Interpolação e extrapolação

Dado um conjunto de dados $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \cdots (X_N, Y_N)$, onde Y_i corresponde ao valor da grandeza Y em $X = X_i$ aproximações podem ser desenvolvidas para se obter estimativas de $Y(X)$, em valores de X que não constam do conjunto. Se $X_1 \leq X \leq X_N$ esta estimativa é denominada **interpolação**, caso contrário, chamamos de **extrapolação**. Usualmente, os mesmos algoritmos são usados nos dois casos.

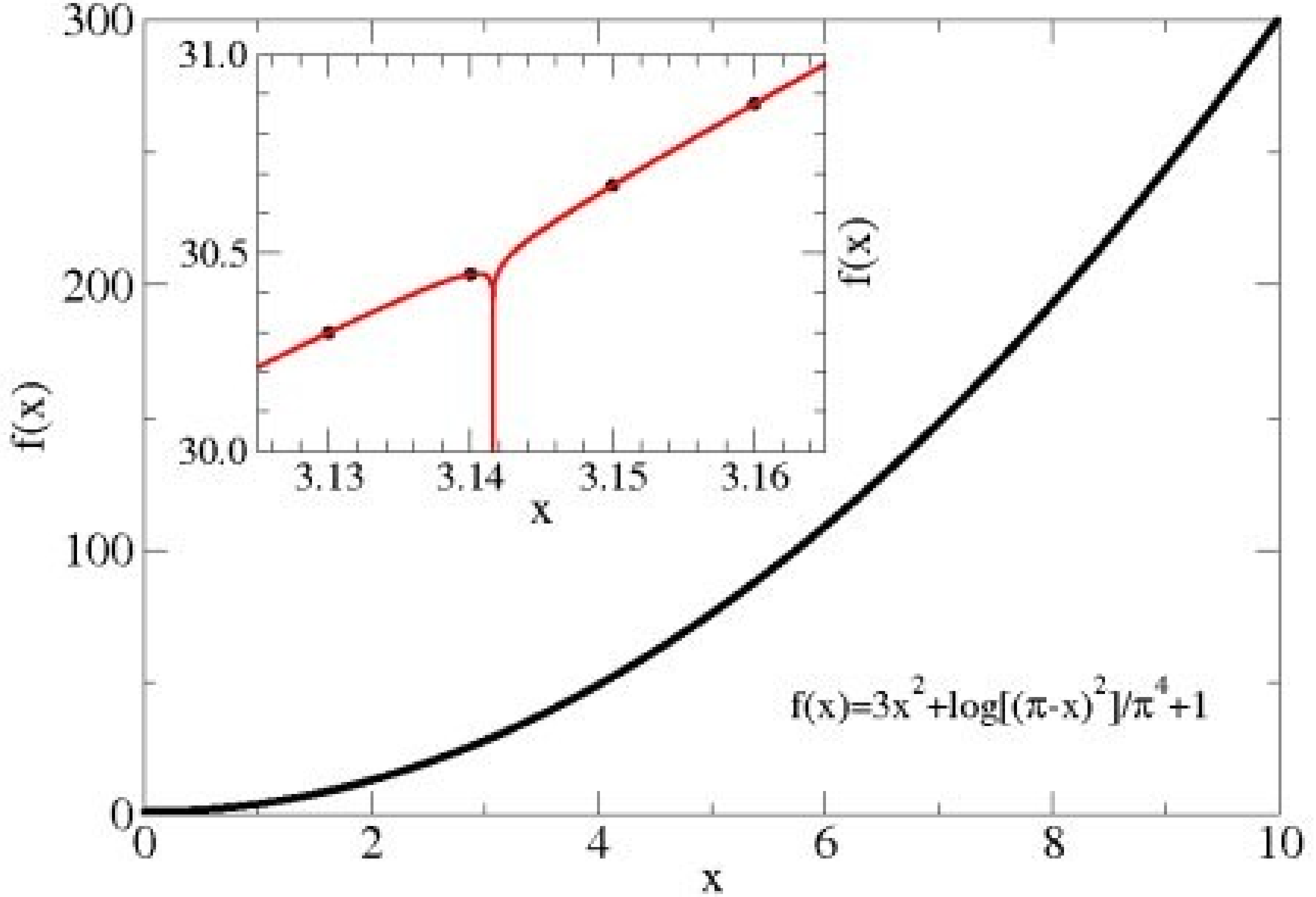
Em geral, extrapolações são mais perigosas, uma vez que deve-se presumir o comportamento da função em regiões onde não se conhece nada sobre ela. Supõe-se que o comportamento perto da fronteira da região conhecida se estende até o ponto de interesse, o que constitui um "ato de fé". Embora seja extremamente útil para se estimar valores da grandeza além da região conhecida, cabe ressaltar que atrasos significativos no desenvolvimento de grande parte da física moderna teriam ocorrido se tivéssemos nos limitado a extrapolações ao invés de se realizar medidas pois muitos comportamentos diferentes, provenientes de um física nova, foram observados. Apesar disto, extrapolações cuidadosas constituem uma poderosa ferramenta em várias áreas, como por exemplo, na resolução numérica de equações diferencias.

Embora a interpolação possa parecer inofensiva, dificuldades também podem ser encontradas. Um exemplo clássico, evocado no livro Numerical Recipes, é a função:

$$f(x) = 3x^2 + \frac{\log[(\pi - x)^2]}{\pi^4} + 1$$

A figura abaixo mostra valores de f(x) calculados a partir desta fórmula, usando valores de Xi igualmente espaçados em 0.01, no intervalo $0 \leq X \leq 10$. Note que, este nível de detalhe de conhecimento sobre a função é, em geral, muito satisfatório tanto em cálculos numéricos quanto em medidas experimentais. Contudo, embora a função pareça crescer monotonamente, o detalhe mostrado no interior da figura revela claramente que erros grosseiros serão cometidos por fórmulas de interpolação na região $x \approx \pi$. A curva em vermelho corresponde à fórmula acima, enquanto que os pontos representam os valores tabulados. Isto mostra que, como sempre, em se tratando de aproximações numéricas, todas as "receitas" devem sempre ser analisadas cuidadosamente em cada aplicação.

$$f(x) = 3x^2 + \frac{\log[(\pi - x)^2]}{\pi^4} + 1$$



Além dos aspectos sutis levantados acima, outra regra importante a ser observada em cálculos numéricos é que polinômios de grau elevado devem ser evitados. Embora seu uso permita a imposição de várias propriedades desejadas, como a imposição da continuidade das derivadas da função, por exemplo, um polinômio de grau n possui o mesmo número de raízes. Isto faz com que eles oscilem fortemente. Logo, isto pode levar a comportamentos indesejados em extrapolações.

No caso da interpolação, este efeito também ocorre. Ou seja, o uso de polinômios de grau elevado por causar problemas. Por construção, os valores da função são reproduzidos nos pontos X_i . No entanto, ainda assim podem ocorrer fortes oscilações entre 2 pontos adjacentes se a ordem do polinômio for muito elevada. Não há regras simples para se determinar, no caso geral, qual é o melhor grau a ser utilizado. Os teoremas matemáticos genéricos requerem tanta informação sobre a função que, na verdade, se as conhecêssemos, não precisaríamos fazer aproximações polinomiais.

Uma boa receita para se evitar dificuldades consiste em se utilizar o polinômio de ordem mais baixa possível que garanta as propriedades e precisão desejadas. No caso em que os dados em consideração são obtidos a partir de cálculos numéricos, maior precisão pode ser obtida aumentando-se o número de pontos do conjunto de dados, mantendo-se o grau do polinômio empregado. Em se tratando de dados experimentais, onde em geral pode não ser simples (até mesmo por razões de custo) se obter mais pontos intermediários, aumentar um pouco o grau do polinômio pode ser uma solução aceitável. Se ainda assim isto não for suficiente, cabe ressaltar que existem outros métodos vai além de aproximações polinomiais e que técnicas baseadas em razões entre polinômios diferentes ou envolvendo funções mais complexas podem ser utilizadas com segurança.

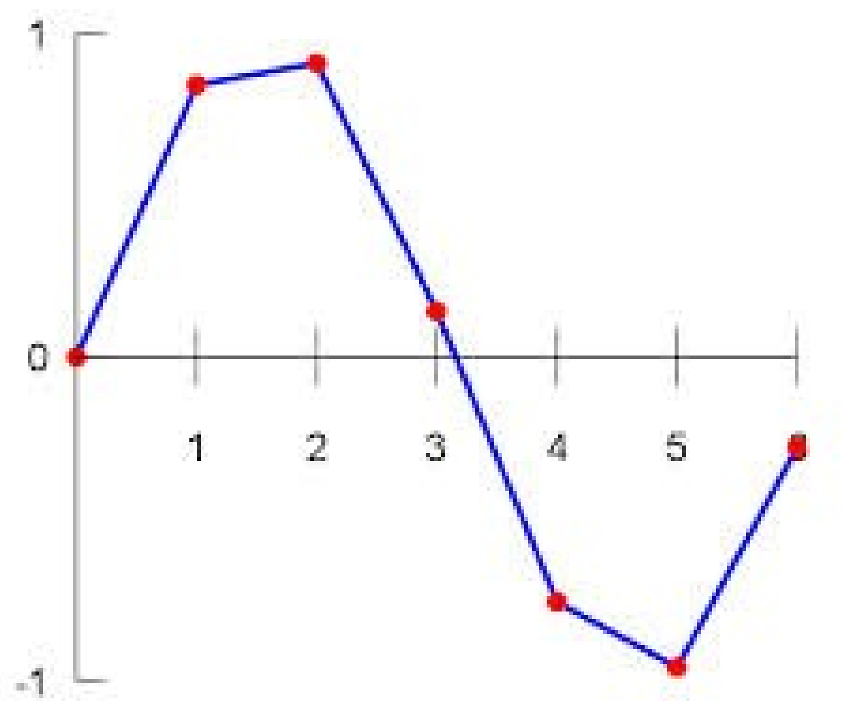
Este assunto é muito vasto para ser tratado nesta abordagem introdutória. Uma discussão mais completa pode ser encontrada, por exemplo, no livro Numerical Recipes. Em particular, boa parte da discussão a seguir, sobre a Fórmula de Lagrange e Spline cúbico, é fortemente baseada na apresentação deste livro.

Fórmula de Lagrange

Polinômios de Lagrange

Baseado no fato de que sobre N pontos $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \cdots, (X_N, Y_N)$ passa um único polinômio de grau N − 1, o Polinômio de Lagrange pode ser usado como fórmula de interpolação ou extrapolação:

$$P(x) = \sum_{i=1}^{N} Y_i L_i(x)$$



onde

$$L_i(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{x - X_j}{X_i - X_j} = \frac{x - X_1}{X_i - X_1} \cdots \frac{x - X_{i-1}}{X_i - X_{i-1}} \frac{x - X_{i+1}}{X_i - X_{i+1}} \cdots \frac{x - X_N}{X_i - X_N}$$

é um polinômio de grau $N-1$ em x. Tendo em vista que $L_i(X_j) = \delta_{i,j}$ onde o delta de Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

é fácil verificar que, de fato, $P(X_i) = Y_i$. Assim, $P(x)$ pode ser empregado para se estimar o valor de $Y(x)$ em pontos x não tabulados.

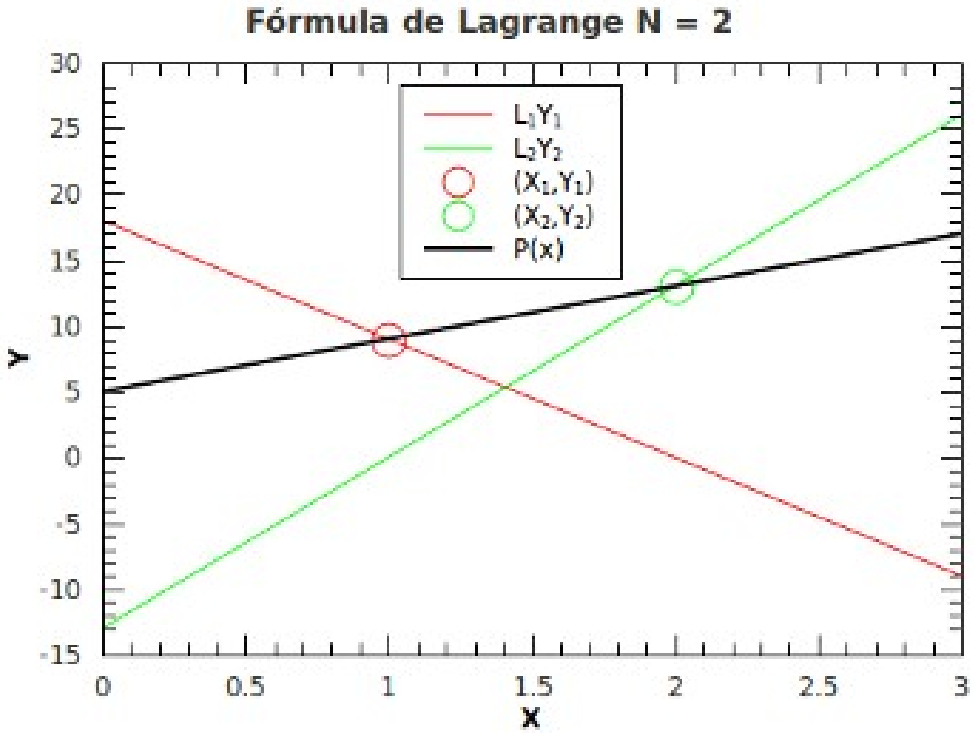
Exemplo 1

Para exemplificar a fórmula de Lagrange, consideramos primeiramente uma reta que passa pelos pontos $(X_1,Y_1) = (1,9)$ e $(X_2,Y_2) = (2,13)$, tendo assim N = 2. Aplicando a fórmula de Lagrange, temos

$$L_1 = \frac{x - X_2}{X_1 - X_2} = \frac{x-2}{1-2} = -(x-2)$$

e

$$L_2 = \frac{x - X_1}{X_2 - X_1} = \frac{x-1}{2-1} = (x-1),$$



Fórmula de Lagrange para N=2.

assim, o polinômio de Lagrange que passa pelos pontos desejados é dado por:

$$P(x) = \sum_{i=1}^{N} Y_i L_i(x) = Y_1 L_1 + Y_2 L_2 = 9(-x+2) + 13(x-1) = 4x+5.$$

Note que substituindo na equação acima, P(1) = 9 e P(2) = 13.

Exemplo 2

Verificando a fórmula de Lagrange para N = 3. Suponhamos que desejamos encontrar qual é o polinômio que passa pelos pontos $(X_1,Y_1) = (2,4)$, $(X_2,Y_2) = (3,9)$ e $(X_3,Y_3) = (6,36)$. Temos que:

$$L_1 = \left(\frac{x - X_2}{X_1 - X_2}\right)\left(\frac{x - X_3}{X_1 - X_3}\right) = \left(\frac{x-3}{2-3}\right)\left(\frac{x-6}{2-6}\right) = \frac{x^2 - 9x + 18}{4},$$

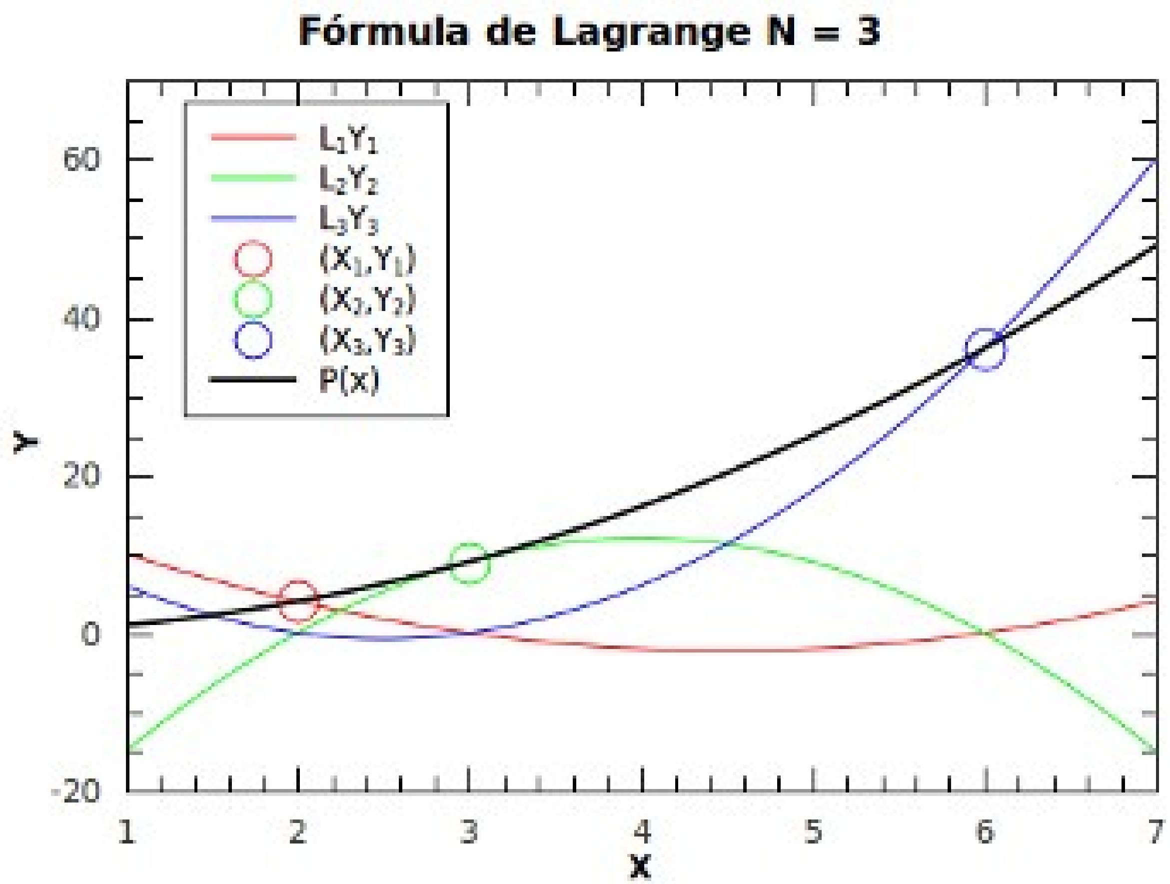
$$L_2 = \left(\frac{x - X_1}{X_2 - X_1}\right)\left(\frac{x - X_3}{X_2 - X_3}\right) = \left(\frac{x-2}{3-2}\right)\left(\frac{x-6}{3-6}\right) = -\frac{x^2 - 8x + 12}{3}$$

e

$$L_3 = \left(\frac{x - X_1}{X_3 - X_1}\right)\left(\frac{x - X_2}{X_3 - X_2}\right) = \left(\frac{x-2}{6-2}\right)\left(\frac{x-3}{6-3}\right) = \frac{x^2 - 5x + 6}{12},$$

assim

$$P(x) = \sum_{i=1}^{N} Y_i L_i(x) = Y_1 L_1 + Y_2 L_2 + Y_3 L_3 = 4\frac{x^2 - 9x + 18}{4} - 9\frac{x^2 - 8x + 12}{3} + 36\frac{x^2 - 5x + 6}{12} = x^2$$



Fórmula de Lagrange para N=3.

Exemplo 3

Para ilustrar graficamente o método da fórmula de Lagrange, usaremos um exemplo com N = 4. Considerando os quatro pontos $(X_1,Y_1) = (-1,5)$, $(X_2,Y_2) = (1,2)$, $(X_3,Y_3) = (-3,5)$ e $(X_4,Y_4) = (7,4)$, as equações L_i ficam

$$L_1 = -\frac{1}{64}(x^3 - 11x^2 + 31x - 21),$$

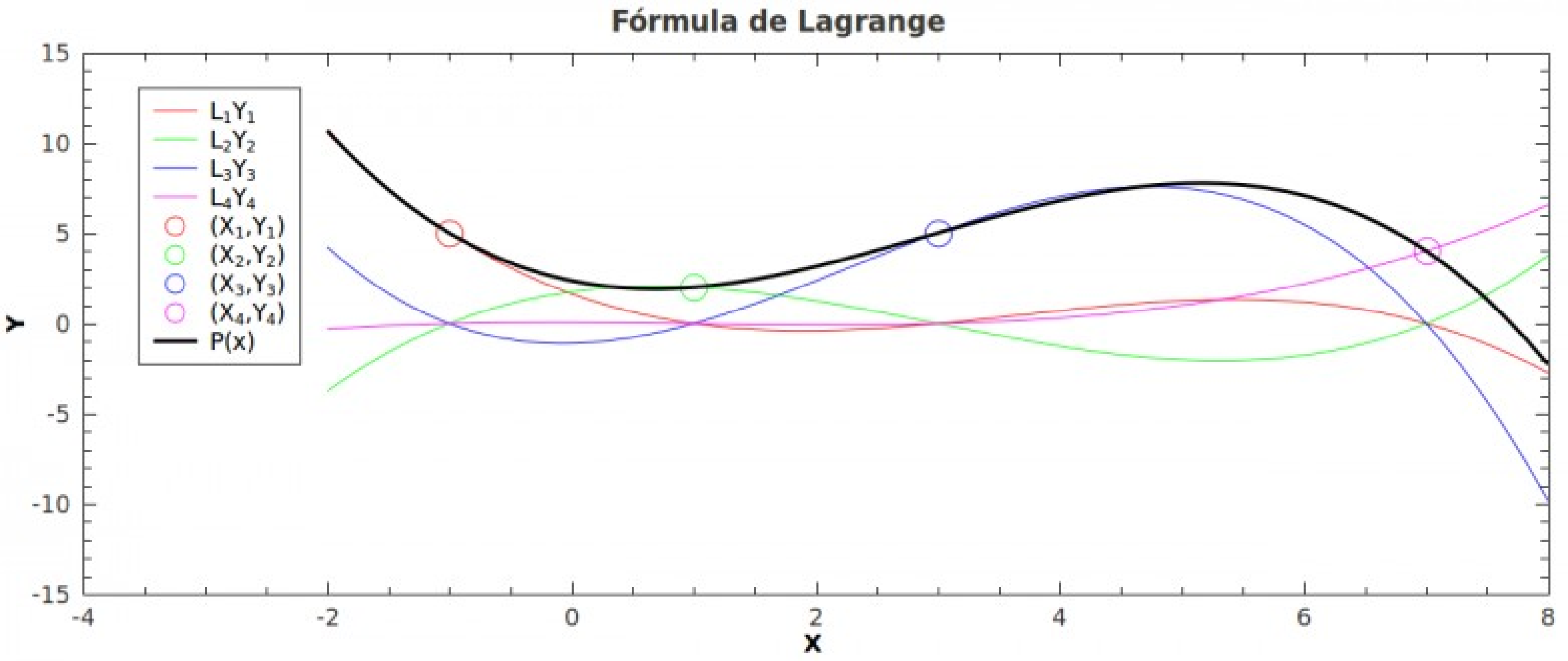
$$L_2 = \frac{1}{24}(x^3 - 9x^2 + 11x + 21),$$

$$L_3 = -\frac{1}{32}(x^3 - 7x^2 - x + 7)$$

e

$$L_4 = \frac{1}{192}(x^3 - 3x^2 - x + 3).$$

O gráfico abaixo mostra os quatro pontos (X_i,Y_i), as curvas L_iY_i e a curva final P(x). Lembre-se que P(x) é a curva gerada pela soma dos polinômios L_iY_i. Note que a curva L_1Y_1 passa pelo ponto (X_1,Y_1), assim como as demais e a curva P(x) passa por todos os pontos.



Numericamente

Na prática, a implementação numérica do polinômio de Lagrange é complicada. Computacionalmente não é possível fazer um programa geral para interpolação de ordem arbitrária, isto é fazer um programa que, com os N pontos de entrada X_i,Y_i, devolva um polinômio P(x) interpolador de grau N. Isto envolve computação simbólica (do tipo utilizada em programas proprietários como o Mathematica, Maple, ou livres como Maxima). Por outro lado a implementação numérica do método na força bruta envolve um duplo laço de ordem N: devem ser somados N termos (os $L_i(x)$) onde cada um deles é construído como um produto de N-1 termos; ao todo N^2 cálculos para cada ponto x (isto fica como exercício a partir da fórmula geral do P(x)).

O Algoritmo de Neville [1], Implementação do algoritmo de Neville, é muito útil na realização desta tarefa. Ao final, veremos que o polinômio interpolador de grau n pode ser reconstruído com polinômios de grau n-1. Este processo gera uma fórmula de recorrência, que é um recurso bastante comum em algoritmos computacionais.