Métodos Numéricos I

Tema 4. Ajuste de Curvas.
Interpolação Polinomial.

Prof. Dany S. Dominguez
dsdominguez@uesc.br
Sala 1 – NBCGIB
(73) 3680 5212 – ramal 30

ROTEIRO

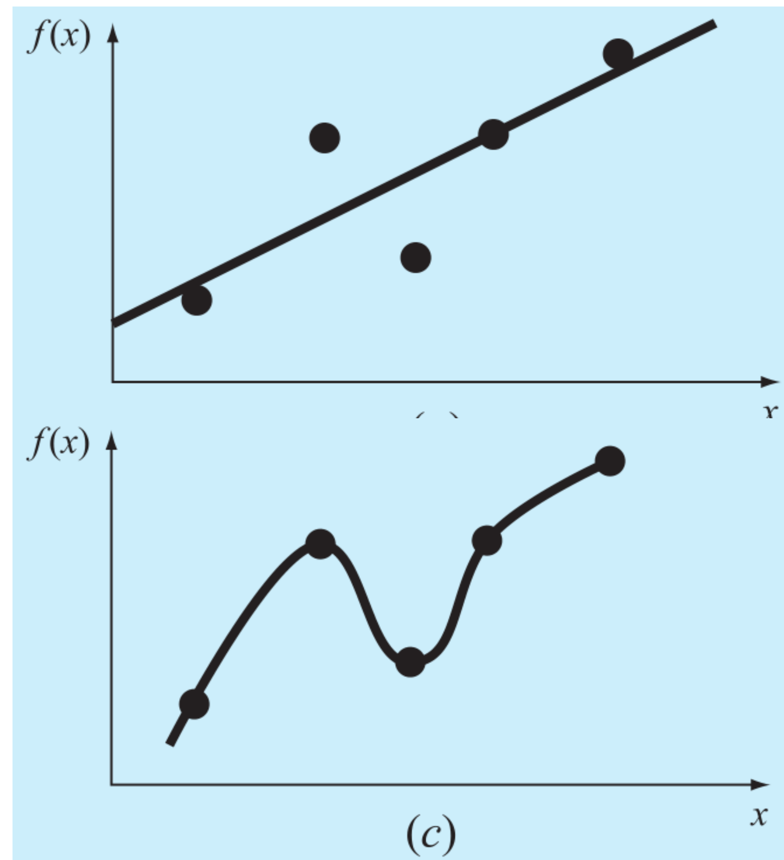
- Introdução
- Polinômio de Taylor
- Polinômios de Lagrange
- Splines
- Comentários finais

Introdução

- Ajuste de curvas (curve fitting)

Conjunto de Dados Discretos → Função Analítica

- Dados com muito ruído (incertezas):
  - mínimos quadrados
- Dados precisos:
  - Interpolação polinomial
  - Encontrar uma função (ou várias funções) que satisfaçam cada um dos pontos



Introdução

- Uma das classes de funções mais conhecidas e úteis entre as que mapeiam o conjunto dos números reais em si mesmos é a classe dos *polinômios algébricos*,
- Os polinômios algébricos tem a forma:

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

onde a ordem do polinômio n é uma constante inteira não negativa e $a_0,\ldots,a_n$ são constantes reais.

- Os polinômios algébricos aproximam de maneira uniforme funções contínuas.

Introdução

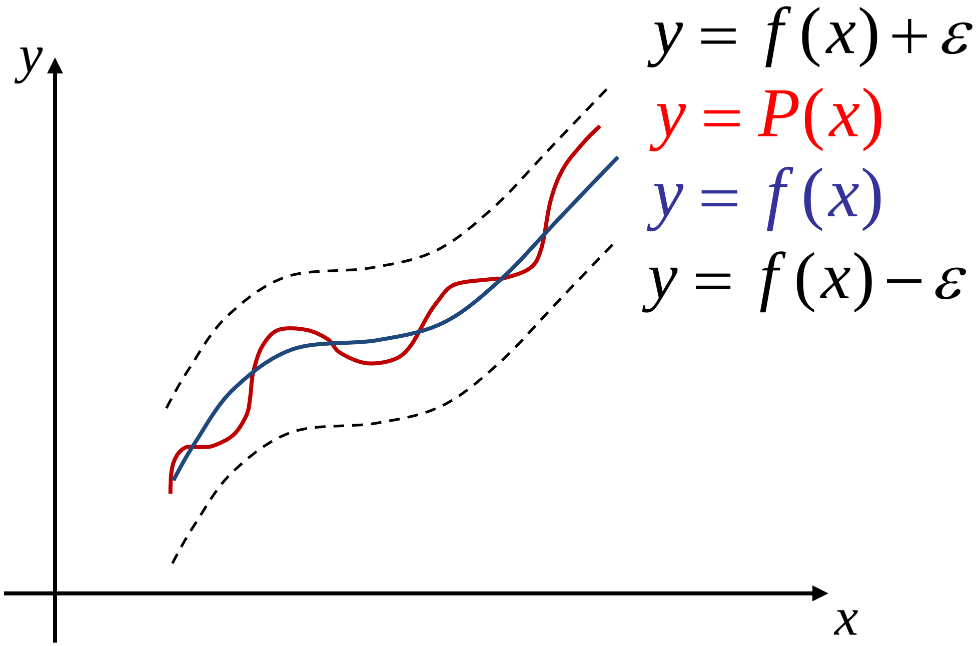
- Dada uma função $f(x)$, definida e contínua em um intervalo limitado e fechado, existe um polinômio $P_n(x)$ que é tão "próximo" da função quanto desejado,

- **Teorema de Weierstrass**: Suponha que $f(x)$ esteja definida e seja contínua no intervalo $[a,b]$. Para cada $\varepsilon>0$, existe um polinômio $P(x)$ com a seguinte propriedade:

$$\left| f(x) - P(x) \right| < \varepsilon, \quad \text{para todo } x \text{ em } [a,b].$$

Introdução

- **Teorema de Weierstrass** . . .



- Entre os motivos para utilizar polinômios na aproximação de funções (contínuas e discretas)
  - as derivadas e integrais são de fácil determinação,
  - e também são polinômios

ROTEIRO

- Introdução
- Polinômio de Taylor
- Polinômios de Lagrange
- Splines
- Comentários finais

Polinômio de Taylor

- O polinômio de Taylor de grau n no ponto x_0 é definido como:

$$P_n(x) = f\left(x_0\right) + f'\left(x_0\right)\left(x - x_0\right) +$$

$$f''\left(x_0\right)\frac{\left(x - x_0\right)^2}{2!} + \cdots + f^n\left(x_0\right)\frac{\left(x - x_0\right)^n}{n!}$$

  - Um polinômio P é idêntico com uma função f no número x_0 quando $P(x_0)=f(x_0)$,
  - O polinômio P tem a mesma "inclinação" que a função f no ponto (x_0,y_0) se $P'(x_0)=f'(x_0)$,
  - O polinômio P tem a mesma "convexidade" que a função f no ponto (x_0,y_0) se $P''(x_0)=f''(x_0)$,
  - O polinômio de Taylor de n-ésimo grau tem n derivadas que concordam com a função f em x_0.

Polinômio de Taylor

- O erro da aproximação do polinômio de Taylor pode ser estimado pela expressão:

$$\left|P_n(x) - f(x)\right| = R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

$$\zeta \in [x, x_0]$$

- Na maioria dos casos obtemos uma cota superior para o erro aproximando $f^{(n+1)}(\zeta)$ pelo máximo da derivada no intervalo

Polinômio de Taylor

- **Exemplo 1**:
  - a) Calcule o polinômio de Taylor do terceiro grau em torno de $x_0=0$ para $f(x)=(1+x)^{1/2}$
  - b) Use o polinômio para obter $f(0{,}1)$ calcule o erro absoluto e encontre um limite para o erro envolvido,
  - c) Use o polinômio para calcular a integral

$$\int_0^{0{,}1} \left(1+x\right)^{1/2} dx$$

calcule o erro relativo da aproximação.

Polinômio de Taylor

- **Exemplo 1** . . . (a)

$$P_3(x) = f\left(x_0\right) + f'\left(x_0\right)\left(x - x_0\right) + f''\left(x_0\right)\frac{\left(x - x_0\right)^2}{2} + f'''\left(x_0\right)\frac{\left(x - x_0\right)^3}{6}$$

$$f\left(x\right) = \left(1 + x\right)^{1/2} \qquad f\left(x_0\right) = 1$$

$$f'\left(x\right) = \frac{1}{2}\left(1 + x\right)^{-1/2} \qquad f'\left(x_0\right) = \frac{1}{2}$$

$$f''\left(x\right) = -\frac{1}{4}\left(1 + x\right)^{-3/2} \qquad f''\left(x_0\right) = -\frac{1}{4}$$

$$f'''\left(x\right) = \frac{3}{8}\left(1 + x\right)^{-5/2} \qquad f'''\left(x_0\right) = \frac{3}{8}$$

$$P_3(x) = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16}$$

Polinômio de Taylor

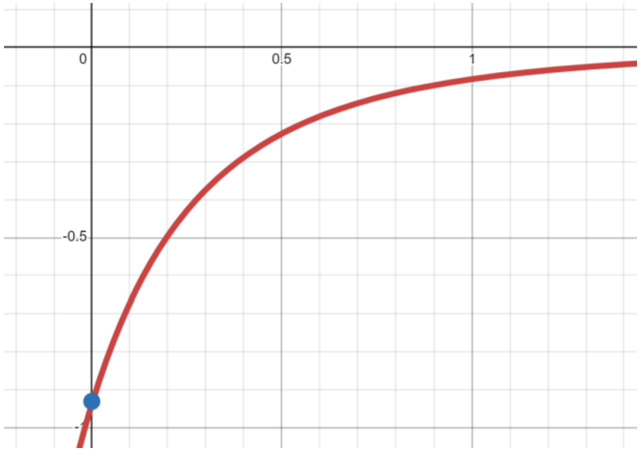
- **Exemplo 1** . . . (b)

$$\sqrt{1{,}1} \cong P_3(0{,}1) = 1{,}0488125$$

$$\sqrt{1{,}1} = 1{,}0488088$$

$$e_a = \left|P_n(x) - f(x)\right| = 3{,}65E-6$$

$$f^{(4)}(x)$$



$$R_3(x) = \frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!}(x-x_0)^4$$

$$f^{(4)}(\zeta) = -\frac{15}{16}(1+\zeta)^{-7/2}$$

$$\zeta \in [0;0{,}1] \quad \zeta \text{ max} \rightarrow R_3 \text{ max}, \quad \left|f^{(4)}(\zeta)\right| \text{ max}, \ \zeta = 0$$

$$R_3(0{,}1) \leq \left|-\frac{1}{24}\left(\frac{15}{16}(0{,}1)^4\right)\right| = 3{,}91E-6$$

Polinômio de Taylor

- **Exemplo 1** . . . (c)

$$\int_0^{0,1} (1+x)^{1/2}\, dx = \frac{2}{3}(1+x)^{3/2}\Big|_0^{0,1} = 0,1024598\textcolor{red}{22}$$

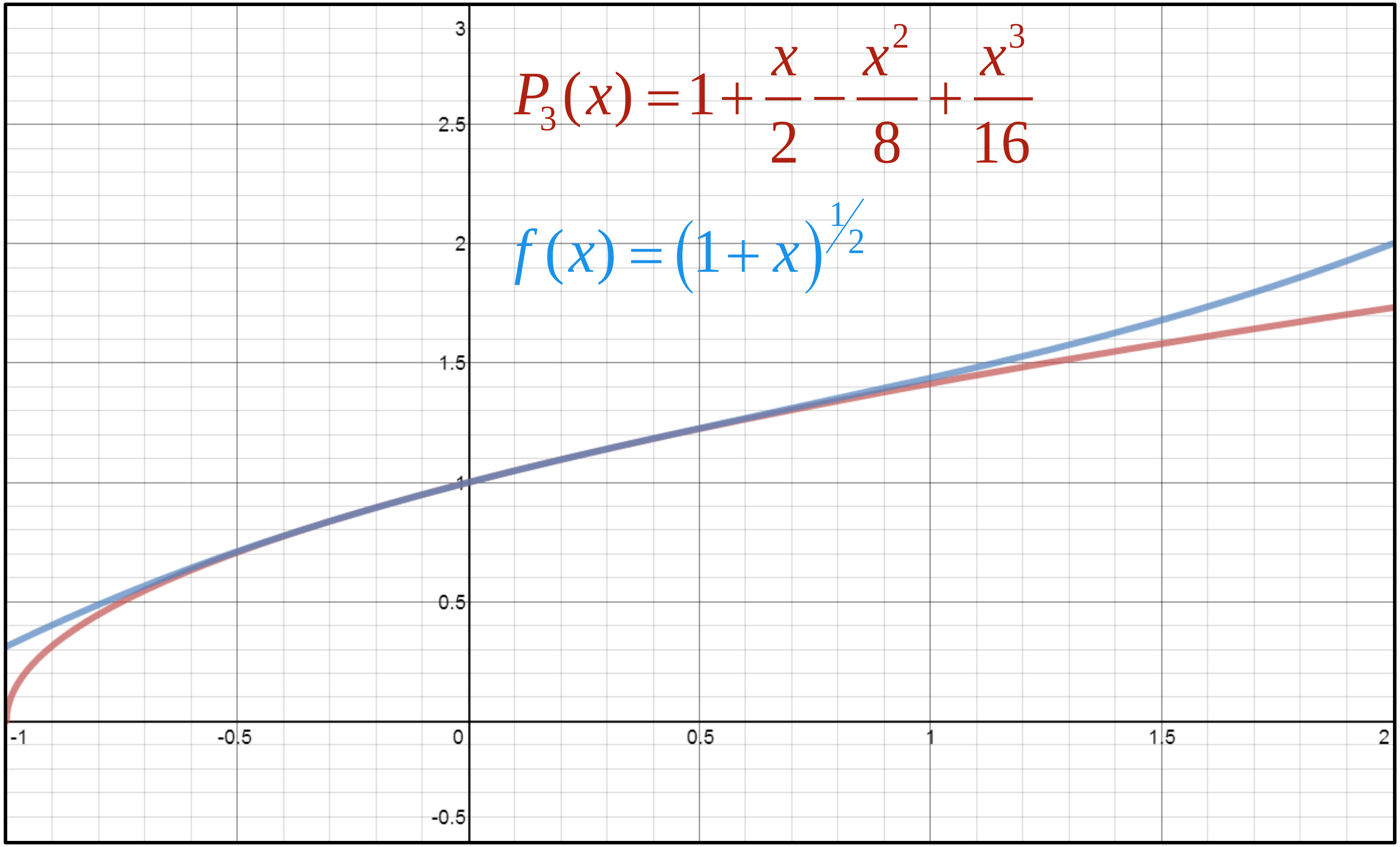
$$\int_0^{0,1} P_3(x)dx = \int_0^{0,1} \left(1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16}\right) dx$$

$$= x + \frac{x^2}{4} - \frac{x^3}{24} + \frac{x^4}{64}\Big|_0^{0,1} = 0,1024598\textcolor{red}{96}$$

$$e_r = \frac{\left|\int f(x) - \int P(x)\right|}{\left|\int f(x)\right|} = 0,7222E-8$$

Polinômio de Taylor

- **Exemplo 1** . . .



Polinômio de Taylor

- **Exemplo 2**: Considerando o polinômio de Taylor $P_3(x)$ obtido em torno de $x_0=0$ para $f(x)=(1+x)^{1/2}$ calcule uma estimativa para $f(2,5)$. Calcule o erro da estimativa.

$$P_3(2,5) = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16} = 2,445313$$

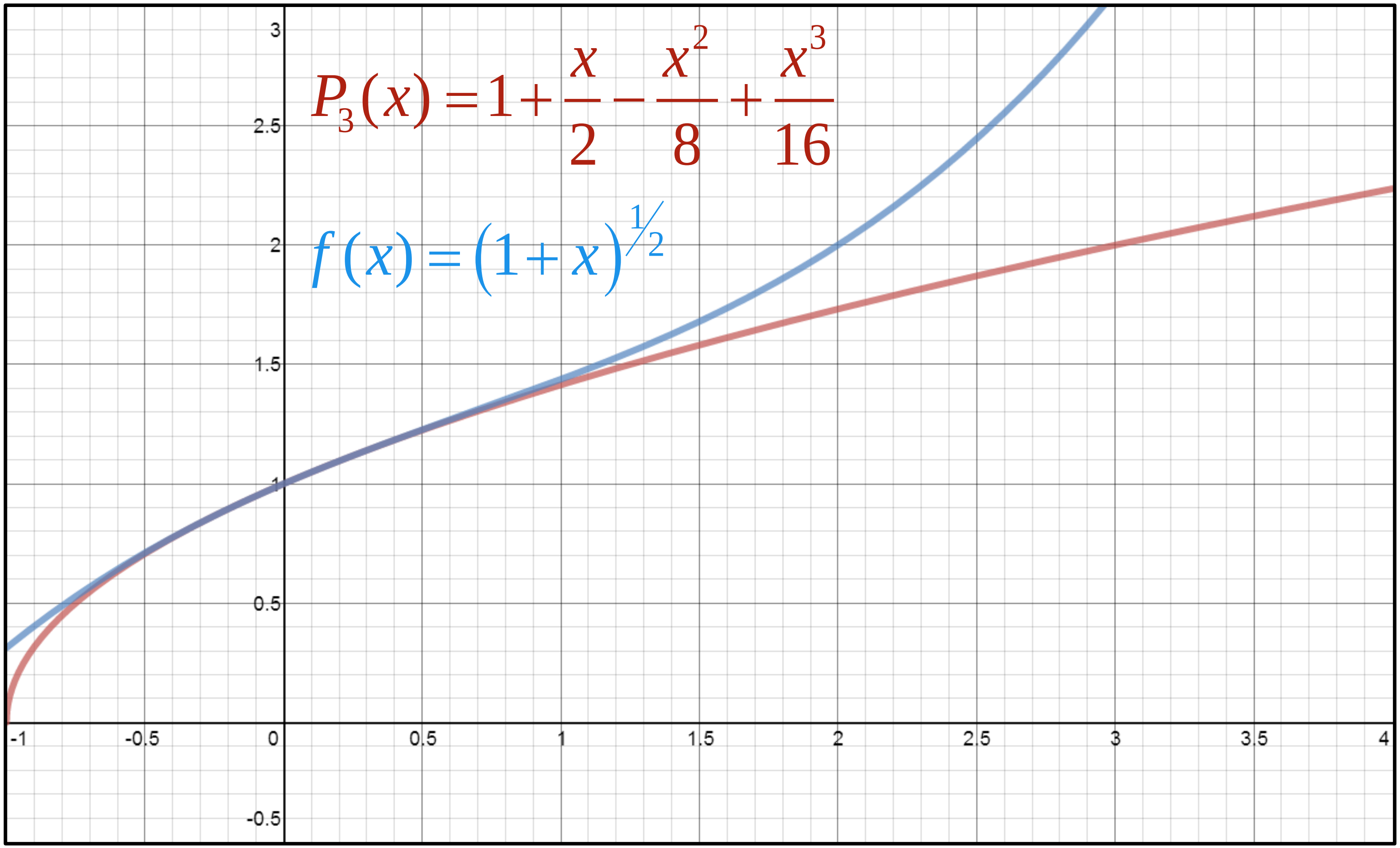
$$f\left(2,5\right) = \left(1+x\right)^{1/2} = 1,870829$$

$$e_r = \left|\frac{P_3 - f}{f}\right| 100\% = 30,71$$

- O erro no cálculo da estimativa é muito grande. Por que?

Polinômio de Taylor

- **Exemplo 2 . . .**



Polinômio de Taylor

- Ao utilizarmos expansão polinomial é desejável uma aproximação relativamente precisa ao longo de um intervalo,
- Os polinômios de Taylor geralmente **NÃO** conseguem isso,
- O uso dos polinômios de Taylor esta limitados aos valores de x próximos do ponto x_0,
- Outra das desvantagens de utilizar os polinômios de Taylor é a necessidade de conhecer as derivadas de f no ponto x_0,

Polinômio de Taylor

- Qual o motivo do fracasso da aproximação com polinômios de Taylor ao longo de um intervalo?
  - Constrói a aproximação apenas com informações de um único ponto x_0
- Aproximações precisas em intervalos largos devem utilizar informações de um conjunto de pontos
- A aproximação de Taylor é útil:
  - Intervalos pequenos na vizinhança de um ponto
  - Aproximação de funções "complexas"

ROTEIRO

- Introdução
- Polinômio de Taylor
- Polinômios de Lagrange
- Splines
- Comentários finais

Polinômio de Lagrange

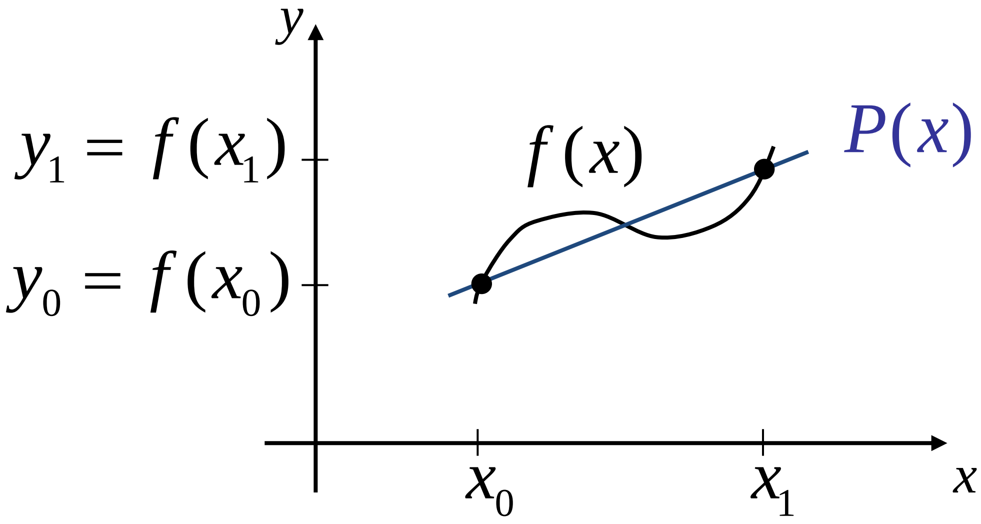
- Definimos o problema de interpolação polinomial na forma
  - Seja uma função $f(x)$, conhecida por $n+1$ pontos isolados (x_i, y_i) $i = 0{:}n$
  - Determinar o valor para $f(x)$ para qualquer valor de x no intervalo $[x_0, x_n]$
  - Devemos encontrar o polinômio interpolador

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

que satisfaz todos os pontos (x_i, y_i).

Polinômio de Lagrange

- Considere o problema de interpolação polinomial para dois pontos (x_0, y_0) e (x_1, y_1),



$$f(x) = ?$$

$$P_1(x) = a_1 x + a_0$$

Polinômio de Lagrange

- Definimos o polinômio interpolante como

$$P_1(x) = L_{1,0}(x) f\left(x_0\right) + L_{1,1}(x) f\left(x_1\right)$$

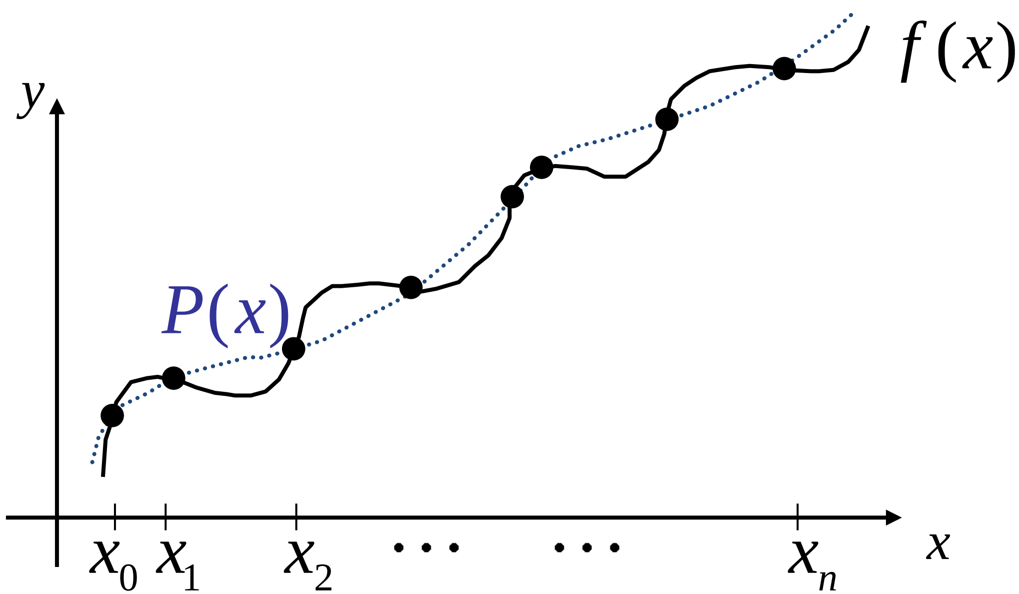
onde $L_{1,0}(x) = \dfrac{x - x_1}{x_0 - x_1}$ e $L_{1,1}(x) = \dfrac{x - x_0}{x_1 - x_0}$

- Para o polinômio proposto:
  - Quando $x=x_0$, $L_0(x_0)=1$, $L_1(x_0)=0$, $P_1(x_0)=f(x_0)$
  - Quando $x=x_1$, $L_0(x_1)=0$, $L_1(x_1)=1$, $P_1(x_1)=f(x_1)$
  - Então $P(x) = L_0(x) f\left(x_0\right) + L_1(x) f\left(x_1\right)$ é o único polinômio de primeira ordem que passa pelos pontos (x_0, y_0) e (x_1, y_1).

Polinômio de Lagrange

- Generalizamos os conceitos de interpolação polinomial
- Para isso, consideremos um polinômio de grau n que passe por $n+1$ pontos

$$\left(x_0, f(x_0)\right), \left(x_1, f(x_1)\right), \cdots, \left(x_n, f(x_n)\right)$$



$$P_n(x) = L_{n,0}(x) f\left(x_0\right) + L_{n,1}(x) f\left(x_1\right) + \cdots + L_{n,n}(x) f\left(x_n\right)$$

Polinômio de Lagrange

- Precisamos construir para cada ponto $k=0, 1, \ldots, n$ uma função $L_{n,k}(x)$ que cumpra as seguintes propriedades:

$$1.\ L_{n,k}(x_i) = 0 \ \text{ para } \ i \neq k$$

$$2.\ L_{n,k}(x_k) = 1$$

- Para satisfazer a propriedade 1 o numerador de $L_{n,k}(x)$ deve ter a forma

$$(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)$$

- Para satisfazer a propriedade 2 o denominador deve ser igual ao numerador para $x=x_k$ isto é

$$(x_k - x_0)(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)$$

Polinômio de Lagrange

- Finalmente a função $L_{n,k}(x)$ é escrita na forma

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$$

- Uma vez conhecidas as funções $L_{n,k}(x)$ o polinômio interpolador pode ser construído facilmente
- O polinômio é chamado **Polinômio de Lagrange de *n*-ésimo Grau** e é definido pelo seguinte teorema

Polinômio de Lagrange

- **Teorema:** Se $x_0, x_1, \ldots, x_n$ são *(n+1)* números distintos e f é uma função cujos valores são dados nesses números, então existe um único polinômio $P(x)$ de grau máximo n com a propriedade: $f(x_k) = P(x_k) \quad \text{para } k = 0:n$

  Este polinômio é dado por

$$P_n(x) = L_{n,0}(x) f(x_0) + \cdots + L_{n,n}(x) f(x_n) = \sum_{k=0}^{n} L_{n,k}(x) f(x_k)$$

  onde

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)}$$

$$= \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)} \quad , \quad k = 0:n \, .$$

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 3:** Mostre que com 3 pontos de dados o polinômio interpolador de Lagrange de segundo grau é único. Usando os valores $x_0=2$, $x_1=2.5$ e $x_2=4$ achar o polinômio interpolante de segundo grau para $f(x)=1/x$. Utilize o polinômio interpolante para estimar $f(2.2)$ e $f(3.5)$, calcule os erros absolutos e comente os resultados.

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 3 . . .**

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} L_{n,k}(x) f(x_k)$$

$$n+1=3 \Rightarrow n=2$$

$$P_2(x) = L_{2,0}(x) f(x_0) + L_{2,1}(x) f(x_1) + L_{2,2}(x) f(x_2)$$

$$L_{n,k}(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)}$$

$$L_{2,0}(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$L_{2,1}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$L_{2,2}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 3 . . .**

	x_0	x_1	x_2
$L_0(x)$	1	0	0
$L_1(x)$	0	1	0
$L_2(x)$	0	0	1

$$P_2(x) = L_{2,0}(x)\,f(x_0) + L_{2,1}(x)\,f(x_1) + L_{2,2}(x)\,f(x_2)$$

$$P_2(x_0) = f(x_0)$$

$$P_2(x_1) = f(x_1)$$

$$P_2(x_2) = f(x_2)$$

- O polinômio P_2 é único.

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 3 . . .** $f(x) = 1/x$

$$x_0 = 2 \qquad x_1 = 2,5 \qquad x_2 = 4$$

$$f(x_0) = 0,5 \qquad f(x_1) = 0,4 \qquad f(x_2) = 0,25$$

$$P_2(x) = L_{2,0}(x) f(x_0) + L_{2,1}(x) f(x_1) + L_{2,2}(x) f(x_2)$$

$$L_{2,0}(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = x^2 - 6,5x + 10$$

$$L_{2,1}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = -\frac{4}{3}\left(x^2 - 6x + 8\right)$$

$$L_{2,2}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{1}{3}\left(x^2 - 4,5x + 5\right)$$

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 3 . . .**

$$P_2(x) = \frac{x^2}{20} - \frac{17x}{40} + \frac{23}{20}$$

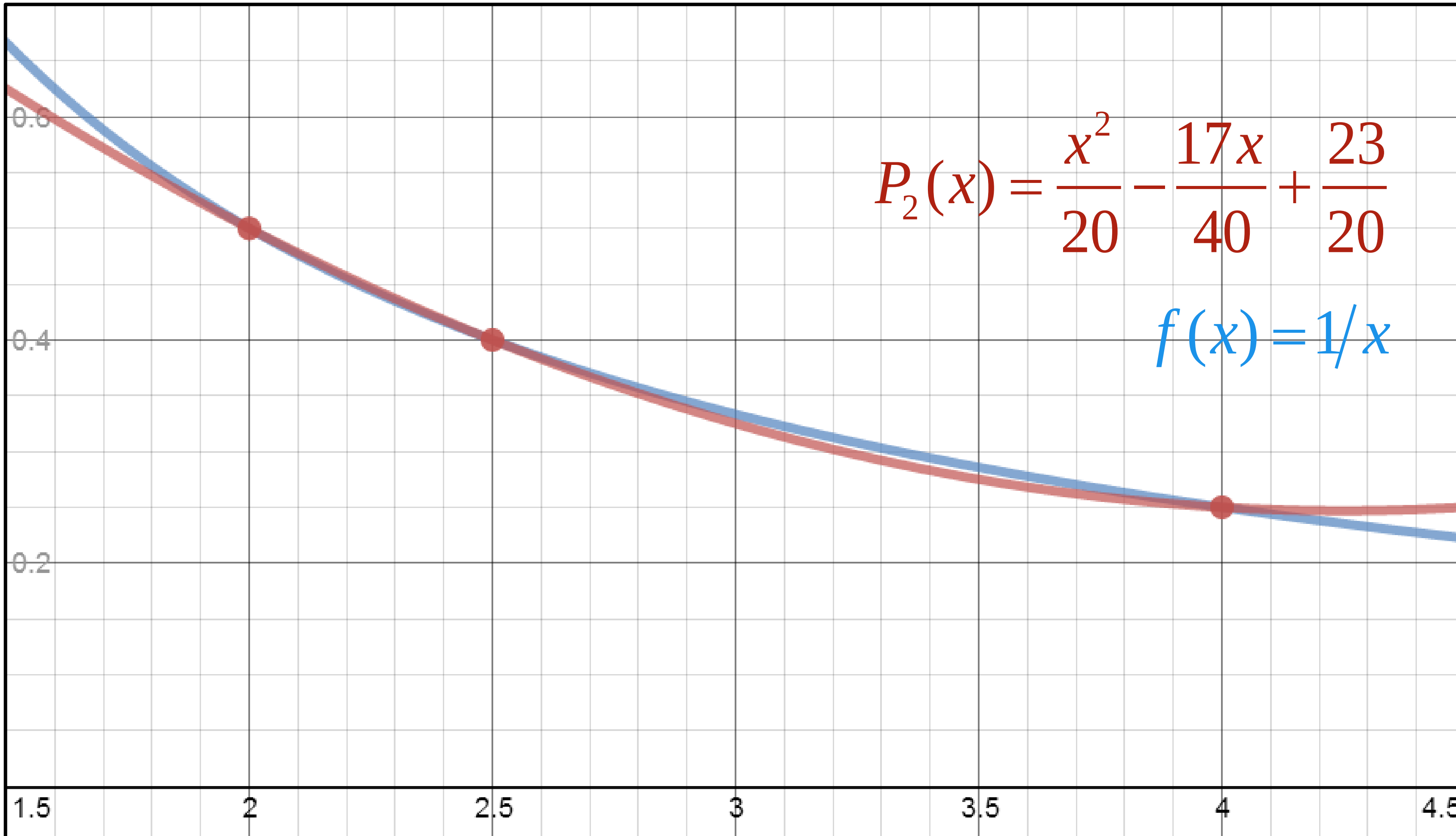
– Calculo do erro $x=2,2$ e $x=3,5$

	$P(x)$	$f(x)$	e_r
$x=2,2$	*0,457000*	*0,454545*	*2,46E-03*
$x=3,5$	*0,275000*	*0,285714*	*1,07E-02*

– Porque o erro para o ponto $x=2,2$ é inferior ao erro para o ponto $x=3,5$?

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 3 . . .**



Polinômio de Lagrange

- Ao calcularmos estimativas utilizando MN é desejável alternativas para avaliar o erro envolvido,
- Cotas para o erro são uteis quando o valor exato é desconhecido
- Podemos calcular uma cota máxima para o erro de interpolação do polinômio de Lagrange
- **Teorema:** Suponha que $x_0, x_1, \ldots, x_n$ sejam números distintos no intervalo $[x_0, x_n]$ e que $f \in C^{n+1}[x_0, x_n]$. Sendo ξ o máximo de $f^{(n+1)}$ em $[x_0, x_n]$ se cumpre:

$$R_n(x) = \left| f(x) - P(x) \right| \leq \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)\cdots(x - x_n)$$

onde $P(x)$ é o polinômio interpolador de Lagrange.

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 4:** Calcule uma cota máxima do erro do polinômio de Lagrange que foi construído no Exemplo 3. Utilize os pontos calculados (*x=2,2* e *x=3,5*) para verificar a expressão.

$$R(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

$$f(x) = \frac{1}{x} \qquad f''(x) = \frac{2}{x^3}$$

$$f'(x) = -\frac{1}{x^2} \qquad f'''(x) = -\frac{6}{x^4}$$

$$f'''(2) = -0,3750$$

$$f'''(4) = -0,2344$$

$$f'''(x) \;\; \to \text{monotona}$$

$$f'''(\xi) = \max\left| f'''(2) \right| = 0,3750$$

Polinômio de Lagrange

- **Exemplo 4 . . .**

$$R(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

$$R(x) = \frac{0,3750}{6}(x - 2)(x - 2,5)(x - 4)$$

$$R(x) = 0,0625\left(x^3 - 8,5x^2 + 23x - 20\right)$$

Resultado
Exemplo 3

$$R(2{,}2) = 6{,}75\mathrm{E}{-3} > 2{,}46\mathrm{E}{-3} = e_r[P_2(2.2)]$$

$$R(3{,}5) = 4{,}69\mathrm{E}{-2} > 1{,}07\mathrm{E}{-2} = e_r[P_2(3.5)]$$

Algoritmo do Polinômio de Lagrange

ENTRADA: Pontos: $(x_0,f(x_0))$, $(x_1,f(x_1))$, ... , $(x_n,f(x_n))$

Ordem do polinômio n, Valor de x^*

SAÍDA: Polinômio de Lagrange de ordem n no ponto x^*

$$P(x^*) = \sum_{k=0}^{n} L_{n,k}(x^*)\, f(x_k) \qquad L_{n,k}(x^*) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{(x^* - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

Algoritmo do Polinômio de Lagrange

PASSO 1: Faça sum = 0, k=0

PASSO 2: Enquanto k<=n siga os passos 3-7

  PASSO 3: Faça prod = 1, i = 0

  PASSO 4: Enquanto i<k

    $prod = prod * (x-x_i)/(x_k-x_i)$, $i = i+1$

  PASSO 5: Faça i=k+1

  PASSO 6: Enquanto i<=n

    $prod = prod * (x-x_i)/(x_k-x_i)$, $i = i+1$

  PASSO 7: Faça $sum = sum + prod*f(x_k)$

PASSO 8: Saída (sum), FIM

Polinômio de Lagrange

- Custo computacional
  - Cálculo do $L_{n,k}$
    - n termos no produtório
    - Para um termo
      - 2 subtrações
      - 1 divisão
      - 1 produto
    - Total: $4n$ operações
  - São calculados $(n+1)$ coeficientes $L_{n,k}$
    - $4n(n+1)$ operações

Polinômio de Lagrange

- Custo computacional . . .
  - Cálculo do somatório $P_n(x)$
    - Para cada um dos $n+1$ termos
      - 1 soma
      - 1 produto
    - Total: $2(n+1)$ operações
  - Operações do algoritmo

$$4n(n+1)+2(n+1)$$
$$NOP_{LAG}=4n^2+6n+2$$

  - Custo quadrático $O(n^2)$

Polinômio de Lagrange

- O algoritmo avalia o polinômio em um ponto x
- Para avaliar em outro ponto os coeficientes $L_{n,k}$ devem ser recalculados
- Muito eficiente para interpolar em um ponto (valores intermediários não precisam ser armazenados)
- Muito ineficiente quando precisamos avaliar muitos pontos
- Quando um novo ponto é adicionado (x_i, f_i) todos os cálculos devem ser repetidos

Polinômio de Lagrange

- A formulação dos polinômios de Lagrange pode ser modificada para uma formulação recursiva
- Esta modificação se conhece como interpolação de Neville
- A formulação de Neville permite obter um algoritmo mais eficiente
- Caso vc for a utilizar interpolação de Lagrange e o desempenho for um fator crítico implemente a formula iterativa de Neville

Considerações Parciais

- Interpolação polinomial
  - Função que satisfaz os pontos (x_i, f_i)
- Aproximação por polinômio de Taylor
  - Entrada 1 ponto, a função e as derivadas nesse ponto
  - A ordem do polinômio depende do número de derivadas considerado
  - Válido na vizinhança de um ponto
  - Insatisfatório para intervalos largos, pontos afastados do ponto x_0

Considerações Parciais

- Interpolação de Lagrange
  - Entrada n+1 pontos, a função nesses pontos
  - Polinômio de ordem n, polinômio é único, existem diversas formas de chegar no polinômio (Lagrange, Newton, Neville, ...)
  - Válido em intervalos largos
  - Alto custo computacional para diversos valores de x
  - Oscilatório com polinômios de alta ordem (muitos pontos)