) \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^{n \times m}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^n, \quad c = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} \in \mathfrak{R}^m.$$

In questo modo si può dire che

$$\min_{c \in \mathfrak{R}^m} \sum_{i=1}^n \left( \sum_{k=1}^m c_k \phi_k(x) - y_i \right)^2 = \min_{c \in \mathfrak{R}^m} \|Ac - y\|_2^2.$$

Non è possibile risolvere il sistema  $Ac = y$  perché è sovradeterminato: ha  $n$  equazioni in  $m$  incognite, con  $m \ll n$ . Il termine  $\|Ac - y\|_2^2$  è un funzionale quadratico convesso. Allora

$$\nabla \|Ac - y\|_2^2 = A^T Ac - A^T y = 0$$

e il sistema lineare  $A^T Ac = A^T y$  si chiama sistema delle equazioni normali.

In generale la matrice  $A^T A$  è simmetrica semidefinita positiva. Se tuttavia le  $\phi_k(x)$  sono linearmente indipendenti e i nodi sono tutti distinti allora  $A^T A$  risulta simmetrica definita positiva. Quindi diventa possibile risolvere il sistema delle equazioni normali applicando un metodo iterativo (Gauss-Seidel) oppure la fattorizzazione di Cholesky (in caso di  $A^T A$  non sparsa e di piccole dimensioni).

*Esempio:*

Dati:  $(-1,2)$ ,  $(1,3)$ ,  $(3,-5)$ ,  $(2,7)$ . Scriviamo la matrice  $A$  e il vettore dei termini noti:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ -5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

calcoliamo ora la matrice  $A^T A$  e il vettore dei termini noti del sistema di equazioni normali:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 15 \\ 5 & 15 & 35 \\ 15 & 35 & 99 \end{pmatrix}, \quad A^T y = \begin{pmatrix} 7 \\ 0 \\ -12 \end{pmatrix}$$

è ora possibile risolvere il sistema lineare  $A^T Ac = A^T y$ .

$$\text{La soluzione è } c = \begin{pmatrix} 11/2 \\ 9/4 \\ -7/4 \end{pmatrix}.$$

Talvolta la matrice  $A^T A$  può essere difficile da calcolare e certamente costoso dal punto di vista computazionale. Inoltre tende a diventare molto mal condizionata. Un metodo alternativo per ottenere i coefficienti della funzione approssimante è la fattorizzazione QR.

In generale con  $n+1$  dati il polinomio, di grado  $n$ ,  $p_n(x)$  costruito con il metodo dei minimi quadrati coincide con il polinomio, di grado  $n$ ,  $p_n(x)$  costruito con l'interpolazione.

Il metodo dei minimi quadrati è utilizzabile anche per affrontare i problemi non lineari. Prendiamo un modello per i dati che sia certamente non lineare, ad esempio  $y = a_1 \exp(a_2 x)$ . Cerchiamone il logaritmo:

$$\log y = \log(a_1 \exp(a_2 x)) = \log a_1 + \log e^{a_2 x} = \log a_1 + a_2 x .$$

Se chiamiamo  $z = \log y$ ,  $c_1 = \log a_1$  e  $c_2 = a_2$  otteniamo una funzione lineare:

$$z = c_1 + c_2 x$$

che possiamo trattare con le regole viste in precedenza.