Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT
Aula 14 - Ajustamento de dados discretos e aproximação de funções

Ana Leonor Silvestre

Instituto Superior Técnico, $1^{\underline{o}}$ *Semestre, 2020/2021*

Sumário da Aula 14

Cap. 4 - Ajustamento de dados discretos e aproximação de funções

Base de Newton. Fórmula interpoladora de Newton com diferenças divididas.

Relação entre diferenças divididas e derivadas.

Aproximação de funções através de interpolação polinomial. Erro de interpolação.

Base de Newton para $\mathcal{P}_n$

Seja

$$w_0(x) := 1$$

e, para cada $i \in \{1, ..., n\}$, seja

$$w_i(x) := \prod_{j=0}^{i-1}(x - x_j),$$

onde $x_0, ..., x_n$ são os nós de interpolação.
Introduzimos uma nova base para $\mathcal{P}_n$

$$\mathcal{B}_N = \{w_0, ..., w_n\},$$

à qual se chama *base de Newton*.

Base de Newton para $\mathcal{P}_n$

$$
\begin{gathered}
w_0(x) := 1 \\
w_1(x) := x - x_0, \\
w_2(x) := (x - x_0)(x - x_1), \\
w_3(x) := (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2), \\
\ldots \\
w_N(x) := (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{n-1}).
\end{gathered}
$$

Exemplo de uma base de Newton para $\mathcal{P}_4$

k	0	1	2	3
x_k	-1	1	3	4

$$w_0(x) := 1$$

$$w_1(x) := x + 1,$$

$$w_2(x) := (x + 1)(x - 1),$$

$$w_3(x) := (x + 1)(x - 1)(x - 3),$$

$$w_4(x) := (x + 1)(x - 1)(x - 3)(x - 4).$$

Fórmula de Newton com diferenças divididas

Pretende-se determinar o polinómio interpolador na forma

$$p_n(x) = c_0 + c_1 w_1(x) + \dots + c_n w_n(x).$$

Impondo as condições de interpolação:

$$c_0 = y_0$$

$$c_0 + c_1(x_1 - x_0) = y_1$$

$$c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2$$

$$\dots$$

$$c_0 + c_1(x_n - x_0) + \dots + c_n(x_n - x_0)\dots(x_n - x_{n-1}) = y_n$$

resulta num sistema linear de matriz triangular inferior cujo determinante é $\prod_{0 \le i < j \le n}(x_j - x_i)$.

Fórmula de Newton com diferenças divididas

$$p_n(x) = c_0 + c_1 w_1(x) + ... + c_{n-1} w_{n-1}(x) + c_n w_n(x).$$

- A base de Newton permite construir o polinómio p_n interpolador nos nós $x_0, ..., x_n$, por recorrência, já que

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + c_n w_n(x).$$

  onde p_{n-1} é o polinómio interpolador nos nós $x_0, ..., x_{n-1}$.
- A fórmula de Newton é mais conveniente para valores de n grandes e tem a vantagem de ser recursiva.
- Se um novo nó de interpolação fôr introduzido, então, para obter o novo polinómio interpolador, apenas será necessário adicionar um termo ao polinómio interpolador nos nós anteriores já calculado.

Cálculo recursivo dos coeficientes $c_0, \dots, c_n$

Das condições de interpolação

$$c_0 = y_0$$

$$c_0 + c_1(x_1 - x_0) = y_1$$

$$c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2$$

$$\dots$$

$$c_0 + c_1(x_n - x_0) + \dots + c_n(x_n - x_0)\dots(x_n - x_{n-1}) = y_n$$

obtemos

$$c_0 = y_0$$

$$c_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

$$c_2 = \dots = \frac{\dfrac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \dfrac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}$$

$$\vdots$$

Cálculo recursivo dos coeficientes $c_0, \ldots, c_n$

$$c_1 = y[x_0, x_1] = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0},$$

$$y[x_1, x_2] = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}, \; y[x_2, x_3] = \frac{y_3 - y_2}{x_3 - x_2}, \ldots$$

$$c_2 = y[x_0, x_1, x_2] = \frac{y[x_1, x_2] - y[x_0, x_1]}{x_2 - x_0},$$

$$y[x_1, x_2, x_3] = \frac{y[x_2, x_3] - y[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}, \; \ldots$$

$$c_3 = y[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{y[x_1, x_2, x_3] - y[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0},$$

$$y[x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{y[x_2, x_3, x_4] - y[x_1, x_2, x_3]}{x_4 - x_1}, \; \ldots$$

$$\ldots$$

$$c_n = y[x_0, \ldots, x_n] = \frac{y[x_1, \ldots, x_n] - y[x_0, \ldots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

Diferenças divididas

Definição

Dados $n+1$ pontos distintos $x_0, ..., x_n \in [a,b]$ e $n+1$ valores $y_0, ..., y_n \in \mathbb{R}$, as diferenças divididas $y[x_i, ..., x_{i+k}]$ de ordem k no ponto x_i são definidas recursivamente por

$$\begin{cases} \text{para } k = 0 \text{ e } i = 0, ..., n: \\ \qquad y[x_i] = y_i, \\ \text{para } k = 1, ..., n \text{ e } i = 0, ..., n-k: \\ \quad y[x_i, ..., x_{i+k}] = \dfrac{y[x_{i+1}, ..., x_{i+k}] - y[x_i, ..., x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}. \end{cases}$$

Cálculo das diferenças divididas

$$
\begin{tikzcd}
x_0 & y[x_0] \arrow[dr] & & & \\
& & y[x_0, x_1] \arrow[dr] & & \\
x_1 & y[x_1] \arrow[ur] \arrow[dr] & & y[x_0, x_1, x_2] \arrow[dr] & \\
& & y[x_1, x_2] \arrow[ur] \arrow[dr] & & y[x_0, x_1, x_2, x_3] \\
x_2 & y[x_2] \arrow[ur] \arrow[dr] & & y[x_1, x_2, x_3] \arrow[ur] & \\
& & y[x_2, x_3] \arrow[ur] & & \\
x_3 & y[x_3] \arrow[ur] & & &
\end{tikzcd}
$$

Representação de Newton do polinómio interpolador

Estando calculadas as diferenças divididas, o polinómio polinómio interpolador é dado por

$$p_n(x) = y_0 + \sum_{i=1}^{n} y[x_0, ..., x_i] \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j).$$

Nota: sendo $E = \{0, 1, ..., n\}$ e $\{\sigma(0), ..., \sigma(n)\}$ uma permutação de E, tem-se $f[x_{\sigma(0)}, ..., x_{\sigma(n)}] = f[x_0, ..., x_n]$.
Isto significa, por exemplo,

$$f[x_0, x_1] = f[x_1, x_0]$$

ou

$$f[x_0, x_1, x_2] = f[x_1, x_0, x_2] = f[x_2, x_0, x_1].$$

O que se pretende realçar é que as diferenças divididas não dependem da ordem em que estão listados os nós que as definem.

Exemplo

Retomemos o exemplo anterior, agora para calcular o polinómio interpolador relativo à tabela

x_k	-1	1	3	4	6
y_k	1	-1	10	2	1

através da fórmula de Newton.

A tabela de diferenças divididas fica

$$
\begin{array}{cccccc}
-1 & 1 & & & & \\
 & & \frac{(-1-1)}{1-(-1)} = -1 & & & \\
1 & -1 & & \frac{11/2-(-1)}{3-(-1)} = \frac{13}{8} & & \\
 & & \frac{10-(-1)}{3-1} = \frac{11}{2} & & \frac{-9/2-13/8}{4-(-1)} = -\frac{49}{40} & \\
3 & 10 & & \frac{-8-11/2}{4-1} = -\frac{9}{2} & & \frac{7/5-(-49/40)}{6-(-1)} = \frac{3}{8} \\
 & & \frac{2-10}{4-3} = -8 & & \frac{5/2-(-9/2)}{6-1} = \frac{7}{5} & \\
4 & 2 & & \frac{-1/2-(-8)}{6-3} = \frac{5}{2} & & \\
 & & \frac{1-2}{6-4} = -\frac{1}{2} & & & \\
6 & 1 & & & &
\end{array}
$$

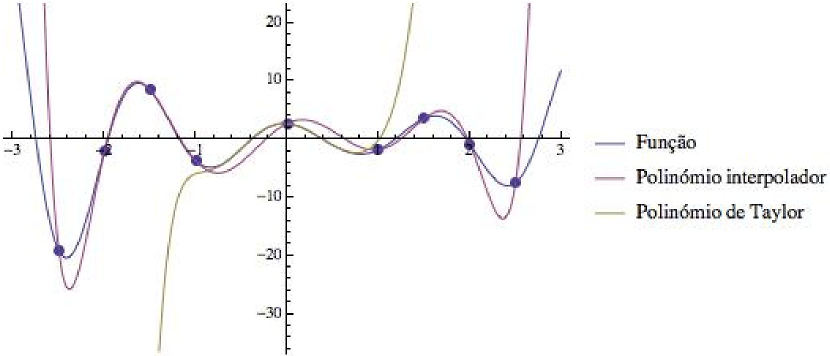
Exemplo

Então o polinómio interpolador é dado por (representação na base de Newton):

$$
\begin{aligned}
p_4(x) &= y_0 + \sum_{k=1}^{4} y[x_0, ..., x_k] \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i) = \\
&= 1 - (x+1) + \frac{13}{8}(x+1)(x-1) \\
&\quad -\frac{49}{40}(x+1)(x-1)(x-3) \\
&\quad +\frac{3}{8}(x+1)(x-1)(x-3)(x-4).
\end{aligned}
$$

Aproximação de funções através de interpolação polinomial

Aproximação polinomial da função $f(x) := \exp(\sqrt{x^2 - x + 1})\cos(4x)$



Análise do erro na interpolação polinomial

Ao aproximar uma função pelo seu polinómio de Taylor

$$T_N(x) = \sum_{k=0}^{N} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k$$

$$= f(x_0) + f^{'}(x_0)(x - x_0) + \ldots + \frac{f^{(N)}(x_0)}{N!}(x - x_0)^N$$

o erro de interpolação é dado pelo resto de Lagrange:

$$f(x) - T_N(x) = \frac{f^{(N+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)^{N+1}.$$

Como se exprime o erro de aproximação de uma função f quando se faz interpolação usando apenas os valores de f em vários nós x_0, x_1, ..., x_n?

Primeira fórmula de erro de interpolação

Polinómio interpolador de f nos nós $x_0, ..., x_n \in [a, b]$:

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

ou

$$p_n(x) = f(x_0) + \sum_{i=1}^{n} f[x_0, ..., x_i] \prod_{j=0}^{i-1}(x - x_j)$$

Teorema

Sejam $x_0, ..., x_n \in [a, b]$ $n + 1$ nós de interpolação distintos entre si e seja $f \in C([a, b])$. O erro de interpolação pelo polinómio p_n de grau não superior a n é dado por

$$f(x) - p_n(x) = f[x_0, ..., x_n, x] \prod_{i=0}^{n}(x - x_i).$$

Demonstração:

Seja $p_n \in \mathcal{P}_n$ o polinómio interpolador de f nos nós $x_0, ..., x_n$. É claro que a função erro de interpolação $e_n = f - p_n$ satisfaz

$$e_n(x_i) = 0, \ \forall i \in \{1, ..., n\}.$$

Seja agora $x \in [a, b]$ um ponto distinto dos nós de interpolação. Se x for encarado como novo nó, o polinómio $p_{n+1} \in \mathcal{P}_{n+1}$ interpolador de f em $x_0, ..., x_n, x$ é dado, na forma de Newton, por

$$p_{n+1}(t) = p_n(t) + f[x_0, ..., x_n, x] \prod_{i=0}^{n} (t - x_i).$$

Como $p_{n+1}(x) = f(x)$, tem-se

$$f(x) = p_n(x) + f[x_0, ..., x_n, x] \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Relação entre as diferenças divididas e as derivadas

Pelo Teorema de Lagrange, dados x_0 e x_1 distintos, existe ξ entre estes dois pontos tal que

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f'(\xi)$$

desde que f seja de classe C^1 no intervalo definido por x_0 e x_1.

Em geral, tem-se

Teorema

Se $f \in C^n([a, b])$ e $x_0, ..., x_n \in [a, b]$ são distintos entre si, então existe $\xi \in]\min\{x_0, ..., x_n\}, \max\{x_0, ..., x_n\}[$ tal que

$$f[x_0, ..., x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}.$$

Demonstração

Seja $p_n \in \mathcal{P}_n$ o polinómio interpolador de f em $x_0, ..., x_n$ e

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

Seja $I :=]\min\{x_0, ..., x_n\}, \max\{x_0, ..., x_n\}[$.
Então a função e_n tem pelo menos $n+1$ zeros no intervalo I, a primeira derivada e_n' tem pelo menos n zeros em I, e sucessivamente, a derivada $e_n^{(n)}$ tem, pelo menos, um zero:

$$\exists \xi \in I : \ e_n^{(n)}(\xi) = 0,$$

ou seja,

$$\exists \xi \in I : \ p_n^{(n)}(\xi) = f^{(n)}(\xi).$$

Agora basta notar que que $p_n^{(n)}$ é constante e tem o valor

$$p_n^{(n)} = n! f[x_0, ..., x_n].$$

Erro de interpolação

Teorema

Seja $f \in C^{n+1}[a,b]$. Dados $n+1$ nós distintos $x_0, ..., x_n \in [a,b]$, seja $p_n \in \mathcal{P}_n$ o único polinómio que verifica $p_n(x_j) = f(x_j)$, $j = 0, ..., n$. Então, para cada $x \in [a,b]$, existe

$$\xi(x) \in]\min\{x_0, ..., x_n, x\}, \max\{x_0, ..., x_n, x\}[$$

tal que

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Corolário

Nas condições do Teorema, seja

$$M_{n+1} := \max_{t \in [a,b]} |f^{(n+1)}(t)|.$$

Então

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} |x - x_i|, \qquad (x \in [a,b]).$$