Aproximação numérica

- Interpolação polinomial
- Aproximação no sentido dos mínimos quadrados.

- Existência e unicidade do polinómio interpolador.
- Método de Lagrange.
- Erro na interpolação polinomial.
- Diferenças divididas. Método de Newton.
- Interpolação usando splines.

Seja $f(x)$ uma função real da qual se conhece o valor num conjunto de $n+1$ pontos de abcissas distintas:

$$(x_i, f_i)_{i=0}^{n}, \quad f_i = f(x_i) \;\; i = 0(1)n$$

Seja $f(x)$ uma função real da qual se conhece o valor num conjunto de $n+1$ pontos de abcissas distintas:

$$(x_i, f_i)_{i=0}^{n}, \quad f_i = f(x_i) \;\; i = 0(1)n$$

- Interpolar f em $x \neq x_i, \quad x \in [\min_i x_i, \max_i x_i]$ é estimar $f(x)$ por $p(x)$, onde p é uma função tal que

$$p(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)n$$

Seja $f(x)$ uma função real da qual se conhece o valor num conjunto de $n+1$ pontos de abcissas distintas:

$$(x_i, f_i)_{i=0}^{n}, \quad f_i = f(x_i) \;\; i = 0(1)n$$

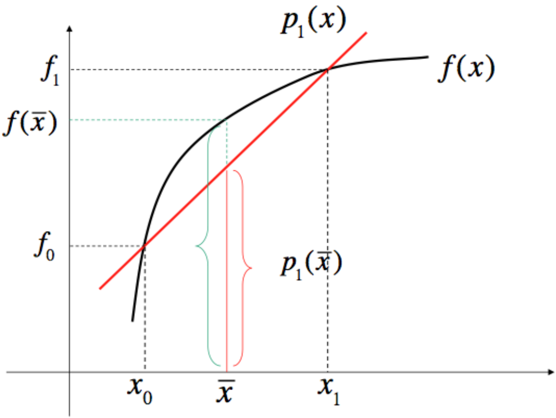
- Interpolar f em $x \neq x_i, \quad x \in [\min_i x_i, \max_i x_i]$ é estimar $f(x)$ por $p(x)$, onde p é uma função tal que

$$p(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)n$$

- Se $p \in \mathbb{P}_n$, espaço dos polinómios algébricos de grau $\leq n$ então a interpolação diz-se interpolação polinomial e p diz-se o polinómio interpolador de f na tabela de pontos dada.

Caso $n = 1$ (interpolação linear)

Dados 2 pontos (x_0, f_0), (x_1, f_1) tais que $x_0 \neq x_1$ há uma e uma só reta $p_1(x)$ que os contém.



Construção do polinómio interpolador. Método de Lagrange

Podemos escrever

$$p_1(x) = l_0(x)\, f_0 + l_1(x)\, f_1$$

onde $l_0(x)$ e $l_1(x)$ são polinómios de grau 1, a determinar.

Construção do polinómio interpolador. Método de Lagrange

Podemos escrever

$$p_1(x) = l_0(x)\, f_0 + l_1(x)\, f_1$$

onde $l_0(x)$ e $l_1(x)$ são polinómios de grau 1, a determinar.

$$p_1(x): \quad \begin{cases} p_1(x_0) = f_0 \\ p_1(x_1) = f_1 \end{cases}$$

$\longrightarrow$ condições de interpolação que se $x_0 \neq x_1$ definem completamente $p_1(x)$

Podemos escrever

$$p_1(x) = l_0(x)\, f_0 + l_1(x)\, f_1$$

onde $l_0(x)$ e $l_1(x)$ são polinómios de grau 1, a determinar.

$$p_1(x) : \quad \begin{cases} p_1(x_0) = f_0 \\ p_1(x_1) = f_1 \end{cases}$$

$\longrightarrow$ condições de interpolação que se $x_0 \neq x_1$ definem completamente $p_1(x)$

Deve ser:

$$\begin{cases} l_0(x_0) = 1 \\ l_0(x_1) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} l_1(x_0) = 0 \\ l_1(x_1) = 1 \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

Podemos escrever

$$p_1(x) = l_0(x)\ f_0 + l_1(x)\ f_1$$

onde $l_0(x)$ e $l_1(x)$ são polinómios de grau 1, a determinar.

$$p_1(x): \quad \begin{cases} p_1(x_0) = f_0 \\ p_1(x_1) = f_1 \end{cases}$$

$\longrightarrow$ condições de interpolação que se $x_0 \neq x_1$ definem completamente $p_1(x)$

Deve ser:

$$\begin{cases} l_0(x_0) = 1 \\ l_0(x_1) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} l_1(x_0) = 0 \\ l_1(x_1) = 1 \end{cases} \implies l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

e então a reta é

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\ f_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\ f_1$$

Construção do polinómio interpolador. Exemplo

Exercício: Estimar $e^{0.826}$ usando interpolação linear sobre a seguinte tabela:

x	e^x
0.80	2.225541
0.81	2.247908
0.82	2.270500
0.83	2.293319
0.84	2.316367

Para fazer interpolação linear, isto é, por uma reta, são necessários 2 pontos (de abcissas distintas). Como $0.82 < 0.826 < 0.83$ usar:

$$x_0 = 0.82 \ \text{ e } \ x_1 = 0.83$$

Exercício: Estimar $e^{0.826}$ usando interpolação linear sobre a seguinte tabela:

x	e^x
0.80	2.225541
0.81	2.247908
0.82	2.270500
0.83	2.293319
0.84	2.316367

Para fazer interpolação linear, isto é, por uma reta, são necessários 2 pontos (de abcissas distintas). Como $0.82 < 0.826 < 0.83$ usar:

$$x_0 = 0.82 \;\text{ e }\; x_1 = 0.83$$

Então o polinómio interpolador é

$$p_1(x) = \frac{x - 0.83}{0.82 - 0.83} \times 2.270500 + \frac{x - 0.82}{0.83 - 0.82} \times 2.293319$$

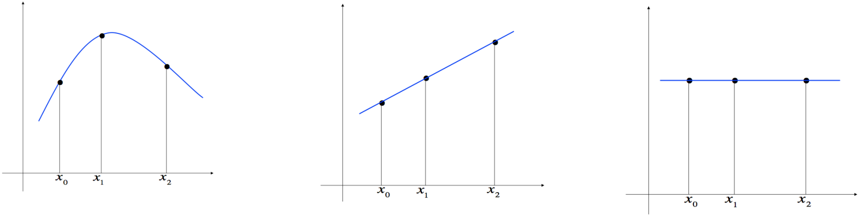
e

$$e^{0.826} \approx p_1(0.826) = 2.284191 \qquad (\text{valor exato} = 2.284164)$$

Caso $n = 2$ (interpolação parabólica)

Dados 3 pontos (x_0, f_0), (x_1, f_1), (x_2, f_2) de abcissas distintas há um e um só polinómio $p_2(x)$ de grau ≤ 2 que os contém, isto é, tal que

$$\boxed{p_2(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)2} \longleftarrow \text{condições de interpolação}$$



Podemos escrever $p_2(x)$ na forma

$$p_2(x) = l_0(x)\, f_0 + l_1(x)\, f_1 + l_2(x)\, f_2$$

onde $l_0(x)$, $l_1(x)$ e $l_2(x)$ são polinómios de grau 2, a determinar.
Fácilmente se verifica que

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \qquad \text{satisfazem} \qquad l_k(x_i) = \begin{cases} 0 & i \neq k \\ 1 & i = k \end{cases}$$

$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

e então são satisfeitas as condições de interpolação $p_2(x_i) = f_i, \ \ i = 0(1)2$.

Exercício: Estimar $\mathrm{e}^{0.826}$ usando interpolação parabólica sobre a tabela dada

Vamos escolher os 3 pontos mais próximos de 0.826.

$$x_0 = 0.82, \quad x_1 = 0.83 \ \text{ e } \ x_2 = 0.84$$

Então

$$p_2(x) = \frac{(x-0.83)(x-0.84)}{(0.82-0.83)(0.82-0.84)} \times 2.270500 + \frac{(x-0.82)(x-0.84)}{(0.83-0.82)(0.83-0.84)} \times 2.293319 + \frac{(x-0.82)(x-0.83)}{(0.84-0.82)(0.84-0.83)} \times 2.316367$$

e

$$\mathrm{e}^{0.826} \approx p_2(0.826) = 2.284164 \qquad (\text{valor exato} = 2.284164)$$

Exercício: Estimar $\mathrm{e}^{0.826}$ usando interpolação parabólica sobre a tabela dada

Vamos escolher os 3 pontos mais próximos de 0.826.

$$x_0 = 0.82, \;\; x_1 = 0.83 \;\text{ e }\; x_2 = 0.84$$

Então

$$p_2(x) = \frac{(x-0.83)(x-0.84)}{(0.82-0.83)(0.82-0.84)} \times 2.270500 + \frac{(x-0.82)(x-0.84)}{(0.83-0.82)(0.83-0.84)} \times 2.293319 + \frac{(x-0.82)(x-0.83)}{(0.84-0.82)(0.84-0.83)} \times 2.316367$$

e

$$\mathrm{e}^{0.826} \approx p_2(0.826) = 2.284164 \qquad (\text{valor exato} = 2.284164)$$

Exercício: Construir o polinómio que interpola o seguinte conjunto de pontos: (0,-1), (1,-1) e (2,7)

Existência e unicidade do polinómio interpolador

Teorema

Dados $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas existe um e um só polinómio $p_n(x)$, de grau $\leq n$, tal que

$$p_n(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$$

Teorema

Dados $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas existe um e um só polinómio $p_n(x)$, de grau $\leq n$, tal que

$$p_n(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$$

Este polinómio, usando a fórmula interpoladora de Lagrange, escreve-se na forma

$$\begin{aligned} p_n(x) &= l_0(x)\ f_0 + l_1(x)\ f_1 + \ldots + l_n(x)\ f_n \\ &= \sum_{k=0}^{n} l_k(x)\ f_k \end{aligned}$$

onde $\ l_k(x), \ \ k = 0(1)n,\ $ é um polinómio de grau n tal que $\ l_k(x_i) = \begin{cases} 0 & i \neq k \\ 1 & i = k \end{cases}$

e é dado por

$$\begin{aligned} l_k(x) &= \frac{(x-x_0)\ldots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\ldots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\ldots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\ldots(x_k-x_n)} \\ &= \prod_{k\neq i=0}^{n} \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)}, \qquad k = 0(1)n \end{aligned}$$

Demonstração do teorema

Mostrar que $p_n(x)$ existe e é único

Demonstração do teorema

Mostrar que $p_n(x)$ existe e é único

- Existe! Acabámos de o construir.

Demonstração do teorema

Mostrar que $p_n(x)$ existe e é único

- Existe! Acabámos de o construir.
- Mostrar que é único por redução ao absurdo:

  Supôr que existe outro polinómio $q_n(x) \neq p_n(x)$, um polinómio de grau $\leq n$ que passa nos pontos dados:

$$q_n(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$$

- Seja $R(x) = p_n(x) - q_n(x) \Longrightarrow \begin{array}{l} R(x) \text{ é polinómio de grau } \leq n \\ R(x_i) = p_n(x_i) - q_n(x_i) = 0, \quad i = 0(1)n \end{array}$

Demonstração do teorema

Mostrar que $p_n(x)$ existe e é único

- Existe! Acabámos de o construir.
- Mostrar que é único por redução ao absurdo:

  Supôr que existe outro polinómio $q_n(x) \neq p_n(x)$, um polinómio de grau $\leq n$ que passa nos pontos dados:

$$q_n(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$$

  - Seja $R(x) = p_n(x) - q_n(x) \Longrightarrow \begin{array}{l} R(x) \text{ é polinómio de grau } \leq n \\ R(x_i) = p_n(x_i) - q_n(x_i) = 0, \quad i = 0(1)n \end{array}$
  - Então $R(x)$ tem $n+1$ zeros distintos, $x_0, x_1, \ldots, x_n$.
  - Como $R(x)$ é um polinómio de grau $\leq n$, então $R(x) \equiv 0$, polinómio nulo. E então $p_n(x) = q_n(x)$, que é absurdo.

Logo o polinómio interpolador $p_n(x)$é único.

Erro na interpolação polinomial

O erro cometido na interpolação polinomial, $f(x) - p_n(x)$, para $a \leq x \leq b$, é dado pelo seguinte teorema:

Teorema

Dada uma função $f(x) \in C^{n+1}[a,b]$, seja $p_n(x) \in \mathbb{P}_n$ o polinómio interpolador de $f(x)$ nos pontos de abcissas distintas $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,b]$ então
$\forall x \in [a,b] \;\; \exists c_x \in]a,b[$:

$$\boxed{f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(c_x) \pi_{n+1}(x)} \qquad (1)$$

onde $\pi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_n)$

Erro na interpolação polinomial. Exemplo.

Exercício: Qual o erro cometido ao estimar $\mathrm{e}^{0.826}$ usando interpolação linear sobre a tabela dada?

- $f(x) = \mathrm{e}^x, \quad x \in [0.82, 0.83] \equiv I, \quad x_0 = 0.82, \quad x_1 = 0.83$
  $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de grau ≤ 1 de f na tabela dada, $\quad n = 1$

Erro na interpolação polinomial. Exemplo.

Exercício: Qual o erro cometido ao estimar $\mathrm{e}^{0.826}$ usando interpolação linear sobre a tabela dada?

- $f(x) = \mathrm{e}^x, \;\; x \in [0.82, 0.83] \equiv I, \quad x_0 = 0.82, \quad x_1 = 0.83$

  $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de grau ≤ 1 de f na tabela dada, $\quad n = 1$

$$f(x) - p_1(x) = \frac{1}{2!} f''(c_x)(x - x_0)(x - x_1), \quad c_x \in]x_0, x_1[$$

$$\Longrightarrow |f(x) - p_1(x)| \leq \frac{M}{2!} |(x - x_0)(x - x_1)|, \quad M = \max_{x \in I} |f''(x)| = \mathrm{e}^{0.83} \leq 2.3$$

Erro na interpolação polinomial. Exemplo.

Exercício: Qual o erro cometido ao estimar $e^{0.826}$ usando interpolação linear sobre a tabela dada?

- $f(x) = e^x, \quad x \in [0.82, 0.83] \equiv I, \quad x_0 = 0.82, \quad x_1 = 0.83$

  $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de grau ≤ 1 de f na tabela dada, $\quad n = 1$

$$f(x) - p_1(x) = \frac{1}{2!} f''(c_x)(x - x_0)(x - x_1), \quad c_x \in]x_0, x_1[$$

$$\Longrightarrow |f(x) - p_1(x)| \leq \frac{M}{2!} |(x - x_0)(x - x_1)|, \quad M = \max_{x \in I} |f''(x)| = e^{0.83} \leq 2.3$$

- Em particular para $x = 0.826$

$$|\underbrace{e^{0.826}}_{2.284164} - \underbrace{p_1(0.826)}_{2.284191}| \leq \frac{2.3}{2!} |(0.826 - 0.82)(0.826 - 0.83)| \leq 3 \times 10^{-5}$$

$$|2.284164 - 2.284191| \approx 2.8 \times 10^{-5} \leq 3 \times 10^{-5}$$

Erro na interpolação polinomial. Exemplo.

Exercício: Qual o erro cometido ao estimar $\mathrm{e}^{0.826}$ usando interpolação linear sobre a tabela dada?

- $f(x) = \mathrm{e}^x, \quad x \in [0.82, 0.83] \equiv I, \quad x_0 = 0.82, \quad x_1 = 0.83$
  $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de grau ≤ 1 de f na tabela dada, $\quad n = 1$

$$f(x) - p_1(x) = \frac{1}{2!} f''(c_x)(x - x_0)(x - x_1), \quad c_x \in]x_0, x_1[$$

$$\Longrightarrow |f(x) - p_1(x)| \leq \frac{M}{2!} |(x - x_0)(x - x_1)|, \quad M = \max_{x \in I} |f''(x)| = \mathrm{e}^{0.83} \leq 2.3$$

- Em particular para $x = 0.826$

$$|\underbrace{\mathrm{e}^{0.826}}_{2.284164} - \underbrace{p_1(0.826)}_{2.284191}| \leq \frac{2.3}{2!} |(0.826 - 0.82)(0.826 - 0.83)| \leq 3 \times 10^{-5}$$

$$|2.284164 - 2.284191| \approx 2.8 \times 10^{-5} \leq 3 \times 10^{-5}$$

- E podemos escrever $\quad \mathrm{e}^{0.826} = 2.284191 \pm 3 \times 10^{-5}$

Demonstração do teorema do erro

- Seja $x = x_i, \;\; i = 0(1)n \implies \begin{cases} f(x_i) - p_n(x_i) = 0 \\ \pi_{n+1}(x_i) = 0 \end{cases} \implies (1)$ é verdadeira

- Seja $x = x_i, \;\; i = 0(1)n \implies \begin{cases} f(x_i) - p_n(x_i) = 0 \\ \pi_{n+1}(x_i) = 0 \end{cases} \implies (1)$ é verdadeira
- Seja $x \neq x_i, \;\; i = 0(1)n, \;\; x$ fixo, $\;x \in [a,b]$
  - Construir

$$F(t) = f(t) - p_n(t) - C\,\pi_{n+1}(t)$$

onde C é uma constante tal que $F(x) = 0$

$$\implies C = \frac{f(x) - p_n(x)}{\pi_{n+1}(x)} \qquad (2)$$

Demonstração do teorema do erro

- Seja $x = x_i, \quad i = 0(1)n \implies \begin{cases} f(x_i) - p_n(x_i) = 0 \\ \pi_{n+1}(x_i) = 0 \end{cases} \implies$ (1) é verdadeira

- Seja $x \neq x_i, \quad i = 0(1)n, \quad x$ fixo, $\quad x \in [a, b]$

  - Construir
    $$F(t) = f(t) - p_n(t) - C\,\pi_{n+1}(t)$$
    onde C é uma constante tal que $F(x) = 0$
    $$\implies C = \frac{f(x) - p_n(x)}{\pi_{n+1}(x)} \qquad (2)$$

  - $F \in C^{n+1}[a, b]$ e tem pelo menos $n + 2$ zeros em $]a, b[$ pois
    $$F(x_0) = F(x_1) = \cdots = F(x_n) = F(x) = 0$$

$$\Longrightarrow \exists c_x \in]\min\{x_0,\ldots,x_n,x\},\max\{x_0,\ldots,x_n,x\}[\subset [a,b] : F^{(n+1)}(c_x) = 0$$

- Neste ponto c_x

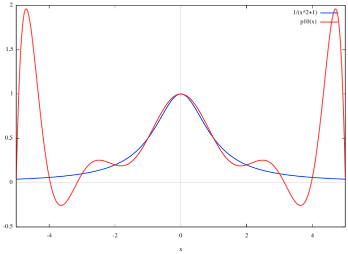
$$F^{(n+1)}(c_x) = 0 = f^{(n+1)}(c_x) - \underbrace{p_n^{(n+1)}(c_x)}_{=0} - C\,\pi_{n+1}^{(n+1)}(c_x)$$

Como $p_n^{(n+1)}(x) = 0$, pois $p_n \in \mathbb{P}_n$, e $\pi_{n+1}^{(n+1)}(x) = (n+1)!$

$$\Longrightarrow C = \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \qquad (3)$$

- De (2) e (3) resulta (1)

Exercício: Interpolar $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ em $n+1$ pontos de abcissas igualmente espaçadas, $x_i = -5 + \frac{10i}{n}$, $i = 0(1)n$. Calcular o erro cometido.

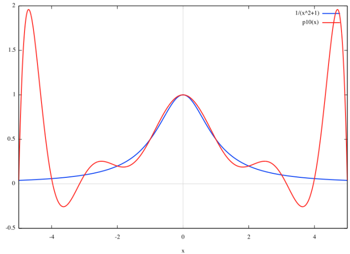


$\longleftarrow$ $n = 10$, $f(x)$, $p_{10}(x)$

x	$\lvert f(x) - p_{10}(x) \rvert$	$\pi_{11}(x)$
0.5	4.3×10^{-2}	-4.8×10^{3}
1.5	7.2×10^{-2}	6.9×10^{3}
2.5	1.2×10^{-1}	-1.4×10^{4}
3.5	3.0×10^{-1}	5.0×10^{4}
4.5	1.5×10^{0}	-3.2×10^{6}

Exemplo de Runge

Exercício: Interpolar $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ em $n+1$ pontos de abcissas igualmente espaçadas, $x_i = -5 + \frac{10i}{n}$, $i = 0(1)n$. Calcular o erro cometido.



$\longleftarrow$ $n = 10$, $f(x)$, $p_{10}(x)$

x	$\|f(x) - p_{10}(x)\|$	$\pi_{11}(x)$
0.5	4.3×10^{-2}	-4.8×10^3
1.5	7.2×10^{-2}	6.9×10^3
2.5	1.2×10^{-1}	-1.4×10^4
3.5	3.0×10^{-1}	5.0×10^4
4.5	1.5×10^0	-3.2×10^6

- O factor $\pi_{n+1}(x)$ é o factor mais importante no comportamento do erro. Para abcissas igualmente espaçadas o erro de interpolação será menor para valores de x perto do ponto médio das abcissas de interpolação.
- A interpolação de ordem mais elevada pode não trazer melhores resultados.
- Mostra-se que para muitos pontos x no intervalo [-5,5], $p_n(x)$ não converge para $f(x)$ quando o espaçamento tende para zero.
- Podemos obter melhores resultados escolhendo outras abcissas. Como?

- Diferença dividida de 1^a ordem

Dada $f(x)$ e x_0 e x_1 tais que $x_0 \neq x_1$ define-se diferença dividida de 1^a ordem

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

Diferenças divididas

- Diferença dividida de 1^a ordem

  Dada $f(x)$ e x_0 e x_1 tais que $x_0 \neq x_1$ define-se diferença dividida de 1^a ordem

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

- Diferença dividida de 2^a ordem

  Dados $x_0,\ x_1$ e x_2 distintos define-se diferença dividida de 2^a ordem

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

  como a diferença dividida de 1^a ordem de diferenças divididas de 1^a ordem

- Diferença dividida de 1^a ordem

  Dada $f(x)$ e x_0 e x_1 tais que $x_0 \neq x_1$ define-se diferença dividida de 1^a ordem

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

- Diferença dividida de 2^a ordem

  Dados $x_0,\ x_1$ e x_2 distintos define-se diferença dividida de 2^a ordem

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

  como a diferença dividida de 1^a ordem de diferenças divididas de 1^a ordem

- Em geral dados $x_0,\ x_1, \ldots, x_n$, $n+1$ valores distintos define-se diferença dividida de ordem n

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

Dados $x_0,\ x_1,\ldots,x_n$, $n+1$ valores distintos podemos calcular as sucessivas diferenças divididas de uma função $f(x)$ naquelas abcissas e construir uma tabela:

$$
\begin{array}{cccccccccc}
x_0 & f(x_0) & \rightarrow & f[x_0,x_1] & \rightarrow & f[x_0,x_1,x_2] & \rightarrow & f[x_0,x_1,x_2,x_3] & \ldots & f[x_0,\ldots,x_n] \\
x_1 & f(x_1) & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & f[x_1,x_2] & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & f[x_1,x_2,x_3] & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & \vdots & & \\
x_2 & f(x_2) & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & f[x_2,x_3] & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & \vdots & & & & \\
x_3 & f(x_3) & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & \vdots & & & & & & \\
\vdots & \vdots & & & & & & & & \\
x_{n-1} & f(x_{n-1}) & \begin{array}{c}\nearrow\\ \rightarrow\end{array} & f[x_{n-1},x_1] & & & & & & \\
x_n & f(x_n) & \nearrow & & & & & & &
\end{array}
$$

Diferenças divididas

Dados $x_0,\ x_1, \ldots, x_n$, $n+1$ valores distintos podemos calcular as sucessivas diferenças divididas de uma função $f(x)$ naquelas abcissas e construir uma tabela:

$$
\begin{array}{ccccccccc}
x_0 & f(x_0) & \rightarrow & f[x_0,x_1] & \rightarrow & f[x_0,x_1,x_2] & \rightarrow & f[x_0,x_1,x_2,x_3] & \ldots & f[x_0,\ldots,x_n] \\
x_1 & f(x_1) & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & f[x_1,x_2] & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & f[x_1,x_2,x_3] & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & \vdots & & \\
x_2 & f(x_2) & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & f[x_2,x_3] & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & \vdots & & & & \\
x_3 & f(x_3) & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & \vdots & & & & & & \\
\vdots & \vdots & & & & & & & & \\
x_{n-1} & f(x_{n-1}) & \substack{\nearrow \\ \rightarrow} & f[x_{n-1},x_1] & & & & & & \\
x_n & f(x_n) & \nearrow & & & & & & &
\end{array}
$$

Exemplo: $f(x) = \log_{10}(x)$ abcissas: 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5

i	x_i	$f(x_i)$	$f[,]$	$f[,,]$	$f[,,,]$	$f[,,,,]$
0	2.1	0.32222	0.20200	-0.04450	0.01000	0.00833
1	2.2	0.34242	0.19310	-0.04150	0.01333	
2	2.3	0.36173	0.18480	-0.03750		
3	2.4	0.38021	0.17730			
4	2.5	0.39794				

Método de Newton em diferenças divididas

Polinómio interpolador de Newton em diferenças divididas

- Dado um conjunto de $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas , seja $p_n(x)$ o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos. $p_n(x)$ é tal que
  - grau de $p_n(x) \leq n$
  - $p_n(x_i) = f(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)n$

Polinómio interpolador de Newton em diferenças divididas

- Dado um conjunto de $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas , seja $p_n(x)$ o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos. $p_n(x)$ é tal que
  - grau de $p_n(x) \leq n$
  - $p_n(x_i) = f(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$
- Caso $n = 1$: dados (x_0, f_0) e (x_1, f_1), $x_0 \neq x_1$, escrever

$$p_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1]$$

Mostrar que $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de f naqueles 2 pontos:

Polinómio interpolador de Newton em diferenças divididas

- Dado um conjunto de $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas , seja $p_n(x)$ o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos. $p_n(x)$ é tal que
  - grau de $p_n(x) \leq n$
  - $p_n(x_i) = f(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$
- Caso $n = 1$: dados (x_0, f_0) e (x_1, f_1), $x_0 \neq x_1$, escrever

$$p_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1]$$

Mostrar que $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de f naqueles 2 pontos:

  - grau $p_1(x) \leq 1$ $\surd$ pois $f(x_0), f[x_0, x_1]$ são constantes

Polinómio interpolador de Newton em diferenças divididas

- Dado um conjunto de $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas , seja $p_n(x)$ o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos. $p_n(x)$ é tal que
  - grau de $p_n(x) \leq n$
  - $p_n(x_i) = f(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$
- Caso $n = 1$: dados (x_0, f_0) e (x_1, f_1), $x_0 \neq x_1$, escrever

$$p_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1]$$

Mostrar que $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de f naqueles 2 pontos:

- grau $p_1(x) \leq 1$ $\surd$ pois $f(x_0), f[x_0, x_1]$ são constantes
- $p_1(x_0) = f(x_0) = f_0$ $\surd$

$$\begin{aligned} p_1(x_1) &= f(x_0) + (x_1 - x_0)\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \\ &= f(x_0) + f(x_1) - f(x_0) = f(x_1) = f_1 \quad \surd \end{aligned}$$

Polinómio interpolador de Newton em diferenças divididas

- Dado um conjunto de $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas , seja $p_n(x)$ o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos. $p_n(x)$ é tal que
  - grau de $p_n(x) \leq n$
  - $p_n(x_i) = f(x_i) = f_i, \quad i = 0(1)n$
- Caso $n = 1$: dados (x_0, f_0) e (x_1, f_1), $x_0 \neq x_1$, escrever

$$p_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1]$$

Mostrar que $p_1(x)$ é o polinómio interpolador de f naqueles 2 pontos:

- grau $p_1(x) \leq 1$ $\surd$ pois $f(x_0), f[x_0, x_1]$ são constantes
- $p_1(x_0) = f(x_0) = f_0$ $\surd$

$$p_1(x_1) = f(x_0) + (x_1 - x_0)\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$
$$= f(x_0) + f(x_1) - f(x_0) = f(x_1) = f_1 \quad \surd$$

Logo $p_1(x)$ verifica as condições de interpolação e então é o polinómio interpolador de f , pois o polinómio interpolador é único.

Método de Newton em diferenças divididas

- Caso $n = 2$: dados (x_0, f_0), (x_1, f_1) e (x_2, f_2), de abcissas distintas, escrever

$$p_2(x) = \underbrace{f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1]}_{p_1(x)} + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2]$$

- Caso $n = 2$: dados (x_0, f_0), (x_1, f_1) e (x_2, f_2), de abcissas distintas, escrever

$$p_2(x) = \underbrace{f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1]}_{p_1(x)} + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2]$$

  Mostrar que $p_2(x)$ é o polinómio interpolador de f naqueles 3 pontos:

  - grau $p_2(x) \leq 2$ $\surd$
  - $p_2(x_0) = f(x_0) = f_0$ $\surd$

    $p_2(x_1) = f(x_1) = f_1$ $\surd$

$$\begin{aligned} p_2(x_2) &= f(x_0) + (x_2 - x_0)f[x_0, x_1] + (x_2 - x_0)(x_2 - x_1)f[x_0, x_1, x_2] \\ &= f(x_0) + (x_2 - x_0)f[x_0, x_1] + (x_2 - x_1)(f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]) \\ &= f(x_0) + (x_1 - x_0)f[x_0, x_1] + (x_2 - x_1)f[x_1, x_2] \\ &= f(x_0) + (f(x_1) - f(x_0)) + (f(x_2) - f(x_1)) = f(x_2) = f_2 \quad \surd \end{aligned}$$

  Logo $p_2(x)$ é o polinómio interpolador de f.

- Em geral : Dados $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas, podemos escrever

$$p_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)\, f[x_0, x_1] + \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})\, f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

e mostrar que $p_n(x)$ é o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos, isto é, grau $p_n(x) \leq n$ e $p_n(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)n$.

Método de Newton em diferenças divididas

- Em geral : Dados $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas, podemos escrever

$$p_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)\ f[x_0, x_1] + \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})\ f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

e mostrar que $p_n(x)$ é o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos, isto é, grau $p_n(x) \leq n$ e $p_n(x_i) = f_i,\ \ i = 0(1)n$.

- Note-se que se juntarmos um ponto (x_{n+1}, f_{n+1}) à tabela então o novo polinómio interpolador é

$$p_{n+1}(x) = p_n(x) + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)\ f[x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}]$$

Logo para construir $p_{n+1}(x)$ não é necessário refazer os cálculos, basta calcular uma diagonal de diferenças divididas para obter o novo coeficiente $f[x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}]$.

Método de Newton em diferenças divididas

- Em geral : Dados $n+1$ pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$ de abcissas distintas, podemos escrever

$$p_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)\ f[x_0, x_1] + \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})\ f[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

  e mostrar que $p_n(x)$ é o polinómio interpolador de f naquele conjunto de pontos, isto é, grau $p_n(x) \leq n$ e $p_n(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)n$.

- Note-se que se juntarmos um ponto (x_{n+1}, f_{n+1}) à tabela então o novo polinómio interpolador é

$$p_{n+1}(x) = p_n(x) + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)\ f[x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}]$$

  Logo para construir $p_{n+1}(x)$ não é necessário refazer os cálculos, basta calcular uma diagonal de diferenças divididas para obter o novo coeficiente $f[x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}]$.

- Uma propriedade muito útil das diferenças divididas, visto permitir considerar as abcissas por ordem arbitrária, é o facto das diferenças divididas serem invariantes com respeito à ordem dos argumentos. Assim $f[x_{p_0}, \ldots, x_{p_l}] = f[x_{p_0^*}, \ldots, x_{p_l^*}]$ para qualquer permutação $p_0^*, \ldots, p_l^*$ da sequência $p_0, \ldots, p_l$.

Método de Newton em diferenças divididas. Exemplo

Exercício: Interpolar $f(x) = \log_{10}(x)$ no conjunto pontos de abcissas: 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5

- Já construímos a tabela das diferenças divididas
- 5 pontos $\longrightarrow$ construir $p_4(x)$

$$
\begin{aligned}
p_4(x) = f(x_0) + (x - x_0)\, f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)\, f[x_0, x_1, x_2] + \\
+ (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \\
+ (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]
\end{aligned}
$$

Método de Newton em diferenças divididas. Exemplo

Exercício: Interpolar $f(x) = \log_{10}(x)$ no conjunto pontos de abcissas: 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5

- Já construímos a tabela das diferenças divididas
- 5 pontos $\longrightarrow$ construir $p_4(x)$

$$
\begin{aligned}
p_4(x) = {} & f(x_0) + (x - x_0)\, f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)\, f[x_0, x_1, x_2] + \\
& + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \\
& + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
p_4(x) = {} & 0.32222 + (x - 2.1) \times 0.20200 + (x - 2.1)(x - 2.2) \times (-0.04450) + \\
& + (x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3) \times 0.1000 + \\
& + (x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3)(x - 2.4) \times (0.00833)
\end{aligned}
$$

Método de Newton em diferenças divididas. Exemplo

Exercício: Interpolar $f(x) = \log_{10}(x)$ no conjunto pontos de abcissas: 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5

- Já construímos a tabela das diferenças divididas
- 5 pontos $\longrightarrow$ construir $p_4(x)$

$$\begin{aligned} p_4(x) = {} & f(x_0) + (x - x_0)\, f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)\, f[x_0, x_1, x_2] + \\ & + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \\ & + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_4(x) = {} & 0.32222 + (x - 2.1) \times 0.20200 + (x - 2.1)(x - 2.2) \times (-0.04450) + \\ & + (x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3) \times 0.1000 + \\ & + (x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3)(x - 2.4) \times (0.00833) \end{aligned}$$

- $\forall x \in [2.1, 2.5] \equiv I \;\; \exists c_x \in]2.1, 2.5[$:

$$E(x) = f(x) - p_4(x) = \frac{f^{(5)}(c_x)}{5!}(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_4)$$

E como $f^{(5)}(x) = \frac{24}{x^5 \ln(10)}$ é positiva e decrescente em I $\max_{x \in I} |f^{(5)}(x)| \leq 0.26$

$$|E(x)| \leq \frac{0.26}{5!} |(x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3)(x - 2.4)(x - 2.5)|$$

Exercício: Interpolar $f(x) = \log_{10}(x)$ no conjunto pontos de abcissas: 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5

- Já construímos a tabela das diferenças divididas
- 5 pontos $\longrightarrow$ construir $p_4(x)$

$$\begin{aligned} p_4(x) = f(x_0) &+ (x - x_0)\, f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)\, f[x_0, x_1, x_2] + \\ &+ (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \\ &+ (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)\, f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_4(x) = 0.32222 &+ (x - 2.1) \times 0.20200 + (x - 2.1)(x - 2.2) \times (-0.04450) + \\ &+ (x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3) \times 0.1000 + \\ &+ (x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3)(x - 2.4) \times (0.00833) \end{aligned}$$

- $\forall x \in [2.1, 2.5] \equiv I \;\; \exists c_x \in]2.1, 2.5[$:

$$E(x) = f(x) - p_4(x) = \frac{f^{(5)}(c_x)}{5!}(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_4)$$

E como $f^{(5)}(x) = \frac{24}{x^5 \ln(10)}$ é positiva e decrescente em I $\max_{x \in I} |f^{(5)}(x)| \leq 0.26$

$$|E(x)| \leq \frac{0.26}{5!} |(x - 2.1)(x - 2.2)(x - 2.3)(x - 2.4)(x - 2.5)|$$

- Para $x = 2.15$, $p_4(2.15) = 0.33243$ e $|E(2.15)| \leq 8 \times 10^{-8}$, mas só podemos escrever $f(2.15) \approx 0.33243$ (com 5 casas decimais, como os valores da tabela, e não de acordo com o erro de interpolação).

- Motivação:

  Vimos que a utilização de polinómios de grau elevado para interpolar uma função f num intervalo $[a, b]$ pode conduzir a erros muito grandes.

- Motivação:

  Vimos que a utilização de polinómios de grau elevado para interpolar uma função f num intervalo $[a, b]$ pode conduzir a erros muito grandes.

  Por outro lado a avaliação destes polinómios num ponto usando aritmética finita está sujeita a inevitáveis erros de arredondamento.

- **Motivação:**

  Vimos que a utilização de polinómios de grau elevado para interpolar uma função f num intervalo $[a, b]$ pode conduzir a erros muito grandes.

  Por outro lado a avaliação destes polinómios num ponto usando aritmética finita está sujeita a inevitáveis erros de arredondamento.

- **Ideia:**

  Dividir $[a, b]$ em vários subintervalos e aplicar interpolação polinomial em cada um dos subintervalos, i.e., fazer interpolação usando polinómios, de grau baixo, seccionalmente contínuos.

Interpolar o seguinte conjunto de pontos de uma função f:

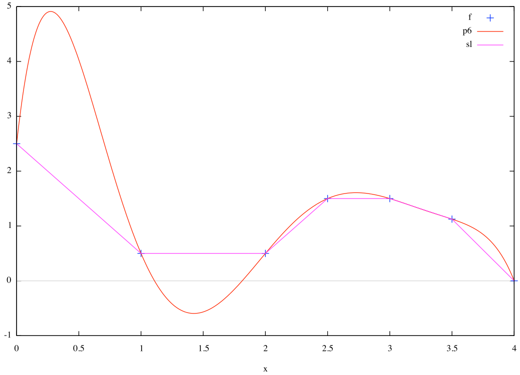
x_i	0	1	2	2.5	3	3.5	4
f_i	2.5	0.5	0.5	1.5	1.5	1.125	0

- usando interpolação polinomial - construir $p_6(x)$
- usando um polinómio de grau 1 em cada subintervalo, interpolação linear segmentada, também chamada de spline linear

Interpolar o seguinte conjunto de pontos de uma função f:

x_i	0	1	2	2.5	3	3.5	4
f_i	2.5	0.5	0.5	1.5	1.5	1.125	0

- usando interpolação polinomial - construir $p_6(x)$
- usando um polinómio de grau 1 em cada subintervalo, interpolação linear segmentada, também chamada de spline linear



Definição

Uma função S é um spline polinomial de grau m, $(m \geq 0)$ relativo às abcissas (nós) $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, se verificar as seguintes propriedades:

1. S coincide em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i], i = 1, \ldots n$ com um polinómio S_i de grau $\leq m$.
2. S é continuamente derivável até à ordem $m - 1$

Definição

Uma função S é um spline polinomial de grau m, $(m \geq 0)$ relativo às abcissas (nós) $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, se verificar as seguintes propriedades:

1. S coincide em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i], i = 1, \ldots n$ com um polinómio S_i de grau $\leq m$.
2. S é continuamente derivável até à ordem $m - 1$

Dado um conjunto de pontos de uma função f, $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$, $f_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$, interpolar f por um spline, S, de grau m, consiste em encontrar um spline de grau m tal que

$$S(x_i) = f_i, \; i = 0, 1, \ldots, n$$

Definição

Uma função S é um spline polinomial de grau m, $(m \geq 0)$ relativo às abcissas (nós) $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, se verificar as seguintes propriedades:

1. S coincide em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i], i = 1, \ldots n$ com um polinómio S_i de grau $\leq m$.
2. S é continuamente derivável até à ordem $m - 1$

Dado um conjunto de pontos de uma função f, $(x_i, f_i)_{i=0}^{n}$, $f_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$, interpolar f por um spline, S, de grau m, consiste em encontrar um spline de grau m tal que

$$S(x_i) = f_i, \; i = 0, 1, \ldots, n$$

Será que existe? Será que é único? Como se constrói? Qual o erro cometido na aproximação de $f(x)$ por $S(x)$?

Spline linear (ou spline de grau 1)

O spline linear S é tal que:

- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$
- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, com um polinómio de grau ≤ 1

O spline linear S é tal que:

- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$
- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, com um polinómio de grau ≤ 1

Como em cada um dos n subintervalos S coincide com um polinómio S_i, de grau ≤ 1, para definir S temos de determinar $2n$ coeficientes, que ficam completamente determinados pelas $2n$ equações:

$$\begin{cases} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1}, & i = 1, \ldots, n \\ S_i(x_i) = f_i, & i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

Spline linear (ou spline de grau 1)

O spline linear S é tal que:

- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$
- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, com um polinómio de grau ≤ 1

Como em cada um dos n subintervalos S coincide com um polinómio S_i, de grau ≤ 1, para definir S temos de determinar $2n$ coeficientes, que ficam completamente determinados pelas $2n$ equações:

$$\begin{cases} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1}, & i = 1, ..., n \\ S_i(x_i) = f_i, & i = 1, ..., n \end{cases}$$

$\Longrightarrow$ Logo o spline existe e é único.

Spline linear (ou spline de grau 1)

- Os polinómios S_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, são dados por

$$S_i(x) = \frac{x_i - x}{h_i} f_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_i} f_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i,$$

onde $h_i = x_i - x_{i-1}, \; i = 1, 2, \ldots, n$.

Spline linear (ou spline de grau 1)

- Os polinómios S_i, $i = 1, 2, ..., n$, são dados por

$$S_i(x) = \frac{x_i - x}{h_i} f_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_i} f_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i,$$

onde $h_i = x_i - x_{i-1}, \; i = 1, 2, ..., n$.

- A continuidade de S fica garantida pois

$$S_i(x_i) = S_{i+1}(x_i), \; i = 1, ..., n-1$$

Spline linear (ou spline de grau 1)

- Os polinómios S_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, são dados por

$$S_i(x) = \frac{x_i - x}{h_i} f_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_i} f_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i,$$

onde $h_i = x_i - x_{i-1}, \ i = 1, 2, \ldots, n$.

- A continuidade de S fica garantida pois

$$S_i(x_i) = S_{i+1}(x_i), \ i = 1, \ldots, n-1$$

- Se $f(x) \in C^2[a, b]$ então mostra-se que $\forall x \in [a, b]$

$$|f(x) - S(x)| \leq \frac{1}{8} M h^2$$

onde $M = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$ e $h = \max h_i, \ i = 1, 2, \ldots, n$.

Exercício:
Construir o spline linear que interpola o seguinte conjunto de dados de uma função f:
$\{(1,1),(2,\frac{1}{2}),(3,\frac{1}{3}),(4,\frac{1}{4})\}$

Spline linear. Exemplo

Exercício:
Construir o spline linear que interpola o seguinte conjunto de dados de uma função f:
$\{(1,1),(2,\frac{1}{2}),(3,\frac{1}{3}),(4,\frac{1}{4})\}$

- $n=3, \quad h_i=1, \quad i=1,2,3, \quad S(x)=\begin{cases} S_1(x), & 1\leq x\leq 2 \\ S_2(x), & 2\leq x\leq 3 \\ S_3(x), & 3\leq x\leq 4 \end{cases}$

Exercício:
Construir o spline linear que interpola o seguinte conjunto de dados de uma função f:
$\{(1,1),(2,\frac{1}{2}),(3,\frac{1}{3}),(4,\frac{1}{4})\}$

- $n=3, \quad h_i=1, \quad i=1,2,3, \quad S(x)=\begin{cases} S_1(x), & 1\le x\le 2 \\ S_2(x), & 2\le x\le 3 \\ S_3(x), & 3\le x\le 4 \end{cases}$

- $S(x)=\begin{cases} (2-x)+\frac{1}{2}(x-1), & 1\le x\le 2 \\ \\ \frac{1}{2}(3-x)+\frac{1}{3}(x-2), & 2\le x\le 3 \\ \\ \frac{1}{3}(4-x)+\frac{1}{4}(x-3), & 3\le x\le 4 \end{cases}$

Exercício:
Construir o spline linear que interpola o seguinte conjunto de dados de uma função f:
$\{(1,1),(2,\frac{1}{2}),(3,\frac{1}{3}),(4,\frac{1}{4})\}$

- $n=3, \quad h_i=1, \quad i=1,2,3, \quad S(x)=\begin{cases} S_1(x), & 1\leq x\leq 2\\ S_2(x), & 2\leq x\leq 3\\ S_3(x), & 3\leq x\leq 4\end{cases}$

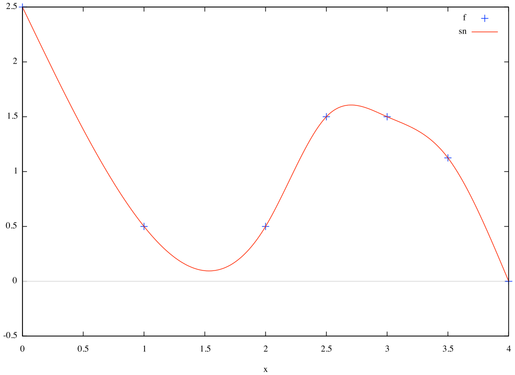
- $S(x)=\begin{cases} (2-x)+\frac{1}{2}(x-1), & 1\leq x\leq 2\\ \\ \frac{1}{2}(3-x)+\frac{1}{3}(x-2), & 2\leq x\leq 3\\ \\ \frac{1}{3}(4-x)+\frac{1}{4}(x-3), & 3\leq x\leq 4\end{cases}$

Para estimar $f(x), \quad x\in[a,b]$, temos de determinar qual o subintervalo a que x pertence, $\quad x_{i-1}<x<x_i$, e calcular $\quad f(x)\approx S(x)=S_i(x)$.

Vamos definir um spline muito usado ($m = 3$):

Spline cúbico $\in C^2[a,b] \Longrightarrow$ geralmente é uma função interpoladora muito boa do ponto de vista visual.

No exemplo inicial:



Spline cúbico

O spline cúbico S

- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \ldots n$, com um polinómio de grau ≤ 3
- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$ que possui primeira e segunda derivadas contínuas nos nós interiores, x_i, $i = 1, \ldots n-1$.

Spline cúbico

O spline cúbico S

- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \ldots n$, com um polinómio de grau ≤ 3
- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$ que possui primeira e segunda derivadas contínuas nos nós interiores, x_i, $i = 1, \ldots n - 1$.

Assim S é tal que

- S_i, $i = 1, \ldots, n$ é polinómio de grau 3 $\Longrightarrow$ $4n$ coeficientes

O spline cúbico S

- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \ldots n$, com um polinómio de grau ≤ 3
- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$ que possui primeira e segunda derivadas contínuas nos nós interiores, x_i, $i = 1, \ldots n-1$.

Assim S é tal que

- S_i, $i = 1, \ldots, n$ é polinómio de grau 3 $\Longrightarrow$ $4n$ coeficientes
- S interpola o conjunto de dados: $\Longrightarrow$ $2n$ condições

$$\begin{cases} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} & i = 1, \ldots, n \\ S_i(x_i) = f_i & i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

Spline cúbico

O spline cúbico S

- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \ldots n$, com um polinómio de grau ≤ 3
- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$ que possui primeira e segunda derivadas contínuas nos nós interiores, x_i, $i = 1, \ldots n-1$.

Assim S é tal que

- S_i, $i = 1, \ldots, n$ é polinómio de grau 3 $\Longrightarrow$ $4n$ coeficientes
- S interpola o conjunto de dados: $\Longrightarrow$ $2n$ condições

$$\begin{cases} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} & i = 1, \ldots, n \\ S_i(x_i) = f_i & i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

- S' e S'' são contínuas nos $n-1$ nós interiores $\Longrightarrow$ $2n-2$ condições

$$\begin{cases} S_i'(x_i) = S_{i+1}'(x_i) & i = 1, \ldots, n-1 \\ S_i''(x_i) = S_{i+1}''(x_i) & i = 1, \ldots, n-1 \end{cases}$$

Spline cúbico

O spline cúbico S

- coincide, em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \ldots n$, com um polinómio de grau ≤ 3
- é uma função contínua em $[x_0, x_n]$ que possui primeira e segunda derivadas contínuas nos nós interiores, x_i, $i = 1, \ldots n-1$.

Assim S é tal que

- S_i, $i = 1, \ldots, n$ é polinómio de grau 3 $\Longrightarrow$ $4n$ coeficientes
- S interpola o conjunto de dados: $\Longrightarrow$ $2n$ condições

$$\begin{cases} S_i(x_{i-1}) = f_{i-1} & i = 1, \ldots, n \\ S_i(x_i) = f_i & i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

- S' e S'' são contínuas nos $n-1$ nós interiores $\Longrightarrow$ $2n-2$ condições

$$\begin{cases} S_i'(x_i) = S_{i+1}'(x_i) & i = 1, \ldots, n-1 \\ S_i''(x_i) = S_{i+1}''(x_i) & i = 1, \ldots, n-1 \end{cases}$$

Portanto, temos de determinar $4n$ incógnitas (os coeficientes) e apenas $4n-2$ condições, logo o spline cúbico não é único, e temos de impôr mais 2 condições.

Construção do spline cúbico

- Sejam $M_0, ..., M_n$ valores tais que $M_i = S''(x_i), \ i = 0, 1, ...n$
- $S_i''(x)$ é polinómio de grau ≤ 1 em $[x_{i-1}, x_i], \ \ i = 1, ..., n \ \ \Longrightarrow$ pode escrever-se na forma
$$S_i''(x) = M_{i-1} \frac{x_i - x}{h_i} + M_i \frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$
  onde $h_i = x_i - x_{i-1}, \ \ i = 1, ..., n$

- Sejam $M_0, \ldots, M_n$ valores tais que $M_i = S''(x_i),\ i = 0, 1, \ldots n$
- $S_i''(x)$ é polinómio de grau ≤ 1 em $[x_{i-1}, x_i],\ \ i = 1, \ldots, n \ \Longrightarrow$ pode escrever-se na forma
$$S_i''(x) = M_{i-1}\frac{x_i - x}{h_i} + M_i\frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$
onde $h_i = x_i - x_{i-1},\ \ i = 1, \ldots, n$
- Integrando esta expressão duas vezes vem:
$$S_i(x) = M_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + c_i\frac{x_i - x}{h_i} + d_i\frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$
onde c_i e d_i são constantes de integração

- Sejam $M_0, \dots, M_n$ valores tais que $M_i = S''(x_i), \; i = 0, 1, \dots n$
- $S_i''(x)$ é polinómio de grau ≤ 1 em $[x_{i-1}, x_i], \quad i = 1, \dots, n \quad \Longrightarrow$ pode escrever-se na forma

$$S_i''(x) = M_{i-1}\frac{x_i - x}{h_i} + M_i\frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

  onde $h_i = x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, \dots, n$
- Integrando esta expressão duas vezes vem:

$$S_i(x) = M_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + c_i\frac{x_i - x}{h_i} + d_i\frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

  onde c_i e d_i são constantes de integração
- Estas constantes são determinadas pelas condições de interpolação

$$S_i(x_{i-1}) = f_{i-1}, \quad S_i(x_i) = f_i$$

  vindo:

$$c_i = f_{i-1} - M_{i-1}\frac{h_i^2}{6} \quad \text{e} \quad d_i = f_i - M_i\frac{h_i^2}{6}$$

Construção do spline cúbico

- Chega-se assim à seguinte expressão para $S_i(x)$:

$$S_i(x) =$$

$$M_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + (f_{i-1} - M_{i-1}\frac{h_i^2}{6})\frac{x_i - x}{h_i} + (f_i - M_i\frac{h_i^2}{6})\frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

Construção do spline cúbico

- Chega-se assim à seguinte expressão para $S_i(x)$:

$$S_i(x) =$$
$$M_{i-1}\frac{(x_i-x)^3}{6h_i}+M_i\frac{(x-x_{i-1})^3}{6h_i}+(f_{i-1}-M_{i-1}\frac{h_i^2}{6})\frac{x_i-x}{h_i}+(f_i-M_i\frac{h_i^2}{6})\frac{x-x_{i-1}}{h_i}$$

- Impondo a condição de continuidade da primeira derivada nos nós interiores

$$S_i'(x_i)=S_{i+1}'(x_i),\ i=1,\dots,n-1$$

obtem-se o seguinte sistema de $n-1$ equações lineares

$$\boxed{\frac{h_i}{6}M_{i-1}+\frac{h_i+h_{i+1}}{3}M_i+\frac{h_{i+1}}{6}M_{i+1}=\frac{f_{i+1}-f_i}{h_{i+1}}-\frac{f_i-f_{i-1}}{h_i},\quad i=1,\dots,n-1} \qquad (1)$$

para determinar $n+1$ incógnitas (os coeficientes $M_i,\ i=0,\dots n$). $\Longrightarrow$ Falta impôr mais 2 condições

Spline cúbico completo

Se forem conhecidos os valores das derivadas da função nos nós extremos

$$f_0' = f'(x_0) \;\text{ e }\; f_n' = f'(x_n)$$

impõe-se :

$$S_1'(x_0) = f_0'$$
$$S_n'(x_n) = f_n'$$

e juntam-se estas condições ao sistema (1). Estas condições podem escrever-se:

$$\boxed{\begin{array}{l} \frac{f_1 - f_0}{h_1} - \frac{h_1}{6} M_1 - \frac{h_1}{3} M_0 = f_0' \\ \frac{f_n - f_{n-1}}{h_n} + \frac{h_n}{6} M_{n-1} + \frac{h_n}{3} M_n = f_n' \end{array}}$$

O spline que se obtem nestas condições chama-se spline cúbico completo.

Spline cúbico natural

Se não houver outra informação é habitual juntar ao sistema (1) as seguintes condições (anulamento da segunda derivada nos nós extremos)

$$S_1''(x_0) = M_0 = 0$$
$$S_n''(x_n) = M_n = 0$$

e o spline que se obtem nestas condições chama-se spline cúbico natural.

Spline cúbico natural

Se não houver outra informação é habitual juntar ao sistema (1) as seguintes condições (anulamento da segunda derivada nos nós extremos)

$$S_1''(x_0) = M_0 = 0$$
$$S_n''(x_n) = M_n = 0$$

e o spline que se obtem nestas condições chama-se spline cúbico natural.

- Se $f(x) \in C^4[a,b]$ então mostra-se que $\forall x \in [a,b]$

$$|f(x) - S(x)| \leq \frac{5}{384} M h^4$$

onde $M = \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$ e $h = \max h_i, \; i = 1, 2, \ldots, n$.

Exercício:
Construir o spline cúbico natural que interpola o seguinte conjunto de dados de uma função f:
$\{(1,1),(2,\frac{1}{2}),(3,\frac{1}{3}),(4,\frac{1}{4})\}$

O sistema que determina o spline é
$$\begin{cases} \frac{1}{6}M_0 + \frac{2}{3}M_1 + \frac{1}{6}M_2 = \frac{1}{3} \\ \frac{1}{6}M_1 + \frac{2}{3}M_2 + \frac{1}{6}M_3 = \frac{1}{12} \\ M_0 = 0 \\ M_3 = 0 \end{cases}$$

cuja solução é : $M_0 = 0,\ M_1 = \frac{1}{2},\ M_2 = 0,\ M_3 = 0$

Exercício:
Construir o spline cúbico natural que interpola o seguinte conjunto de dados de uma função f:
$\{(1,1),(2,\frac{1}{2}),(3,\frac{1}{3}),(4,\frac{1}{4})\}$

O sistema que determina o spline é
$$\begin{cases} \frac{1}{6}M_0+\frac{2}{3}M_1+\frac{1}{6}M_2=\frac{1}{3} \\ \frac{1}{6}M_1+\frac{2}{3}M_2+\frac{1}{6}M_3=\frac{1}{12} \\ M_0=0 \\ M_3=0 \end{cases}$$

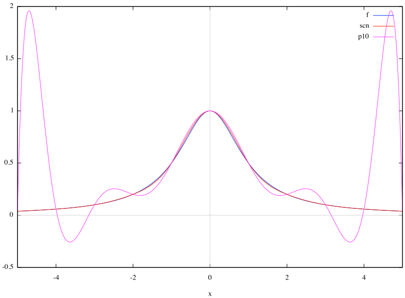
cuja solução é : $M_0=0,\ M_1=\frac{1}{2},\ M_2=0,\ M_3=0$

e então o spline é
$$S(x)=\begin{cases} \frac{1}{12}x^3-\frac{1}{4}x^2-\frac{1}{3}x+\frac{3}{2}, & 1\le x\le 2 \\ -\frac{1}{12}x^3+\frac{3}{4}x^2-\frac{7}{3}x+\frac{17}{6}, & 2\le x\le 3 \\ -\frac{1}{12}x+\frac{7}{12}, & 3\le x\le 4 \end{cases}$$

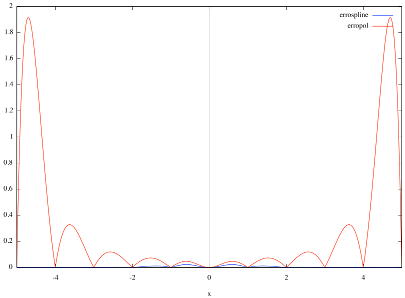
$\longrightarrow$ verificar que $S'(x)$ e $S''(x)$ são contínuas

Exercício: Interpolar $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in [-5, 5]$ em 11 pontos de abcissas igualmente espaçadas, por

- polinómio interpolador, $p10(x)$
- spline cúbico natural, $scn(x)$.



função f e aproximações $p10$ e scn



erros: $|f - p10|$, $|f - scn|$

Aproximação numérica no sentido dos mínimos quadrados

- Aproximação polinomial de uma função discreta.
- Aproximação não polinomial de uma função discreta.

Seja $f(x)$ uma função real da qual se conhece o valor num conjunto de $N+1$ pontos de abcissas distintas

$$(x_i, f_i)_{i=0}^{N}$$

Queremos aproximar $f(x)$ por um polinómio.

Seja $f(x)$ uma função real da qual se conhece o valor num conjunto de $N+1$ pontos de abcissas distintas

$$(x_i, f_i)_{i=0}^{N}$$

Queremos aproximar $f(x)$ por um polinómio.

Já construímos o polinómio $p_N(x)$ de grau $\leq N$ que interpola $f(x)$ naquele conjunto de pontos. No entanto

- os valores f_i estão, em geral, afetados de erros e por isso pode não fazer muito sentido obrigar a que $p_N(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)N$
- mostrámos que o erro cometido ao estimar $f(x)$ por $p(x)$ pode ser muito grande, principalmente para valores elevados de N.

Seja $f(x)$ uma função real da qual se conhece o valor num conjunto de $N+1$ pontos de abcissas distintas

$$(x_i, f_i)_{i=0}^{N}$$

Queremos aproximar $f(x)$ por um polinómio.

Já construímos o polinómio $p_N(x)$ de grau $\leq N$ que interpola $f(x)$ naquele conjunto de pontos. No entanto

- os valores f_i estão, em geral, afetados de erros e por isso pode não fazer muito sentido obrigar a que $p_N(x_i) = f_i, \;\; i = 0(1)N$
- mostrámos que o erro cometido ao estimar $f(x)$ por $p(x)$ pode ser muito grande, principalmente para valores elevados de N.

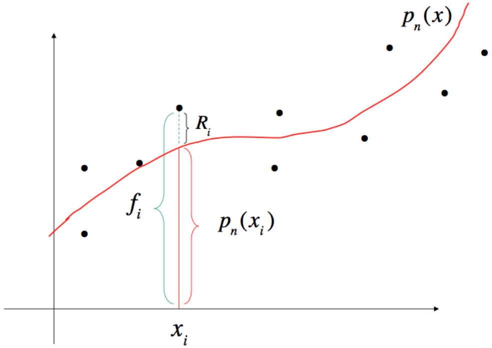
Uma alternativa é escolher um valor n, em geral $n \ll N$, e construir o polinómio de grau $\leq n$ que "melhor" aproxima aquele conjunto de pontos num sentido a definir. O sentido que vamos usar é o sentido dos mínimos quadrados.

Aproximação no sentido dos mínimos quadrados

Seja $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$, o polinómio que vai aproximar $(x_i, f_i)_{i=0}^{N}$

O resíduo cometido no ponto de abcissa x_i é

$$R_i \equiv f_i - p_n(x_i) = f_i - \sum_{k=0}^{n} a_k x_i^k, \quad i = 0(1)N$$



Aproximação no sentido dos mínimos quadrados

Determinar $a_0, a_1, \dots, a_n$, coeficientes de $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$, de forma a minimizar a função Φ:

$$\Phi(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^{N} R_i^2 = \sum_{i=0}^{N} (f_i - \sum_{k=0}^{n} a_k x_i^k)^2$$

O $p_n(x)$ resultante diz-se o polinómio de grau $\leq n$ que melhor se ajusta ao conjunto de pontos dado no sentido do método dos mínimos quadrados.

Determinar $a_0, a_1, \ldots, a_n$, coeficientes de $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$, de forma a minimizar a função Φ:

$$\Phi(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=0}^{N} R_i^2 = \sum_{i=0}^{N} (f_i - \sum_{k=0}^{n} a_k x_i^k)^2$$

O $p_n(x)$ resultante diz-se o polinómio de grau $\leq n$ que melhor se ajusta ao conjunto de pontos dado no sentido do método dos mínimos quadrados.

No ponto onde Φ é mínima o gradiente anula-se, isto é, $\dfrac{\partial \Phi}{\partial a_k} = 0, \; k = 0(1)n$

Determinar $a_0, a_1, \ldots, a_n$, coeficientes de $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$, de forma a minimizar a função Φ:

$$\Phi(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=0}^{N} R_i^2 = \sum_{i=0}^{N} (f_i - \sum_{k=0}^{n} a_k x_i^k)^2$$

O $p_n(x)$ resultante diz-se o polinómio de grau $\leq n$ que melhor se ajusta ao conjunto de pontos dado no sentido do método dos mínimos quadrados.

No ponto onde Φ é mínima o gradiente anula-se, isto é, $\dfrac{\partial \Phi}{\partial a_k} = 0, \; k = 0(1)n$

$$\Longrightarrow \frac{1}{2}\frac{\partial \Phi}{\partial a_k} = \sum_{i=0}^{N} R_i \frac{\partial R_i}{\partial a_k} = \sum_{i=0}^{N} R_i(-x_i^k) = \sum_{i=0}^{N} x_i^k \left(\sum_{j=0}^{n} a_j x_i^j - f_i \right) = 0, \quad k = 0(1)n$$

Determinar $a_0, a_1, \ldots, a_n$, coeficientes de $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$, de forma a minimizar a função Φ:

$$\Phi(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=0}^{N} R_i^2 = \sum_{i=0}^{N} (f_i - \sum_{k=0}^{n} a_k x_i^k)^2$$

O $p_n(x)$ resultante diz-se o polinómio de grau $\leq n$ que melhor se ajusta ao conjunto de pontos dado no sentido do método dos mínimos quadrados.

No ponto onde Φ é mínima o gradiente anula-se, isto é, $\dfrac{\partial \Phi}{\partial a_k} = 0, \; k = 0(1)n$

$$\Longrightarrow \frac{1}{2}\frac{\partial \Phi}{\partial a_k} = \sum_{i=0}^{N} R_i \frac{\partial R_i}{\partial a_k} = \sum_{i=0}^{N} R_i(-x_i^k) = \sum_{i=0}^{N} x_i^k \left(\sum_{j=0}^{n} a_j x_i^j - f_i \right) = 0, \quad k = 0(1)n$$

$$\Longleftrightarrow \boxed{\sum_{j=0}^{n} \left(\sum_{i=0}^{N} x_i^{k+j} \right) a_j = \sum_{i=0}^{N} x_i^k f_i \quad k = 0(1)n} \qquad (1)$$

sistema de equações normais, de ordem $(n+1) \times (n+1)$ que determina $p_n(x)$.

Definindo

$$X = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ \vdots \\ x^n \end{pmatrix}, \; a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \; X_i = \begin{pmatrix} 1 \\ x_i \\ x_i^2 \\ \vdots \\ x_i^n \end{pmatrix}, \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} p_n(x) = X^T \, a \\[2ex] R_i = f_i - X_i^T a, \quad i = 0(1)N \end{cases}$$

Definindo

$$X = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ \vdots \\ x^n \end{pmatrix}, a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, X_i = \begin{pmatrix} 1 \\ x_i \\ x_i^2 \\ \vdots \\ x_i^n \end{pmatrix}, \quad \Longrightarrow \begin{cases} p_n(x) = X^T\, a \\ \\ R_i = f_i - X_i^T a, \quad i = 0(1)N \end{cases}$$

A cada polinómio $p_n \in \mathbb{P}_n$ fica associado um vetor resíduo $R = (R_0, R_1, \ldots, R_N)^T$, e vamos determinar o polinómio que minimiza

$$\Phi(a) = ||R||_2^2 = \sum_{i=0}^{N} R_i^2$$

Versão matricial

Sendo

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_N \\ x_0^2 & x_1^2 & \dots & x_N^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \dots & x_N^n \end{pmatrix}, \quad A \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(N+1)}$$

então o vetor resíduo é dado por $R = f - A^T a$ e o sistema (1) escreve-se

$$AR = 0 \iff \left(AA^T\right)\, a = A\, f$$

(logo R é ortogonal às linhas de A, donde a designação de equações normais)

Versão matricial

Sendo

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_N \\ x_0^2 & x_1^2 & \dots & x_N^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \dots & x_N^n \end{pmatrix}, \quad A \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(N+1)}$$

então o vetor resíduo é dado por $R = f - A^T a$ e o sistema (1) escreve-se

$$AR = 0 \Longleftrightarrow \left(AA^T\right) a = A\, f$$

(logo R é ortogonal às linhas de A, donde a designação de equações normais)

Logo $p_n(x)$ fica determinado resolvendo

$$\boxed{\left(AA^T\right) a = A\, f}$$

Sendo

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_N \\ x_0^2 & x_1^2 & \dots & x_N^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \dots & x_N^n \end{pmatrix}, \quad A \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(N+1)}$$

então o vetor resíduo é dado por $R = f - A^T a$ e o sistema (1) escreve-se

$$AR = 0 \iff \left(AA^T\right)\ a = A\ f$$

(logo R é ortogonal às linhas de A, donde a designação de equações normais)

Logo $p_n(x)$ fica determinado resolvendo

$$\boxed{\left(AA^T\right)\ a = A\ f}$$

Nota: A matriz dos sistema de equações normais é simétrica pois $(AA^T)^T = AA^T$

Exercício: Determinar a equação da reta que melhor se ajusta, no sentido do método dos mínimos quadrados, ao conjunto de pontos:

x_i	1.4	1.8	2.2
f_i	0.7143	0.5556	0.4545

- $N = 2, \quad n = 1$
- $p_1(x) = a_0 + a_1 x,$ onde a_0 e a_1 são as soluções do sistema $AA^T a = Af$ onde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1.4 & 1.8 & 2.2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0.7143 \\ 0.5556 \\ 0.4545 \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

Exercício: Determinar a equação da reta que melhor se ajusta, no sentido do método dos mínimos quadrados, ao conjunto de pontos:

x_i	1.4	1.8	2.2
f_i	0.7143	0.5556	0.4545

- $N = 2, \quad n = 1$
- $p_1(x) = a_0 + a_1 x$, onde a_0 e a_1 são as soluções do sistema $AA^T a = Af$ onde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1.4 & 1.8 & 2.2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0.7143 \\ 0.5556 \\ 0.4545 \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

- Resolver

$$\begin{pmatrix} 3 & 5.4 \\ 5.4 & 10.04 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.7244 \\ 3.0000 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \begin{cases} a_0 = 1.1594 \\ a_1 = -0.3248 \end{cases}$$

Aproximação no sentido dos mínimos quadrados. Exemplo

Exercício: Determinar a equação da reta que melhor se ajusta, no sentido do método dos mínimos quadrados, ao conjunto de pontos:

x_i	1.4	1.8	2.2
f_i	0.7143	0.5556	0.4545

- $N = 2, \quad n = 1$
- $p_1(x) = a_0 + a_1 x,$ onde a_0 e a_1 são as soluções do sistema $AA^T a = Af$ onde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1.4 & 1.8 & 2.2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0.7143 \\ 0.5556 \\ 0.4545 \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

- Resolver

$$\begin{pmatrix} 3 & 5.4 \\ 5.4 & 10.04 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.7244 \\ 3.0000 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \begin{cases} a_0 = 1.1594 \\ a_1 = -0.3248 \end{cases}$$

- Logo a reta é $p_1(x) = 1.1594 - 0.3248x$

Nota: $\displaystyle\sum_{i=0}^{2} R_i^2 = 5.5 \times 10^{-4}$

Existência e unicidade da aproximação polinomial no sentido dos mínimos quadrados

Teorema 1

Se as abcissas $x_0, x_1 \ldots, x_N$ forem todas distintas então o sistema das equações normais tem solução única.

Dem: basta mostrar que a característica de A é $n+1$, portanto AA^T é definida positiva, logo regular e, portanto, o sistema tem solução única.

Existência e unicidade da aproximação polinomial no sentido dos mínimos quadrados

Teorema 1

Se as abcissas $x_0, x_1 \ldots, x_N$ forem todas distintas então o sistema das equações normais tem solução única.

Dem: basta mostrar que a característica de A é $n+1$, portanto AA^T é definida positiva, logo regular e, portanto, o sistema tem solução única.

Teorema 2

O polinómio cujo vetor dos coeficientes é a solução do sistema de equações normais é a melhor aproximação da função $f(x)$ no conjunto de pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^N$, no sentido do método dos mínimos quadrados

Dem: basta mostrar que $\Phi(a^* + h) > \Phi(a^*)$ onde a^* é a solução do sistema de equações normais.

Se os valores $f_i, \;\; i = 0(1)N$ forem obtidos por observação física podemos afectá-los de um peso $w_i, \;\; w_i = w(x_i) \geq 0$ que traduza a confiança da observação. Neste caso a função a minimizar fica

$$\Phi = \Phi(a) = \sum_{i=0}^{N} w_i R_i^2$$

e o sistema de equações normais é

$$\sum_{j=0}^{n} \left(\sum_{i=0}^{N} w_i \; x_i^{k+j} \right) \; a_j = \sum_{i=0}^{N} w_i \; x_i^k f_i \quad k = 0(1)n$$

ou, na forma matricial, minimizar

$$\Phi = \Phi(a) = ||DR||_2^2$$

e o sistema fica

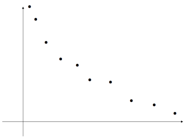
$$(AWA^T)a = (AW)f$$

onde

$$W = \begin{pmatrix} w_0 & & & \\ & w_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & w_N \end{pmatrix}, \;\; \text{e} \;\; D = \begin{pmatrix} \sqrt{w_0} & & & \\ & \sqrt{w_1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{w_N} \end{pmatrix}$$

Aproximação não polinomial no sentido dos mínimos quadrados

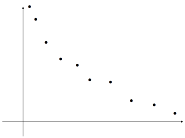
Pode não fazer sentido ajustar um conjunto de pontos por um polinómio. Por exemplo no caso



não existe nenhum polinómio que tenda para 0 quando $x \longrightarrow \infty$ e que tenda para ∞ quando $x \longrightarrow 0$. Vamos então generalizar o conjunto de funções aproximantes.

Aproximação não polinomial no sentido dos mínimos quadrados

Pode não fazer sentido ajustar um conjunto de pontos por um polinómio. Por exemplo no caso



não existe nenhum polinómio que tenda para 0 quando $x \longrightarrow \infty$ e que tenda para ∞ quando $x \longrightarrow 0$. Vamos então generalizar o conjunto de funções aproximantes.

Consideremos um conjunto de funções $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$. Queremos construir a combinação linear destas funções (polinómio generalizado)

$$p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)$$

que melhor ajusta, no sentido do método dos mínimos quadrados, o conjunto de pontos $(x_i, f_i)_{i=0}^{N}$

Generalização

A função a minimizar é agora

$$\Phi = \Phi(a) = \sum_{i=0}^{N} w_i R_i^2$$

onde

$$R_i \equiv f_i - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) \quad i = 0(1)N$$

e o sistema de equações normais que determina $a_0, a_1, \ldots, a_n$ é

$$\sum_{j=0}^{n} \left(\sum_{i=0}^{N} w_i \, \varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i) \right) a_j = \sum_{i=0}^{N} w_i \, \varphi_k(x_i) f_i \quad k = 0(1)n$$

ou, na forma matricial,

$$\boxed{\left(AWA^T\right)\ a = (AW)\ f}$$

onde

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_0(x_1) & \dots & \varphi_0(x_N) \\ \varphi_1(x_0) & \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_1(x_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_n(x_0) & \varphi_n(x_1) & \dots & \varphi_n(x_N) \end{pmatrix}$$

Para que exista o polinómio generalizado as linhas de A terão de ser linearmente independentes. Então $\det(AWA^T) \neq 0$ e o polinómio generalizado existe e é único.