Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT
Aula 13 - Ajustamento de dados discretos e aproximação de funções

Ana Leonor Silvestre

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

Sumário da Aula 13

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

Interpolação polinomial de Lagrange

Representação do polinómio interpolador na base canónica. Sistema com matriz de Vandermonde

Base de Lagrange. Fórmula interpoladora de Lagrange

Exemplo - Ajustamento de dados discretos

Os dados representados na tabela

Dia	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20
Quant. $\times 10^{-6}$	67.38	70.93	74.67	78.60	82.74	87.10	91.69	92.51	101.60	106.95	112.58

referem-se ao crescimento de uma bactéria num meio de cultura líquido ao longo de vários dias.

Problema: Obter previsões da quantidade de bactérias ao fim de 15 e 30 dias.

Resolução do problema: Construir uma função contínua que "se ajuste" aos dados disponíveis. Usar essa função para prever valores que não podem ser obtidos/medidos experimentalmente.

Ajustamento de dados discretos - recursos computacionais

No Mathematica a função `Fit` permite fazer o **ajustamento de dados discretos através de interpolação e melhor aproximação mínimos quadrados**.

$$In: \text{dados} = \{\{0, 67.38\}, \{2, 70.93\}, \{4, 74.67\}, \{6, 78.60\}, \{8, 82.74\}, \{10, 87.10\}, \{12, 91.69\}, \{14, 92.51\}, \{16, 101.60\}, \{18, 106.95\}, \{20, 112.58\}\}$$

$$In: \text{reta} = \text{Fit}[\text{dados}, \{1, x\}, x]$$

$$Out: \quad 65.7209 + 2.21655x$$

$$In: \text{polint} = \text{Fit}[\text{dados}, \{1, x, x^2, x^3, x^4, x^5, x^6, x^7, x^8, x^9, x^{10}\}, x]$$

$$Out: \quad 67.38 - 32.6639x + 47.9288x^2 - 26.7905x^3 + 8.04624x^4 - 1.44855x^5 + 0.163585x^6 - 0.0116686x^7 + 0.000509742x^8 - 0.0000124324x^9 + 1.29501 \times 10^{-7}x^{10}$$

Ajustamento de dados discretos - recursos computacionais

O Mathematica dispõe ainda da função `InterpolatingPolynomial`. Neste caso, poderíamos ter feito:

$$In: \text{polint} = \text{InterpolatingPolynomial}[\text{dados}, x]$$

que teria produzido

$$Out: 112.58 + (-20+x)(2.26 + (0.0288 + (0.000242708$$
$$+(7.8125 * 10^-7 + (-3.28621 * 10^-7 + (2.17014 * 10^-8$$
$$+(-9.81729 * 10^-9 + (2.07162 * 10^-6 + (2.58694 * 10^-7$$
$$+1.29501 * 10^-7(-6+x))(-14+x))(-8+x))(-18$$
$$+x))(-2+x))(-16+x))(-4+x))(-10+x))x)$$

Ajustamento de dados discretos - recursos computacionais

Para obter o polinómio na forma canónica

In: Expand[polint]

daria

$$Out: 67.38 - 32.6639x + 47.9288x^2 - 26.7905x^3 + 8.04624x^4$$

$$-1.44855x^5 + 0.163585x^6 - 0.0116686x^7 + 0.000509742x^8$$

$$-0.0000124324x^9 + 1.29501 * 10^{-7}x^10$$

Exemplo - Comparação entre interpolação polinomial e regressão linear

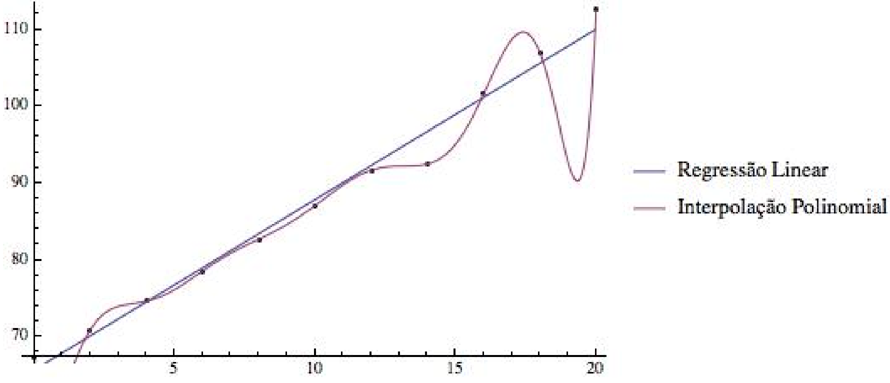

Figura: Funções de ajustamento

A função `InterpolatingPolynomial` do Mathematica:

em que consiste a Interpolação Polinomial?

Algumas propriedades básicas dos polinómios algébricos

Definição

Para $n \in \mathbb{N}_0$, designamos por $\mathcal{P}_n$ o espaço linear formado por todos os polinómios

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

na variável real x e com coeficientes $a_0, ..., a_n$ reais. Um polinómio $p \in \mathcal{P}_n$ diz-se de grau n se $a_n \neq 0$.

O conjunto dos monómios

$$\mathcal{B}_C = \{1, x, ..., x^n\}$$

é a base canónica de $\mathcal{P}_n$.

Teorema

Se $p \in \mathcal{P}_n$ e tem mais do que n zeros (complexos e contados repetidamente de acordo com a sua multiplicidade) então $p \equiv 0$.

Interpolação polinomial de Lagrange

Sejam

- $x_0, x_1, ..., x_n \in [a, b]$ nós de interpolação,
- $y_0, y_1, ..., y_n \in \mathbb{R}$ correspondentes valores nodais, os quais podem ser, por exemplo, os valores de uma função nas abcissas dadas.

A interpolação polinomial é o problema que consiste em determinar o polinómio p_n de grau não superior a n tal que

$$p_n(x_k) = y_k, \quad \forall k \in \{0, 1, ..., n\}.$$

Também se usa a designação *interpolação polinomial de Lagrange* para distinguir do caso em que se considera interpolação com condições adicionais para as derivadas de p em alguns nós, caso que é denominado por interpolação de Hermite.

Representação do polinómio interpolador na base canónica. Sistema com matriz de Vandermonde

As condições de interpolação

$$p_n(x_k) = y_k, \quad \forall k \in \{0, 1, ..., n\},$$

para

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + ... + a_n x^n$$

são equivalentes ao sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & ... & x_0^n \\ 1 & x_1 & ... & x_1^n \\ ... & ... & ... & ... \\ 1 & x_n & ... & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ ... \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ ... \\ y_n \end{bmatrix}$$

A matriz deste sistema chama-se matriz de Vandermonde.

Representação do polinómio interpolador na base canónica

Teorema

Dados $n+1$ nós de interpolação distintos $x_0, ..., x_n \in [a, b]$ e $n+1$ valores nodais $y_0, ..., y_n \in \mathbb{R}$, existe um e um só polinómio $p_n \in \mathcal{P}_n$ tal que

$$p_n(x_k) = y_k, \text{ para todo } k \in \{0, 1, ..., n\}.$$

Demonstração

Consideramos o sistema com a matriz de Vandermonde onde supomos que os nós $x_0, ..., x_n$ são distintos entre si.
Devemos mostrar que este sistema tem uma e uma só solução.
Basta ver que se

$$y_0 = y_1 = ... = y_n = 0$$

então

$$a_0 = a_1 = ... = a_n = 0.$$

Sejam então $y_0 = ... = y_n = 0$. Isto significa que

$$p_n(x_k) = 0, \text{ para todo } k \in \{0, 1, ..., n\},$$

ou seja, p_n tem $n+1$ zeros distintos.
Por um teorema anterior, tem-se $p_n \equiv 0$, ou seja $a_0 = ... = a_n = 0$ na representação na base canónica.

Exemplo

Consideremos os valores apresentados na tabela

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

calculemos o polinómio $p_4(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_4 x^4$ que interpola os valores $y_0, \dots, y_4$ nos nós $x_0, \dots, x_4$. O sistema linear a resolver é

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 & 27 & 81 \\ 1 & 4 & 16 & 64 & 256 \\ 1 & 6 & 36 & 216 & 1296 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 10 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

A solução é $(a_0, a_1, a_2, a_3) = (\frac{49}{5}, \frac{57}{20}, \frac{377}{40}, -\frac{77}{20}, \frac{3}{8})$, pelo que o polinómio interpolador é dado por

$$p_4(x) = -\frac{49}{5} + \frac{57}{20}x + \frac{377}{40}x^2 - \frac{77}{20}x^3 + \frac{3}{8}x^4.$$

Base de Lagrange. Fórmula interpoladora de Lagrange

A seguir, iremos deduzir algoritmos alternativos para o cálculo do polinómio interpolador.

O método baseado na matriz de Vandermonde constitui um algoritmo computacionalmente pouco eficiente. A resolução de um sistema com matriz densa tem um custo computacional elevado e o sistema pode apresentar problemas de condicionamento.

Vamos introduzir uma nova base para $\mathcal{P}_n$.

Base de Lagrange

Sejam $x_0, ..., x_n$ os nós de interpolação dados (distintos entre si) e, para cada $i \in \{0, ..., n\}$, seja

$$\ell_i(x) := \prod_{j=0,\, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Cada função ℓ_i é um polinómio de grau n, a que se chama *polinómio característico de Lagrange*, e satisfaz

$$\ell_i(x_k) = \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & k = i, \\ 0, & k \neq i. \end{cases}$$

Ao conjunto de polinómios $\mathcal{B}_L = \{\ell_0, \ell_1, ..., \ell_n\}$ chama-se base de Lagrange de $\mathcal{P}_n$.

Fórmula interpoladora de Lagrange

Considerando agora o polinómio interpolador que se pretende determinar representado na base de Lagrange

$$p_n(x) = b_0\ell_0(x) + ... + b_n\ell_n(x)$$

e impondo as condições de interpolação, obtém-se, para cada $k \in \{0, ..., n\}$:

$$p_n(x_k) = y_k \Leftrightarrow \sum_{i=0}^{n} b_i\ell_i(x_k) = y_k \Leftrightarrow \sum_{i=0}^{n} b_i\delta_{ik} = y_k \Leftrightarrow b_k = y_k.$$

Assim, na *representação de Lagrange*, o polinómio interpolador é dado por

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i\ell_i(x).$$

Exemplo

Consideremos novamente os valores apresentados na tabela

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

e calculemos agora o polinómio $p_4 \in \mathcal{P}_4$ que interpola os valores $y_0, ..., y_4$ nos nós $x_0, ..., x_4$ através da fórmula interpoladora de Lagrange.

Exemplo

Os polinómios de base de Lagrange são

$$
\begin{aligned}
\ell_0(x) &= \frac{(x-1)(x-3)(x-4)(x-6)}{(-1-1)(-1-3)(-1-4)(-1-6)} \\
&= \frac{1}{280}(x-1)(x-3)(x-4)(x-6), \\
\ell_1(x) &= \frac{(x+1)(x-3)(x-4)(x-6)}{(1+1)(1-3)(1-4)(1-6)} \\
&= -\frac{1}{60}(x+1)(x-3)(x-4)(x-6), \\
\ell_2(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-4)(x-6)}{(3+1)(3-1)(3-4)(3-6)} \\
&= \frac{1}{24}(x+1)(x-1)(x-4)(x-6),
\end{aligned}
$$

Exemplo

$$\begin{aligned}
\ell_3(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-3)(x-6)}{(4+1)(4-1)(4-3)(4-6)} \\
&= -\frac{1}{30}(x+1)(x-1)(x-3)(x-6), \\
\ell_4(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-3)(x-4)}{(6+1)(6-1)(6-3)(6-4)} \\
&= \frac{1}{210}(x+1)(x-1)(x-3)(x-4)
\end{aligned}$$

Exemplo

O polinómio p_4 é dado (na base de Lagrange) por

$$p_4(x) = \ell_0(x) - \ell_1(x) + 10\ell_2(x) + 2\ell_3(x) + \ell_4(x)$$

$$\begin{aligned} p_4(x) \quad = \quad & \frac{1}{280}(x-1)(x-3)(x-4)(x-6) \\ & + \frac{1}{60}(x+1)(x-3)(x-4)(x-6) + \\ & + \frac{5}{12}(x+1)(x-1)(x-4)(x-6) \\ & - \frac{1}{15}(x+1)(x-1)(x-3)(x-6) + \\ & + \frac{1}{210}(x+1)(x-1)(x-3)(x-4). \end{aligned}$$

Na forma canónica fica

$$p_4(x) = -\frac{49}{5} + \frac{57}{20}x + \frac{377}{40}x^2 - \frac{77}{20}x^3 + \frac{3}{8}x^4,$$

já obtida com a abordagem anterior, como seria de esperar.