UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA - UFSC
CENTRO TECNOLÓGICO - CTC
DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA E ESTATÍSTICA - INE

Capítulo sobre

Aproximação de funções por Ajuste de Curvas, por Séries e Funções Racionais

Autores: Prof. Sérgio Peters
Acad. Andréa Vergara da Silva

e-mail: sergio.peters@ufsc.br

Florianópolis, 2013.

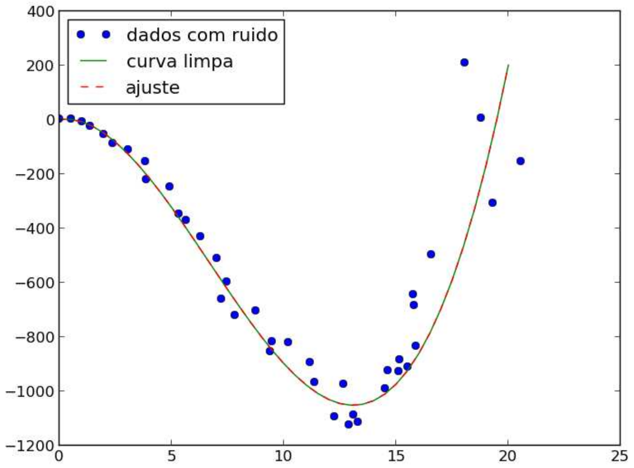
Capítulo 6 - Aproximação por Ajuste, Séries e por Funções Racionais

6.1). Aproximação por Ajuste de Curvas:

No capítulo anterior, abordamos a aproximação da função tabelada (x_k,y_k), com $y_k = f(x_k)$, por interpolação polinomial, interpolação por Splines cúbicas e Curvas de Bezier.

x_k	x_1	...	x_m
$y_k = f(x_k)$	y_1	...	y_m

Contudo, quando a função tabelada for oriunda de experimentos, coleta de dados ... , desde que não caracterize caminhos, nenhuma das técnicas anteriores é adequada.



m=41 pontos experimentais.

figura 1 - Exemplo de distribuição de dados obtidas experimentalmente.

Pode-se observar no exemplo da figura 1 que os 'm' pontos seguem uma tendência, caracterizando o seu comportamento, nestes casos é preferível escolher uma função que represente esta tendência, ao invés de passar uma função interpoladora que passe sobre todos os m pontos.

Para isto deve-se observar o seguinte:

(1º). Em experimentos tem-se, geralmente, uma grande quantidade de pontos coletados;
(2º). Alguns pontos coletados podem estar afetados por erros inerentes (de observação, calibragem, etc,...) e que não devem afetar a aproximação;
(3º). A plotagem dos pontos pode sugerir uma função com tendência conhecida e que não seja polinomial.

<u>Definição 1</u>: Uma função de ajuste é uma função com tendência previamente conhecida e que mais se aproxima de todos os pontos (x_k,y_k), k=1,2,...,m, e não, necessariamente, os contém.

Para quantificar a curva que "mais se aproxima de todos os pontos", pode-se recorrer a minimização dos desvios os pontos tabelados a curva ajustada.

<u>Definição 2</u>: Para uma função experimental tabelada (x_k,y_k), k=1,2,...,m, e uma representante de sua tendência y = g(x), denomina-se de desvio local d_k a seguinte expressão:

$$d_k = g(x_k) - y_k$$

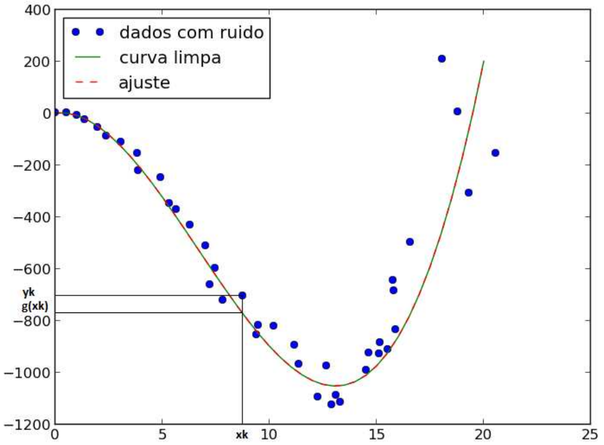


figura 2 – Exemplo de desvio local d_k em x_k.

Agora, vamos tentar obter g(x) de modo que:

(i). $\sum_{k=1}^{m} d_k$ seja mínima:

Nesse critério os valores de d_k podem se cancelar, mesmo se tiverem valores altos, se o sinais forem contrários.

Então não é uma forma adequada, pois é ambígua, não distingue o bom ajuste do ruim. Existem várias curvas que satisfazem o critério (i).

(ii). $\sum_{k=1}^{m} |d_k|$ seja mínima:

Também uma forma ambígua, que não distingue dentre os ajustes bom e ruim, e não permite minização.

(iii). $\sum_{k=1}^{m} d_k^2$ seja mínima:

Com esta soma quadrática dos desvios, tem-se as seguintes características:

- Desaparece o sinal
- Enfatizam-se os grandes desvios
- Minimizam-se os pequenos desvios
- Não é ambígua, só existe uma função g(x) que satisfaça este critério

Portanto com este critério se consegue distinguir o bom ajuste do ruim.

Por exemplo,

Reportando-se aos casos visualizados na figura 4 tem-se:

(4i) $\sum_{k=1}^{m} d_k = 25$

(4ii) $\sum_{k=1}^{m} d_k = 17$

6.1.1). Método dos Mínimos Quadrados para Ajuste a Curvas Polinomiais:

Para a função tabelada de m pontos abaixo:

x_k	x_1	x_2	...	x_m
$y_k = f(x_k)$	y_1	y_2	...	y_m

pode-se propor o ajuste dos pontos a um polinômio Pn(x), de grau n (n<m):

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

e $$d_k = P_n(x_k) - y_k = a_0 + a_1 x_k + ... + a_n x_k^n - y_k$$

Então,

$$\sum_{k=1}^{m} d_k^2 = \sum_{k=1}^{m} \left[a_0 + a_1 x_k + ... + a_n x_k^n - y_k\right]^2$$

E´ necessário agora minimizar $\sum_{k=1}^{m} d_k^2$, que é uma função dos coeficientes do polinômio, dada por $\varphi(a_0, a_1, a_2, ..., a_n)$

$$\varphi(a_0, a_1, a_2, ..., a_n) = \sum_{k=1}^{m} d_k^2 = \sum_{k=1}^{m} \left[a_0 + a_1 x_k + ... + a_n x_k^n - y_k\right]^2$$

Para minimizar $\varphi(a_0, a_1, a_2, ..., a_n)$, primeiramente determinam-se os pontos críticos da seguinte forma:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial a_1} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial a_2} = 0, \quad ... \quad \frac{\partial \varphi}{\partial a_n} = 0$$

onde

$$\frac{\partial \varphi}{\partial a_0} = \sum_{k=1}^{m} 2\left[a_0 + a_1 x_k + ... + a_n x_k^n - y_k\right].1 = 0$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial a_1} = \sum_{k=1}^{m} 2\left[a_0 + a_1 x_k + ... + a_n x_k^n - y_k\right].x_k = 0$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a_2} = \sum_{k=1}^{m} 2\left[a_0 + a_1x_k + \ldots + a_nx_k^n - y_k\right].x_k^2 = 0$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a_n} = \sum_{k=1}^{m} 2\left[a_0 + a_1x_k + \ldots + a_nx_k^n - y_k\right].x_k^n = 0$$

Dividindo as expressões anteriores por dois e desenvolvendo os 'm' somatórios tem-se, por exemplo,

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a_0} \Rightarrow \begin{cases} a_0 + a_1x_1 + \ldots + a_nx_1^n - y_1 + \\ a_0 + a_1x_2 + \ldots + a_nx_2^n - y_2 + \\ \qquad\vdots \\ a_0 + a_1x_m + \ldots + a_nx_m^n - y_m = 0 \end{cases}$$

Resultando

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a_0} \Rightarrow m.a_0 + \left(\sum_{k=1}^{m} x_k\right)a_1 + \left(\sum_{k=1}^{m} x_k^2\right)a_2 + \cdots + \left(\sum_{k=1}^{m} x_k^n\right)a_n = \sum_{k=1}^{m} y_k$$

Desenvolvendo as demais expressões e reescrevendo em forma de sistema linear, tem-se:

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_k & \sum x_k^2 & \cdots & \sum x_k^n \\ \sum x_k & \sum x_k^2 & \sum x_k^3 & \cdots & \sum x_k^{n+1} \\ & & \vdots & & \\ \sum x_k^n & \sum x_k^{n+1} & \sum x_k^{n+2} & \cdots & \sum x_k^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_k \\ \sum x_k y_k \\ \vdots \\ \sum x_k^n y_k \end{bmatrix} \qquad (*)$$

Obs.: Entenda-se $\sum x_k$ como $\sum_{k=1}^{m} x_k$.

A solução deste sistema linear (n+1)x(n+1) equações fornece os n+1 coeficientes de $P_n(x)$ com o menor desvio quadrátrico $\sum_{k=1}^{m} d_k^2$.

Faz-se necessário verificar qual é o grau m mais adequado ao ajuste de Pm(x) ao conjunto de pontos tabelados.

Ex. Ajuste o conjunto de pontos tabelados abaixo a uma reta e estime f(5) e f(10).

x_k	1	3	4	6	8
$y_k = f(x_k)$	0	1	2	4	5

Solução:

Temos m = 5 pontos e o grau do polinômio ajustador n = 1.

$P_1(x) = a_0 + a_1 x$

Aplicando o sistema (*)

$$\begin{bmatrix} 5 & 22 \\ 22 & 126 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 75 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} a_0 = -0.9458 \\ a_1 = \ \ 0.7603 \end{cases}$$

$P_1(x) = -0.9458 + 0.7603\ x$

$f(5) \cong P_1(5) = 2.85$ avaliação por divisão sintética ou por Horner
$f(10) \cong P_1(10) = 6.65$

Deve-se analisar qual seria a maneira mais eficiente de resolver o sistema (*), neste sentido verifica-se que o sistema (*) é de pequeno porte e formado por uma matriz densa de coeficientes, o que sugere a utilização de um método direto para resolução. Adicionalmente observa-se que o sistema (*) é simétrico ($a_{ij} = \sum_{k=1}^{m} x_k^{i+j-2}$) e que normalmente este é considerado um sistema mal condicionado. O mal condicionamento do sistema (*) é acentuado com a proximidade numérica entre os valores de x_k.

No sistema formado no exemplo anterior o condicionamento da matriz A de coeficientes pode ser dada por:

$$\|A\| = \frac{|\det(A)|}{\alpha_1 \alpha_2} \quad \text{onde} \quad \alpha_i = \sqrt{\sum_{j=1}^{m} a_{ij}^2}$$

$\|A\| = 0{,}05$

Portanto, o sistema do exemplo anterior é mal condicionado, o que sugere um método específico para sua resolução.

No caso de sistemas de equações mal condicionados é recomendado que se utilize um método de decomposição LU. Neste caso o método de Cholesky é particularmente interessante para a resolução destes sistemas com matriz de coeficientes simétricas e positivas definida.

Ex.: Para

x_k	0	0,25	0,5	0,75	1,0
$y_k = f(x_k)$	1	1,284	1,6487	2,117	2,7183

Estime f(0,6) através de:

a). ajuste linear;
b). ajuste parabólico.
Decida sobre qual é o resultado mais confiável.

Solução:

a). Ajuste Linear: n = 1 e m = 5 $\Rightarrow$ $p_1(x) = a_0 + a_1 x$

Montando o sistema (*) de equações tem-se

$$\begin{bmatrix} 5 & 2,5 \\ 2,5 & 1,875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8,768 \\ 5,4514 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} a_0 = \ 0.8997 \\ a_1 = \ 1,7084 \end{cases} \text{(Método de Cholesky)}$$

$p_1(x) = 0,8997 + 1,7084\ x \ \Rightarrow$ melhor reta possível

$f(0,6) \cong p_1(0,6) = 1,9247$

b). Ajuste parabólico: $n = 2$ e $m = 5 \Rightarrow p_1(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

De (*) tem-se

$$\begin{bmatrix} 5 & 2,5 & 1,875 \\ 2,5 & 1,875 & 1,5625 \\ 1,875 & 1,5625 & 1,3828 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8,768 \\ 5,4514 \\ 4,4015 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} a_0 = \ 0.8997 \\ a_1 = \ 1,7084 \\ a_2 = 0,8437 \end{cases} \text{(Método de Cholesky)}$$

$p_2(x) = 0,8997 + 1,7084.x + 0,8437.x^2 \ \Rightarrow$ melhor parábola possível

$f(0,6) \cong p_2(0,6) = 1,82719$

Via de regra, o resultado mais confiável é o da curva polinomial na qual ocorre o menor desvio total $D = \sum_{k=1}^{m} d_k^2$. Para se ter um padrão de comparação, normalmente adota-se o valor normalizado do desvio total, dado por:

$$D = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} d_k^2$$

Neste exemplo, tem-se

Para a reta $\Rightarrow$ D = 0,00800
e para a parábola $\Rightarrow$ D = 0,00005

Conclusão: O resultado considerado mais confiável é o da parábola, por ter o menor desvio total em relação aos pontos tabelados. Esta conclusão não é válida em casos de polinomiais com grandes variações de curvatura, existentes em polinomiais de grau elevado.

O ponto crítico determinado só pode ser um ponto de mínimo desvio, pois por exclusão, não pode ser um ponto de máximo desvio, uma vez que sempre é possível obter-se uma nova função ajustadora mais longe dos pontos experimentais e assim nunca podemos atingir um ponto de máximo desvio quadrático, sempre haverá uma curva mais longe dos pontos experimentais.
Por outro lado, pode-se calcular a matriz Hessiana, com as derivadas de 2ª ordem:

$$H_1 = \left| \frac{\partial^2 D(a_0, a_1, \ldots, a_n)}{\partial a_0^2} \right|_{a_0} = m > 0$$

$$H_2 = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial^2 D(a_0, a_1, \dots, a_n)}{\partial a_0^2} & \dfrac{\partial^2 D(a_0, a_1, \dots, a_n)}{\partial a_0\, \partial a_1} \\ \dfrac{\partial^2 D(a_0, a_1, \dots, a_n)}{\partial a_1\, \partial a_0} & \dfrac{\partial^2 D(a_0, a_1, \dots, a_n)}{\partial a_1^2} \end{vmatrix}_{(a_0,a_1)} = \begin{vmatrix} m & \sum_{k=1}^{m} x_k \\ \sum_{k=1}^{m} x_k & \sum_{k=1}^{m} x_k^2 \end{vmatrix} > 0$$

$$H_3 = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_0^2} & \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_0\, \partial a_1} & \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_0\, \partial a_2} \\ \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_1\, \partial a_0} & \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_1^2} & \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_1\, \partial a_2} \\ \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_2\, \partial a_0} & \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_2\, \partial a_1} & \dfrac{\partial^2 D(a_0,a_1,\dots,a_n)}{\partial a_2^2} \end{vmatrix}_{(a_0,a_1,a_2)} = \begin{vmatrix} m & \sum_{k=1}^{m} x_k & \sum_{k=1}^{m} x_k^2 \\ \sum_{k=1}^{m} x_k & \sum_{k=1}^{m} x_k^2 & \sum_{k=1}^{m} x_k^3 \\ \sum_{k=1}^{m} x_k^2 & \sum_{k=1}^{m} x_k^3 & \sum_{k=1}^{m} x_k^4 \end{vmatrix} > 0$$

:

E assim por diante, se $H_1>0$, $H_2>0$, ..., $H_n>0$, então A matriz H é positiva definida e o ponto crítico obtido $(a_0, a_1, a_2, \dots, a_n)$ é um ponto de mínimo.

6.1.2 - Ajuste por Mínimos Quadrados a Funções **não Polinomiais:**

Quando a plotagem, ou outra técnica, sugerir que o conjunto de pontos

x_k	x_1	x_2	...	x_m
$y_k = f(x_k)$	y_1	y_2	...	y_m

tem tendência não polinomial, o ajuste poderá ser efetuado por:

1°). Transformação de Variáveis:

Através de artifícios algébricos (mudança de variáveis) transformar a não polinomial em uma polinomial, resolver via (*) e posteriormente retornar a família de origem.

Exemplos:

a). Exponenciais: $y = a\, b^x$ (b = acelerador ou desacelerador exponencial)

$$\ln(y) = \ln(a) + x\ \ln(b)$$

Fazendo $\ln(y) = z$; $\ln(a) = a_0$; $\ln(b) = a_1$ tem-se

$z = a_0 + a_1 x$ que é um polinômio de 1° grau em (x_k, z_k)

Promove-se o ajuste linear ao conjunto de pontos (x_k, z_k), onde $z_k = \ln(y_k)$, para se determinar a_0 e a_1. Obtidos os coeficientes a_0 e a_1 do polinômio recuperam-se os valores de a e b através de suas relações:

$$a = e^{a_0}$$
$$b = e^{a_1}$$

Exemplo:

Ajuste a tabela

x_k	1	3	4	6
y_k	2,5	13	22	36

a uma curva exponencial do tipo $y = a\,b^x$.
Estime f(2,5) e avalie o valor de x correspondente a y = 50.

Solução:

$$y = a\,b^x \;\Rightarrow\; \ln(y) = \ln(a) + x\,\ln(b)$$

Montando o sistema para (x_k,ln(y_k)) tem-se

$$\begin{bmatrix} 4 & 14 \\ 14 & 62 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10,155 \\ 42,473 \end{bmatrix} \;\Rightarrow\; \begin{cases} a_0 = 0.673 \\ a_1 = 0,533 \end{cases}$$

Retornando aos valores de a e b tem-se:

$$a = e^{0,673} = 1,960$$
$$b = e^{0,533} = 1,704$$

$$y = 1,96\;(1,704)^x$$

$$f(2,5) = 1,96\;(1,704)^{2,5} = 7,429$$

$$50 = 1,96\;(1,704)^x \;\Rightarrow\; x = 6,077$$

b). Geométricas: $y = a\,x^b$ com $b \in \Re$

$$\ln(y) = \ln(a) + b\,\ln(x)$$

Fazendo $\ln(y) = z$; $\ln(a) = a_0$; $b = a_1$ e $\ln(x) = t$, tem-se

$z = a_0 + a_1 t$ que é um polinômio de 1° grau em (t_k, z_k).

Promove-se o ajuste linear ao conjunto de pontos (t_k, z_k), onde $t_k = \ln(x_k)$ e $z_k = \ln(y_k)$, para se determinar a_0 e a_1. Obtidos os coeficientes a_0 e a_1 do polinômio recuperam-se os valores de a e b através de suas relações:

$$a = e^{a_0}$$
$$b = a_1$$

b). Hipérboles: $y = \dfrac{1}{a_0 + a_1 x}$

$$\frac{1}{y} = a_0 + a_1 x$$

Fazendo $1/y = z$; tem-se

$z = a_0 + a_1 x$ que é um polinômio de 1° grau em (x_k, z_k).

Promove-se o ajuste linear ao conjunto de pontos (x_k, z_k), onde $z_k = 1/y_k$, para se determinar a_0 e a_1.

2°). Dedução para uma forma não polinomial:

A exemplo do efetuado para funções polinomiais pode-se deduzir uma função própria representativa dos pontos tabelados.

Exemplos:

a). Ajuste de 'm' pontos tabelados a uma curva do tipo:

$g(x) = a\,x^2 + b\ln(x)$ (exemplo com coeficiente ‘a’ e ‘b’ lineares)

Note que nenhuma transformação de variáveis gera uma função polinomial, por isso para obter procede-se a minimização do desvio quadrático total D que é uma função dos parâmetros (a,b):

$$\varphi(a,b) = \sum_{k=1}^{m} d_k^2 = \sum_{k=1}^{m} \left[a x_k^2 + b\ln(x_k) - y_k \right]^2$$

Minimizando $\varphi(a,b)$ em relação a (a, b), tem-se

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial\varphi}{\partial b} = 0$$

onde

$$\frac{\partial\varphi}{\partial a} = \sum_{k=1}^{m} 2\left[a x_k^2 + b\ln(x_k) - y_k \right] . x_k^2 = 0$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial b} = \sum_{k=1}^{m} 2\left[a x_k^2 + b\ln(x_k) - y_k \right] . \ln(x_k) = 0$$

$$\begin{cases} \left(\sum x_k^4\right) a + \left(\sum (x_k^2 \ln x_k)\right) b = \sum (y_k x_k^2) \\ \left(\sum (x_k^2 \ln x_k)\right) a + \left(\sum (\ln x_k)^2\right) b = \sum (y_k \ln x_k) \end{cases}$$

Note que o sistema acima é **linear**, pois a função representativa $g(x) = a\,x^2 + b\ln(x)$ é linear em relação aos coeficientes a e b.

b). Ajuste de 'm' pontos tabelados a uma curva do tipo:

$h(x) = a\,x^2 + \ln(bx)$ (exemplo com coeficiente ‘a’ e ‘b’ lineares)

Note que também nenhuma transformação de variáveis gera uma função polinomial, por isso procede-se a minimização do desvio quadrático total D que é uma função dos parâmetros (a,b):

$$\varphi(a,b) = \sum_{k=1}^{m} d_k^2 = \sum_{k=1}^{m} \left[ax_k^2 + \ln(bx_k) - y_k\right]^2$$

Minimizando $\varphi(a,b)$ em relação a 'a' e 'b', determina-se as derivadas de φ em relação a 'a' e 'b', e gera-se um sistema **não linear** em relação aos coeficientes (a,b), pois as funções derivadas, $h_1(a,b)$ e $h_2(a,b)$, são não lineares em relação 'a' e 'b'.

$$\frac{\partial\varphi(a,b)}{\partial a} = 2.\sum_{k=1}^{m} \left[ax_k^2 + \ln(bx_k) - y_k\right].\left[x_k^2\right] = 0$$

$$\frac{\partial\varphi(a,b)}{\partial b} = 2.\sum_{k=1}^{m} \left[ax_k^2 + \ln(bx_k) - y_k\right].\left[\frac{x_k}{bx_k}\right] = 0$$

Nesses casos temos que determinar os valores de 'a' e 'b' pelo método de Newton, a partir de um valor inicial (a^o,b^o):

$$\begin{cases} h_1(a,b) = \sum_{k=1}^{m} \left[ax_k^2 + \ln(bx_k) - y_k\right].\left[x_k^2\right] = 0 \\ h_2(a,b) = \sum_{k=1}^{m} \left[ax_k^2 + \ln(bx_k) - y_k\right].\left[\frac{1}{b}\right] = 0 \end{cases}$$

Exercício em computador:

A equação de estado de **Redlich–Kwong**, permite relacionar propriedades termodinâmicas de gases reais, como o ar, por exemplo, com **P como variavel depentente** de v e T:

$$\boldsymbol{P(v,T)} = \frac{\boldsymbol{R*T}}{\boldsymbol{(v-b)}} - \frac{\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{\sqrt{T}.v.(v+b)}} \qquad (1)$$

Onde R é a constante universal dos gases = 8,314 (J)/(mol.K) e os valores de 'a' e 'b' são parâmetros de cada gás, que podem ser determinados a partir de valores de propriedades físicas do gás: P,v,T medidos experimentantalmente.

Como toda medição experimental possui erros "inerentes", então procedemos uma série de 'm' medições com o intuito compensar os erros de uma medida para outra. Nesse exemplo, foram efetuadas 20 medições, descartadas 2 e serão consideradas m=18 medições efetivas para a determinação dos parâmetros 'a' e 'b' do gás, conforme segue:

```
m=18 % Número de pontos experimentais
v=[9.0  8.5  8.0   7.5  7.0  6.5  6.0  5.5  5.0   9.0   8.5   8.0   7.5   7.0   6.5   6.0  5.5  5.0 ]  %v(m3/mol)
T=[300  310  320  340  360  370  380  390  400   410   420   440   460   470   480   490  500  510 ]  % T (K)
P=[277.4415  303.5736  332.9762  377.4045  428.1888  473.9876  527.4325  590.6120  666.4529
    379.1701  411.2932  457.8422  510.6061  559.0243  614.9029  680.1102  757.1948  849.7274]   % P (Pa)
```

Se tivessemos 2 pontos obtidos com exatidão, poderíamos substitui-los na eq. (1) de **Redlich–Kwong**, gerando 2 equações não lineares, conforme abaixo:

$$F_1(a,b) = \frac{R*T1}{(v1-b)} - \frac{a}{\sqrt{T1}.v1.(v1+b)} - P1 = 0 \quad \text{e} \quad F_2(a,b) = \frac{R*T2}{(v2-b)} - \frac{a}{\sqrt{T2}.v2.(v2+b)} - P2 = 0$$

e determinar os 2 valores incógnitas, ‘a’ e ‘b’, usando o Método de Newton, mas ao invés de 2 pontos exatos, temos m=18 experimentais, que podem compensar os seus erros pela repetição do experimento.

Assim, vamos usar o método de ajuste dos parâmetros 'a' e 'b' pela minimização do desvio quadrático entre $\boldsymbol{P(v,T)} = \frac{\boldsymbol{R*T}}{(\boldsymbol{v-b})} - \frac{\boldsymbol{a}}{\sqrt{\boldsymbol{T}}.\boldsymbol{v}.(\boldsymbol{v+b})}$ calculado em cada ponto (v(i),T(i)) e o valor efetivamente medido de P(i), com i=1 a m.

Então a função desvio total quadrático fica, como na eq. (2) abaixo:

$$\boldsymbol{D(a,b)} = \sum_{k=1}^{m}\left(\frac{R*T(k)}{(v(k)-b)} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k).(v(k)+b)} - P(k)\right)^{2} \quad (2)$$

Para determinar os parâmetros 'a' e 'b', vamos obter o ponto crítico de D em relação a 'a' e 'b':

$$\frac{\partial D(a,b)}{\partial a} = 2.\sum_{k=1}^{m}\left(\frac{R*T(k)}{(v(k)-b)} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k).(v(k)+b)} - P(k)\right)^{1}.\left(-\frac{1}{\sqrt{T(k)}.v(k)(v(k)+b)}\right) = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial D(a,b)}{\partial b} = 2.\sum_{k=1}^{m}\left(\frac{R*T(k)}{(v(k)-b)} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k).(v(k)+b)} - P(k)\right)^{1}.\left(R*T(k).\frac{(-1).(-1)}{(v(k)-b)^2} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k)}.\frac{(-1)}{(v(k)+b)^2}\right) = 0 \quad (4)$$

Então, determine 'a' e 'b', resolvendo as duas equações não lineares abaixo:

$$\boldsymbol{f1(a,b)} = \sum_{k=1}^{m}\left(\frac{R*T(k)}{(v(k)-b)} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k).(v(k)+b)} - P(k)\right) .\left(-\frac{1}{\sqrt{T(k)}.v(k)(v(k)+b)}\right) = 0 \quad (5)$$

f1=f1+(R*T(i)/(v(i)-x(2))-x(1)/(sqrt(T(i))*v(i)*(v(i)+x(2)))-P(i))*(-1./(sqrt(T(i))*v(i)*(v(i)+x(2))));

$$\boldsymbol{f2(a,b)} = \sum_{k=1}^{m}\left(\frac{R*T(k)}{(v(k)-b)} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k).(v(k)+b)} - P(k)\right) .\left(R*T(k).\frac{1}{(v(k)-b)^2} + \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k)}.\frac{1}{(v(k)+b)^2}\right) = 0 \quad (6)$$

f2=f2+(R*T(i)/(v(i)-x(2))-x(1)/(sqrt(T(i))*v(i)*(v(i)+x(2)))-P(i))*(+R*T(i)/(v(i)-x(2))^2+x(1)/(sqrt(T(i))*v(i)*(v(i)+x(2))^2));

Sugestão: aplique o Método de Newton, com derivadas calculadas numericamente, para resolver as equações (5) e (6) acima, a partir do valor inicial nulo (a^o;b^o)=(0;0).

Calcule também o desvio quadrático total médio, eq. (7), entre os valores das Pressões P obtidas com a eq. (1), usando T_k, v_k e 'a', 'b',obtidos das eqs. (5) e (6), em relação aos m=18 pontos P_k experimentais:

$$\boldsymbol{D} = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{R*T(k)}{(v(k)-b)} - \frac{a}{\sqrt{T(k)}.v(k).(v(k)+b)} - P(k)\right]^{2} \quad (7)$$

a = 0.0071255, b = 0.0099997, erro = 1.1086e-009, D = 5.7336e-008

6.2 - Aproximação de y=f(x) por séries:

Aqui será abordada aproximação de y = f(x), x∈[a,b] com expressão conhecida, através de outra função z = g(x). Este é um problema central da elaboração de bibliotecas de funções pré-definidas para os sistemas dedicados.

Para fins de padronização e facilidade de avaliação da qualidade de g(x) vamos normalizar o intervalo [a; b] fazendo-o operar no intervalo [-1;+1].

Isto é sempre possível através de transformações lineares:

Para y = f(x), x∈[a,b]:

Se $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$ então,

$$f(x) = f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$$

Para t∈[-1;+1]: Se t = -1 ⇒ x = a
Se t = +1 ⇒ x = b

$$t = \frac{2x}{b-a} - \frac{b+a}{b-a}$$

Uma transformação generalizada de [a,b] → [c,d] é efetuada por:

$$x = \frac{b-a}{d-c}t + \frac{ad-bc}{d-c}$$

Outra questão fundamental a ser considerada é a definição do que é uma aproximadora de qualidade:

i). g(x) deve ter erro de truncamento $E(x) = |f(x) - g(x)|$ mínimo, ∀ x∈[a,b];

Se E(x) fosse zero, g(x) seria a própria função f(x), o que não é interessante na prática, pois o que se quer é substituir f(x) por uma função mais simples.

ii). O tempo de resposta nas chamadas de z = g(x) deve ser mínimo;
iii). A demanda de memória para armazenar a função g(x) deve ser mínimo.

6.2.1 - Aproximação polinomial de y = f(x) usando séries:

A aproximação polinomial de y = f(x) com x∈[a,b] pode ser obtido através de:

1º). Interpolação Polinomial:

Consiste em dividir o intervalo [a; b] em n partes iguais e obter o interpolador polinomial f(x) ≅ Pn(x) (resolvendo um sistema, ou por Lagrange, ou Gregory-Newton, por exemplo), com erro de truncamento da ordem de $E(x) < \frac{h^{n+1}M}{n+1}$.

Infelizmente o tempo de resposta e a demanda de memória requerida são grandes, pois para se ter um erro de truncamento pequeno é necessário usar um grau 'n' elevado em polinômios.

Esta técnica apesar de tentadoramente simples não satisfaz aos quesitos ii) e iii) de boa aproximação, a não ser em intervalos curtos para aplicações específicas.

2º). Aproximação por séries de Taylor:

Para y = f(x), continuamente diferenciável dentro de [a; b], segundo o teorema de Taylor f(x) pode ser escrita exatamente, a partir de qualquer ponto β ($x>\beta$), como:

$$f(x) = f(\beta) + \frac{f'(\beta)(x-\beta)}{1!} + \frac{f''(\beta)(x-\beta)^2}{2!} + \cdots + \frac{f^n(\beta)(x-\beta)^n}{n!} + \cdots$$

onde $\beta \in [a;b]$.

Pelo teorema do resto da série de Taylor:

$$f(x) = f(\beta) + \underbrace{\frac{f'(\beta)(x-\beta)}{1!} + \cdots + \frac{f^n(\beta)(x-\beta)^n}{n!}}_{Pn(x)} + \underbrace{\frac{f^{n+1}(\xi)(x-\beta)^{n+1}}{(n+1)!}}_{Rn(x)} \qquad \xi \in [\beta; x]$$

f(x) = Pn(x) + Rn(x)   ou $f(x) \cong Pn(x)$ (Aproximação Polinomial, assumindo truncamento da série).

Obs.: Se $\beta = 0 \Rightarrow$ $f(x) = f(0) + \frac{f'(0)x}{1!} + \frac{f''(0)x^2}{2!} + \cdots + \frac{f^n(0)x^n}{n!} + Rn(x)$

tem-se a série de Maclaurin.

Exemplos: Expandir em série de Taylor/Maclaurin as funções (a partir de x=0):

(i). $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$

(ii). $\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} + \cdots$

(iii). $\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \cdots + \frac{(-1)^{n+1} x^n}{n} + \cdots$

(iv). $\ln(\sqrt{1+x}) = \frac{x}{2.1} - \frac{x^2}{2.2} + \frac{x^3}{2.3} + \cdots + \frac{(-1)^{n+1} x^n}{2n!} + \cdots$

(v). $\int_0^x e^{-y^2} = x - \frac{x^3}{1!3} + \frac{x^5}{2!5} - \frac{x^7}{3!7} + \cdots + \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} + \cdots$

Uma das grandes dificuldades existentes na aproximação de funções é a determinação do valor de $\xi \in [\beta; x]$ que gere o resto Rn(x) correto. Por isso, avalia-se a majorante do resto Rn(x), dada por E_{max}, estimando um limite máximo para o erro de truncamento:

$$E_{max} = \frac{(x-\beta)^{n+1} M}{(n+1)!} \quad \text{onde} \quad M = \max_{x \in [\beta, x]} \left| f^{n+1}(x) \right|$$

Exemplos:

a). Delimitar o erro máximo cometido ao se aproximar $f(x) = e^x$, x ∈ [-1;+1] por Maclaurin com n = 5.

Solução:

$$\text{Pelo resto} \Rightarrow R_5(x) = \frac{f^6(\xi)\, x^6}{6!}$$

$$\text{Tomando } M = \max_{x \in [-1;+1]} \left| f^6(x) \right| \quad \Rightarrow \quad M = \max_{x \in [-1;+1]} \left| e^x \right| = e^{+1} \quad \text{então}$$

$$R_5(x) \leq \frac{M\, x^6}{6!} \quad \Rightarrow \quad R_5(x) \leq \frac{e^1\, 1^6}{6!} \quad \Rightarrow \quad R_5(x) \leq 0{,}003775$$

b). Determine o grau n para não se obter erro superior a $\varepsilon = 10^{-8}$ ao se aproximar $f(x) = e^x$,
x ∈ [-1;+1] por Taylor/Maclaurin.

Solução:

$$R_n(x) \leq \frac{M\, x^{n+1}}{(n+1)!} \quad \text{com} \quad M = \max_{x \in [-1;+1]} \left| e^x \right| = e^{+1}$$

$$R_n(x) \leq \frac{e^{+1}\, 1^{n+1}}{(n+1)!} \leq 10^{-8} \quad \Rightarrow \quad (n+1)! \geq 2{,}7.10^8$$

$$\text{Para } n \geq 11 \rightarrow R_n(x) \leq 0{,}567.10^{-8}$$

<u>Teorema</u>: "Se a série de Taylor de y=f(x) for convergente com $\lim_{n \to \infty} termo_n = 0$ e alternada nos sinais, então, o resto Rn(x) é aproximadamente o valor máximo do primeiro termo abandonado".

Ex.: Determine o grau n para aproximar f(x) = ln(1+x), x ∈ [0;+1] por Maclaurin com $\varepsilon = 10^{-5}$.

Solução:

Pela série de Maclaurin:

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \cdots + \frac{(-1)^{n+1}x^n}{n} + \underbrace{\frac{(-1)^{n+2}x^{n+1}}{n+1}}_{Rn(x)}$$

Pelo teorema anterior, do primeiro termo abandonado':

$\mathrm{Rn}(x) \leq \left|\frac{(-1)^{n+2}x^{n+1}}{n+1}\right| \leq 10^{-5} \Rightarrow$ este 1º termo abandonado (sinais alternados) é máximo, em x = 1.

$$\frac{(+1)^{n+1}}{n+1} \leq 10^{-5} \quad \Rightarrow \quad n \geq 100000$$

Note que nesta série a convergência é muito lenta, pois não tem fatorial no denominador, e isto implica em grande número de termos na série.

Pelo teorema do resto da série de Taylor, temos o erro de truncamento exato:

$R_n(x) = \dfrac{f^{n+1}(\xi)(x-\beta)^{n+1}}{(n+1)!}$ com $\xi \in [\beta; x]$

ou pelo seu valor máximo, $E_{\max} = \dfrac{(x-\beta)^{n+1}M}{(n+1)!}$ onde $M = \max\limits_{x\in[\beta,x]}\left|f^{n+1}(x)\right|$, para β=0, teremos

$f(x) = \ln(1+x)$, $f'(x) = 1/(1+x)$, $f''(x) = (-1).(1+x)^{-2}$, $f'''(x) = (+1).1.2.(1+x)^{-3}$,
$f^{(4)}(x) = (-1).1.2.3.(1+x)^{-4}$,..., $f^{(n)}(x) = (-1)^{(n+1)}.1.2.3....(n-1).(1+x)^{-n}$,
$f^{(n+1)}(x) = (-1)^{(n)}.1.2.3....(n).(1+x)^{-(n+1)} = (-1)^{(n)}.n!.(1+x)^{-(n+1)}$
$M = \max\limits_{x\in[0,1]}\left|(-1)^{(n)}.n!.(1+x)^{-(n+1)}\right|$ M é máximo em x=0 => $M = n!$

$E_{\max} = \dfrac{(x-0)^{n+1}M}{(n+1)!}$ este erro é máximo, em x = 1, e $E_{\max} = \dfrac{(1-0)^{n+1}n!}{(n+1).n!} = \dfrac{1}{n+1}$ (mesmo resultado anterior, n≥100000, para que Erro(x)≤10^{-5}).

Consideração:

Deve-se notar (ver avaliação a seguir) que a aproximação por Taylor/Maclaurin não distribui uniformemente os erros, o que exige grande número de termos na série para minimizar os erros máximos (localizados nos extremos). Assim, o tempo de resposta pode ficar muito alto, mesmo com custo de armazenamento zero.

Por exemplo:

$Erro(x) = \left|e^x - P_4(x)\right|$ (P_4(x) obtido por Maclaurin: $e^x = 1 + x + \dfrac{x^2}{2!} + \dfrac{x^3}{3!} + \dfrac{x^4}{4!}$)

x	-1,0	-0,5	0	0,5	1,0
Erro(x)	0,0071	0,00024	0	0,00028	0,0099

Observe que os erros são crescentes a partir do ponto β = 0 de expansão da série e então não são uniformente distribuídos no intervalo de trabalho.

6.2.b - Aproximação por Polinômios de Chebyschev

Definição: Um polinômio de Chebyschev de grau 'n' é toda expressão do tipo

$$T_n(x) = \cos(n \operatorname{arcos}(x))$$

Se $\operatorname{arcos}(x) = \theta \quad \Rightarrow \quad \cos(\theta) = x$ então

$$T_n(x) = \cos(n\theta)$$ em $x \in [-1;+1]$

Assim,

$$
\begin{aligned}
T_0(x) &= \cos(0) = 1 \\
T_1(x) &= \cos(\theta) = x \\
T_2(x) &= \cos(2\theta) = 2\cos^2(\theta) - 1 = 2x^2 - 1 \\
T_3(x) &= \cos(3\theta) = 4x^3 - 3x \\
T_4(x) &= \cos(4\theta) = 8x^4 - 8x^2 + 1 \\
T_5(x) &= \cos(5\theta) = 16x^5 - 20x^3 + 5x
\end{aligned}
$$

$$T_{n+1}(x) = 2.x.T_n(x) - T_{n-1}(x)$$

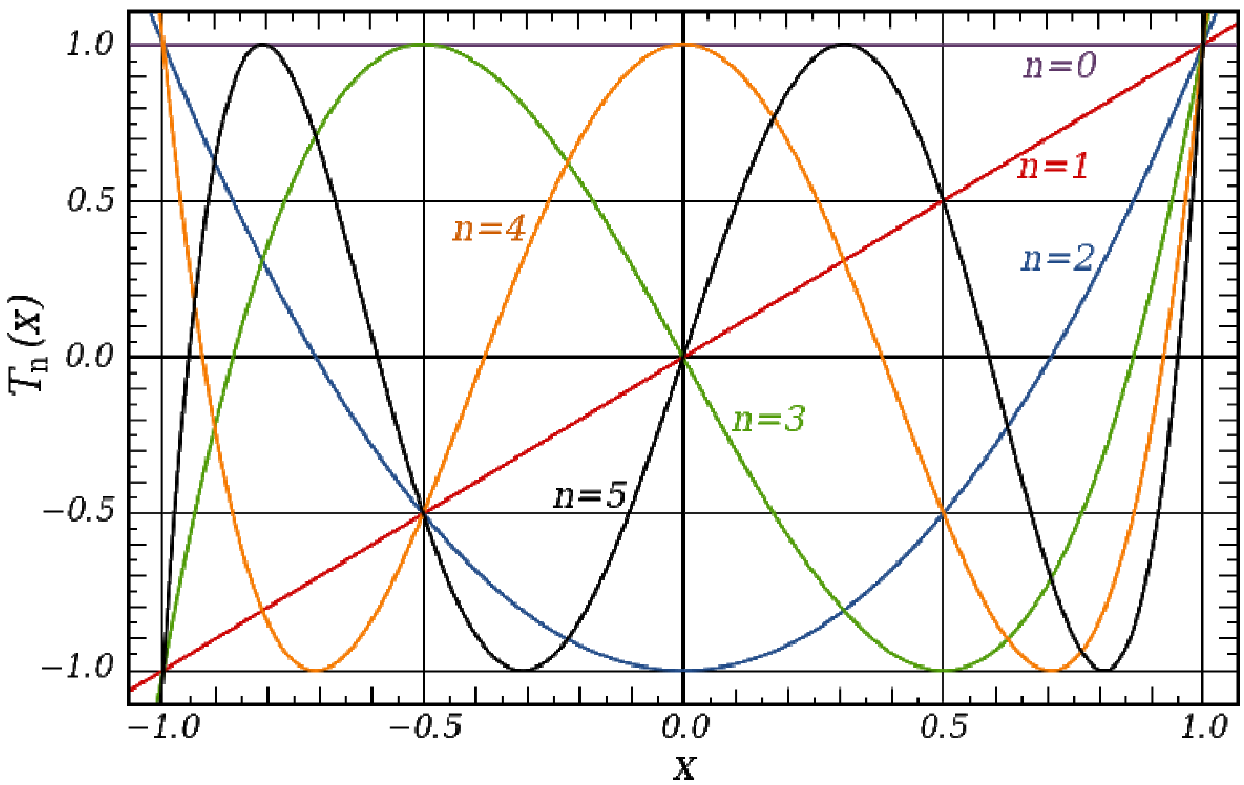


Figura 1 – Polinômios de Chebyschev de grau n=0, 1, 2, 3, 4 e 5.

Potências de x em função dos polinômios de Chebyshev:

$$x^0 = T_0$$

$x^1 = T_1$
$x^2 = (T_2 + T_0)/2$
$x^3 = (T_3 + 3T_1)/4$
$x^4 = (T_4 + 4T_2 + 3T_0)/8$
$x^5 = (T_5 + 5T_3 + 10T_1)/16$

Os polinômios de Chebyschev possuem as seguintes propriedades:

Prop1: $T_n(x)$ é um polinômio de grau n e só existe um único $T_n(x)$ para cada n. O coeficiente de x^n em $T_n(x)$ é 2^{n-1}.

Prop2: $|T_n(x)| \leq 1, \ \forall\ x \in [-1;+1]$ então $\max_{x\in[-1;+1]} |T_n(x)| = 1$ e todas as suas raízes (nós) são simples e obtidas via $\alpha_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right)$; k = 1,2,...,n.

Normalizando os polinômios de Chebyshev de forma que o coeficiente de maior grau seja igual 1, obtém-se os polinômios de Chebyshev mônicos:

Prop3: (Mimimax) "Seja $\tilde{T}_n(x) = T_n(x)/2^{n-1} = 2^{1-n}.T_n(x)$, o monômio (polinômio cujo coeficiente de maior grau é unitário) de Chebyschev de grau n. Então, $\max_{x\in[-1;+1]} |\tilde{T}_n(x)| = \frac{1}{2^{n-1}}$ e $\max_{x\in[-1;+1]} |\tilde{T}_n(x)| \leq \tilde{P}n(x)$,$\forall$ monômio $\tilde{P}n(x)$. A igualdade só ocorre caso $\tilde{P}n(x) = \tilde{T}_n(x)$ ".

Utilizando estas propriedades, vamos descrever a seguinte técnica de aproximação polinomial:

1º). Obter um aproximador Pn(x) (por séries de Taylor/Maclaurin) para y = f(x) com erro E_{T1} desejado (n obtido pelo erro de truncamento0:

$$f(x) = a_0x^0 + a_1x^1 + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n + E_{T1} \qquad (1)$$

2º). Substituir na eq. (1), todas as potências x^i pelas respectivas expressões em T_i e agrupa-los:

$$f(x) = a_0.T_0 + a_1.T_1 + a_2.(T_2 + T_0)/2 + a_3.(T_3 + 3T_1)4/ + a_4.(T_4 + 4T_2 + 3T_0)/8 + ... + E_{T1}$$

$$f(T) = b_0 + b_1T_1 + b_2T_2 + \cdots + b_nT_n + E_{T1} \qquad (2)$$

onde o último coeficiente $b_n = \frac{1}{2^{n-1}}$

3º). Truncar a expressão (2) a partir de $b_{k+1}T_{k+1}$ com k<n (escolhido cuidadosamente) e agrupar as novas parcelas do erro de truncamento em E_{T2}

$$f(T) = b_0 + b_1T_1 + b_2T_2 + \cdots + b_kT_k + E_{T2} + E_{T1} \qquad (3)$$

4º). Substituir em (3) cada T_i pela sua respectiva expressão em x^i, agrupá-los gerando novos coeficientes c_i:

$$f(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_k x^k + E_{T2} + E_{T1}$$

Então,

$f(x) \cong P_k(x)$ f(x) é aproximado por $P_k(x)$, com k < n (aproximação com menos termos).

Ex.: Aproximar $f(x) = e^x$ em $x \in [-1;+1]$ por Chebyschev de grau k = 3 partindo da expansão em série de Maclaurin de grau n = 4.

Solução:

1º). Aproximação de f(x) por Maclaurin (β=0) com grau n = 4:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{\max|f^{4+1}(x)|(x-0)^{4+1}}{(4+1)!}$$

$$e^x \cong 1 + x + 0{,}5x^2 + 0{,}16667x^3 + 0{,}041667x^4 + E_{T1}$$

com $E_{T1} = e/5! = 0{,}0226523$ (Pelo teorema do resto)

2º). Substituição pelos polinômios de Chebyschev:

$$e^x \cong T_0 + T_1 + 0{,}5\left(\frac{T_2 + T_0}{2}\right) + 0{,}16667\left(\frac{T_3 + 3T_1}{4}\right) + 0{,}041667\left(\frac{T_4 + 4T_2 + 3T_0}{8}\right) + E_{T1}$$

$$e^x \cong 1{,}265625.T_0 + 1{,}125000.T_1 + 0{,}270833.T_2 + 0{,}0416667.T_3 + 0{,}00520833.T_4 + E_{T1}$$

Sabendo que o valor máximo de qualquer polinômio de Chebyschev é a unidade, pode-se verificar que o termo $0{,}00520833.T_4$ adicionado ao erro de truncamento existente E_{T1} não altera a ordem da precisão desta aproximação. Assim,

$$E_T \cong 0{,}00520833.T_4 + E_{T1} \cong 0{,}00520833 + 0{,}0226523 \cong 0{,}0278607$$

Então, mesmo desprezando o termo de 4ª ordem (k = 4) da série expandida por polinômios de Chebyschev, verifica-se que o erro de truncamento total E_T é da mesma ordem de E_{T1}.

3º). Truncando a série em k = 4:

$$e^x \cong 1{,}265625.T_0 + 1{,}125000.T_1 + 0{,}270833.T_2 + 0{,}0416667.T_3 + E_T$$

4º). Substituindo os polinômios de Chebyschev T_i:

$$e^x \cong 1{,}265625.x^0 + 1{,}125000.x^1 + 0{,}270833.(2x^2 - 1) + 0{,}0416667.(4x^3 - 3x) + E_T$$

$$e^x \cong 0{,}994792 + x^1 + 0{,}541666.x^2 + 0{,}166667.x^3 + E_T$$

$$\bar{p}_3(x) \cong 0{,}994792 + x^1 + 0{,}541666.x^2 + 0{,}166667.x^3$$ - Aproximador de Chebyschev.

Avaliação de erros:

$Erro(x) = \left| e^x - P_4(x) \right|$ ($P_4(x)$ obtido por Maclaurin: $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!}$)

x	-1,0	-0,5	0	0,5	1,0
Erro(x)	0,0071	0,00024	0	0,00028	0,0099

$Erro(x) = \left| e^x - \bar{p}_3(x) \right|$ - $\bar{p}_3(x)$ obtido por Chebyschev: $0{,}994792 + x^1 + 0{,}541666.x^2 + 0{,}166667.x^3$

x	-1	-0,5	0	0,5	1,0
E(x)	0,0019	0,0028	0,0052	0,0023	0,0151

Note que os erros estão uniformemente distribuídos e todos se mantém abaixo do erro de truncamento total previsto inicialmente, $E_T = 0{,}0278607$.

Ex.: Aproximar f(x) = ln(x+1) em $x \in [0;+1]$ por Chebyschev com erro máximo $\varepsilon = 1{,}5.10^{-6}$.

Solução:

1º). Tomando a série de Maclaurin de ln(x+1) tem-se:

$$\ln(x+1) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \ \ldots$$

Verifica-se que a série acima é convergente e alternada, e assim pode-se tomar o erro de truncamento como o primeiro termo abandonado na série:

$$E_{T1} = \left| (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1} \right| \le 1{,}5.10^{-6}$$

Avaliando o n para que o erro máximo de truncamento não ultrapasse o valor de ε estabelecido, tem-se:

$$n \ge 666666$$

Como a série é de convergência lenta é necessário um alto valor de n para satisfazer a precisão ε requerida, o que é computacionalmente inviável.

2º). Reavaliando a aproximação de ln(x+1) por polinômios de Chebyschev, chega-se a seguinte aproximação:

$$\ln(x+1) = 0{,}99990164x - 0{,}49787544x^2 + \ \cdots \ - 0{,}01833851x^6$$

Ou seja, houve uma grande economia de memória de tempo de processamento com a aproximação por polinômios de Chebyschev. Só fica em aberto a questão de como obter um aproximador de Chebyschev a partir de uma aproximação de Maclaurin de grau n = 666666. Isto será apresentado mais adiante.

Considerações:

(i). Chebyschev distribui uniformemente os erros em [-1;+1], reduz o grau n da aproximação em relação a Maclaurin em pelo menos 1 (um) grau, isto é, k < n, grau de Chebyschev é sempre menor que o grau de Maclaurin. O k << n quanto mais lenta for a série (efeito telescópico)(vide exemplo ln(x+1) acima).

(ii). A operacionalização do aproximador de Chebyschev demanda um trabalho de manipulação algébrica muito elevado se o n for "grande'' (vide exemplo ln(x+1)). Existem fórmulas de se obter "diretamente'' os coeficientes b_i do 3º passo para obtenção do aproximador de Chebyschev, conforme segue:

$$f(x)=\sum_{i=0}^{n} b_i T_i \quad \text{onde} \quad \begin{cases} b_0 = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_{-1}^{+1}\dfrac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \\ b_i = \dfrac{2}{\pi}\displaystyle\int_{-1}^{+1}\dfrac{f(x)T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \end{cases}$$

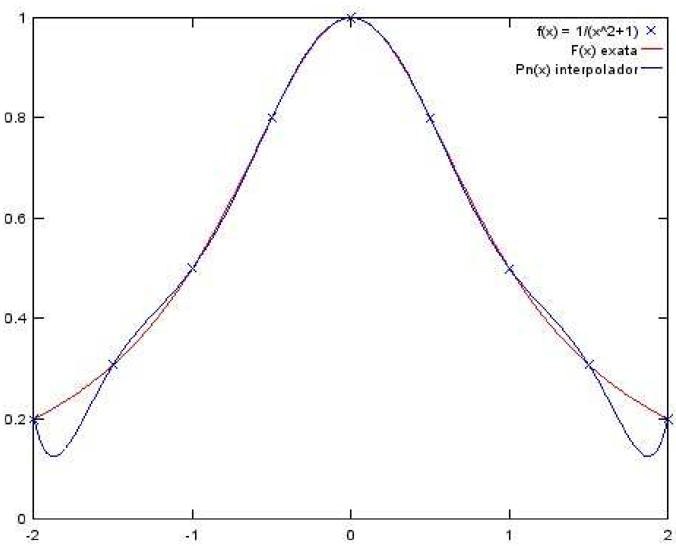
O problema é que estas integrandas não têm primitivas conhecidas, e devem ser aproximadas por métodos numéricos (vide capítulo Integrações Numéricas).

I.V.3 - Aproximação Racional de y = f(x):

Apesar de todas as vantagens da aproximação polinomial (Chebychev principalmente) de y = f(x) com expressão conhecida, também existem desvantagens que são inerentes aos próprios polinômios:

1º) Polinômios oscilam com pontos de ancoragem com certos desvios (tipo dados experimentais);
2º) Não aproximam eficientemente funções assintóticas;

Ex.: $f(x)=\dfrac{1}{(x^2+1)}$



Def 1 - Uma função racional de grau M é toda expressão do tipo $R_M(x) = \dfrac{a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n}{b_0 + b_1x + \cdots + b_mx^m}$, onde M = n + m.

Ex.: $f(x) = \dfrac{1}{x} \Rightarrow R_1(x) = \dfrac{p_o(x)}{q_1(x)}$

I.V.4 - Aproximação Racional de Padé:

$$R_{nm}(x) = \frac{a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n}{b_0 + b_1x + \cdots + b_mx^m} = R_M(x) \text{ , onde } M = n + m$$

Esta técnica consiste em se aproximar y = f(x) conhecida, x ∈ [-1;+1] através de uma função racional

$$R_{nm}(x) = \frac{a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n}{1 + b_1x + \cdots + b_mx^m} \cong f(x)$$

De modo que cada derivada de f(x) deve ser equivalente a derivada da aproximadora racional $R_{nm}(x)$:

$$\begin{cases} f(0) = R_{nm}(0) \\ f'(0) = R'_{nm}(0) \\ f''(0) = R''_{nm}(0) \\ \quad\vdots \\ f^M(0) = R^M_{nm}(0) \end{cases} \qquad (*)$$

É uma extensão da série de Maclaurin para racionais.

Para tanto, procede-se como segue:

1º). Obter uma aproximadora de Maclaurin de grau total M=n+m:

$$f(x) \cong c_0 + c_1x + c_2x^2 + \cdots + c_Mx^M + E_T$$

com E_T estabelecido previamente~~, mas E_T deve ser menor que a precisão desejada.~~

2º). Tomar $p_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$ e

$q_m(x) = 1 + b_1x + \cdots + b_mx^m$ com os coeficientes a_i e b_j a ser determinados:

e $f(x) \cong R_{nm}(x)$

$$c_0 + c_1x + c_2x^2 + \cdots + c_Mx^M = \frac{a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n}{1 + b_1x + \cdots + b_mx^m} \qquad (b_0=1) \qquad (**)$$

$$(1 + b_1x + b_2x^2 + \cdots + b_mx^m).(c_0 + c_1x + c_2x^2 + \cdots + c_Mx^M) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$$

3º). Aplicar as condições (*) em (**) e isolar os coeficientes desenvolvidos a_i e b_j a partir dos valores de c_i $\Rightarrow$

$$\begin{cases} R_{nm}(0) = f(0) \\ R'_{nm}(0) = f'(0) \\ R''_{nm}(0) = f''(0) \\ R'''_{nm}(0) = f'''(0) \\ \quad\vdots \\ R^{M}_{nm}(0) = f^{M}(0) \end{cases} \rightarrow$$

$$\begin{cases} a_0 = c_0 \\ a_1 = b_1 c_0 + c_1 \\ a_2 = b_2 c_0 + b_1 c_1 + c_2 \\ a_3 = b_3 c_0 + b_2 c_1 + b_1 c_2 + c_3 \\ \quad\vdots \\ a_n = b_n c_{n-m} + b_{m-1} c_{n-m+1} + \cdots + c_n \end{cases} \qquad (***)$$

e

$$\begin{bmatrix} c_{n-m+1} & c_{n-m+2} & \cdots & c_n \\ c_{n-m+2} & c_{n-m+3} & \cdots & c_{n+1} \\ & \vdots & & \\ c_{M-m} & c_{M-m+1} & \cdots & c_{M-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_m \\ b_{m-1} \\ \vdots \\ b_1 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} c_{n+1} \\ c_{n+2} \\ \vdots \\ c_M \end{bmatrix} \qquad (****)$$

que é um sistema linear $m_x m$, cuja solução fornece os b_j, que substitídos em (***) fornece os a_i.

Obs.: Dependendo de n e m pode ocorrer que em (***) ou (****) apareçam a_i e b_j com $i<0$ ou $j<0$. Nestes casos, fazer sempre $a_i = 0$ e $b_j = 0$.

Ex1.: Obtenha a aproximação racional $R_{32}(x)$ para $f(x) = arctg(x)$, $x \in [-1;+1]$ e avalie o erro exato no final.

Solução:

Temos $n = 3$; $m = 2$ e $M = 5$ com $f(x) = arctg(x)$, tomando a série de Maclaurin

$$f_1(x) = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} \underbrace{- \frac{x^7}{7} + \cdots + (-1)^{n+1} \frac{x^{2n-1}}{2n-1}}_{E_T} \qquad \Rightarrow \qquad n = 1,2,\ldots, N.$$

Veja que o erro de truncamento máximo é dado por $E_T = \left| -\frac{x^7}{7} \right|_{x\in[-1;+1]}$, pois é uma série alternada nos sinais, o que resulta em $E_T=1/7=0,14286...$, que precisa ser avaliado de forma exata.

$$f(x) = arctg(x) \cong f_1(x) = 0 + x + 0x^2 - \frac{1}{3}x^3 + 0x^4 + \frac{1}{5}x^5$$

$$\Rightarrow \quad \begin{array}{ll} c_0 = 0 & c_3 = -1/3 \\ c_1 = 1 & c_4 = 0 \\ c_2 = 0 & c_5 = 1/5 \end{array}$$

E queremos $p_3(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ e

$q_2(x) = 1 + b_1x + b_2x^2$

Aplicando (****) $\Rightarrow$ n = 3, m = 2 e M=5

$$\begin{bmatrix} c_2 & c_3 \\ c_3 & c_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_2 \\ b_1 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} c_4 \\ c_5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -1/3 \\ -1/3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_2 \\ b_1 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 0 \\ 1/5 \end{bmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} b_1 = 0 \\ b_2 = 3/5 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 = c_0 \\ a_1 = b_1c_0 + c_1 \\ a_2 = b_2c_0 + b_1c_1 + c_2 \\ a_3 = b_3c_0 + b_2c_1 + b_1c_2 + c_3 \end{cases} \qquad \text{para } m = 2 \Rightarrow b_3 = 0.$$

Aplicar isto em (***)

$$\begin{cases} a_0 = 0 \\ a_1 = (0).0 + 1 = 1 \\ a_2 = (3/5).0 + 0.1 + 0 = 0 \\ a_3 = 0.0 + (3/5).1 + 0.0 - 1/3 = 4/15 \end{cases}$$

Daí,

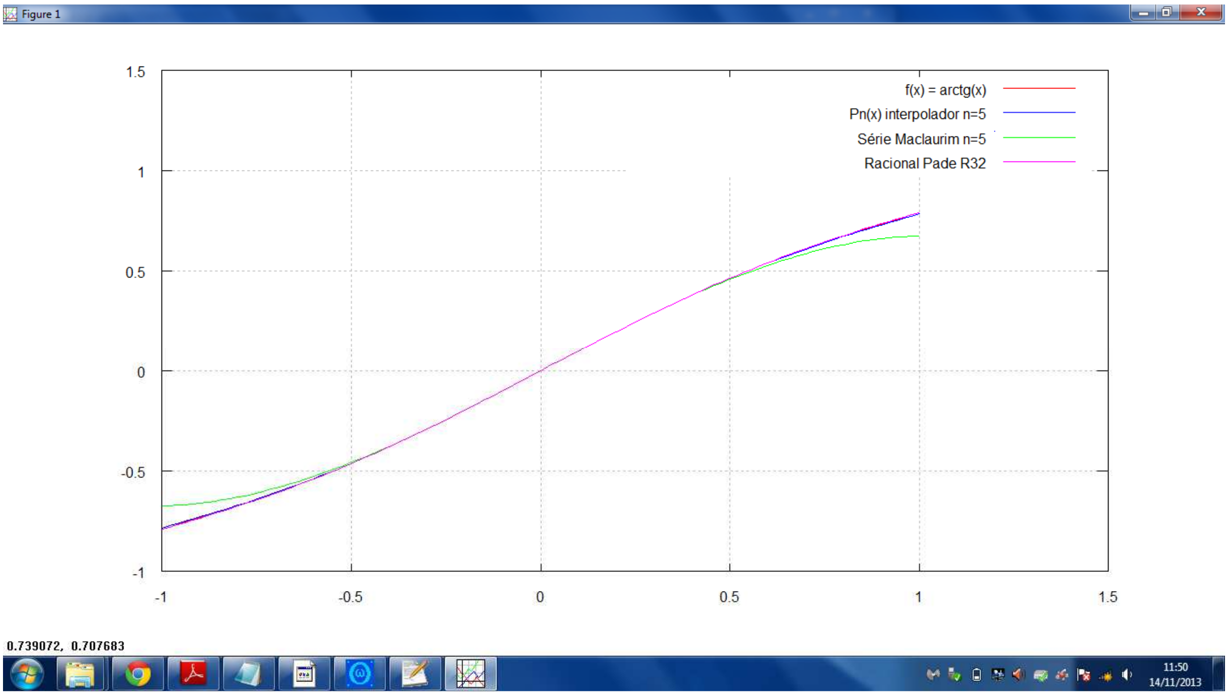
$$f(x) = arctg(x) \cong R_{32}(x) = \frac{0 + 1.x + 0.x^2 + 4/15.x^3}{1 + 0.x + 3/5.x^2} = \frac{15x + 4x^3}{15 + 9x^2}$$

Algoritmo:

```
%Comparativo entre interpolação polinomial e series de taylor
%1-Interpolação polinomial para grau n >= 2
a = -1;
b = 1;
n = 5;
h = (b-a)/n;
x = a : h : b;
y = atan(x);
tsis = n+1;

for i = 1 : tsis
```

```
        A(i,1) = 1;
        for j = 2 : tsis
              A(i,j) = A(i,j-1)*x(i);
        endfor
        A(i, tsis+1) = y(i);
endfor
A
C = fgauss(tsis,A) % coeficientes do polinomio interpolador

%2-aproximação por serie de maclaurin
%f1(x) = 0 + x + 0*x^2/2 - x^3/3 + 0*x^4/4! + x^5/5 ErroTruncamento1 =  1/7

%4-aproximação racional de padé
%f1(x) = 0 + x + 0*x^2/2 - x^3/3 + 0*x^4/4! + x^5/5 ErroTruncamento1 =  (na real ... visto no grafico)
%R32 = (a0 + a1x + a2x^2 + a3x^3)/(1 + b1x + b2*x^2)
 npade = 3;
 mpade = 2;
 M = npade + mpade;

 %determinar coeficientes C
 %C COMEÇA DO 1
 c = [0  1  0  -1/3  0  1/5]

 %calcular os Bs

 A = [
        [c(3) c(4) -c(5)]; %o c(0) foi trocado por c(1) e etc pq o octave começa do 1
        [c(4) c(5) -c(6)];
 ];


 b = fgauss(mpade, A); %B começa de 1, igual a formula do pade
b
aux=b(1);
b(1)=b(2);
b(2)=aux;
b(3) = 0;
 %calcular os As

 a(1) = c(1); %o a(0) foi trocado por a(1) e etc =D
 a(2) = b(1)*c(1) + c(2);
 a(3) = b(2)*c(1) + b(1)*c(2) + c(3);
 a(4) = b(3)*c(1) + b(2)*c(2) + b(1)*c(3) + c(4);

b
a
%R32 = (a0 + a1x + a2x^2 + a3x^3)/(1 + b1x + b2*x^2)


np = 20*n;
ap = -1;
```

```
bp = 1;
hp = (bp-ap)/np;
xp = ap:hp:bp;
yep = atan(xp);
for i = 1 : np+1
        yip(i) = resto(n, C, xp(i));
endfor
yst = 0 .+ xp .+ 0 .*xp.^2 ./2 .- xp .^3 ./3 .+ 0 .*xp .^4 ./24 .+ xp .^5 ./120;
ypade=(a(0+1) + a(1+1) .*xp + a(2+1) .*xp.^2 + a(3+1) .*xp.^3) ./(1 + b(1) .*xp + b(2) .*xp.^2);
x=[x 1.2];y=[y 1.2];
xp
Et=abs(yep-yst)
Ep=abs(yep-ypade)
%plot(x,y,'.',xp,yep,"r;f(x) = arctg(x);", xp,yip,"b;Pn(x) interpolador n=5;", xp, yst, "g; Série Maclaurim n=5;", xp, ypade, "c; Racional Pade R32;")
plot(xp,Et,"r;Erro=|arctg(x)-f1(x)|, f1(x)=Série Maclaurim n=5;", xp, Ep, "m; Erro=|arctg(x)-R32(x)|, R32(x)= Racional Pade;")
grid
```

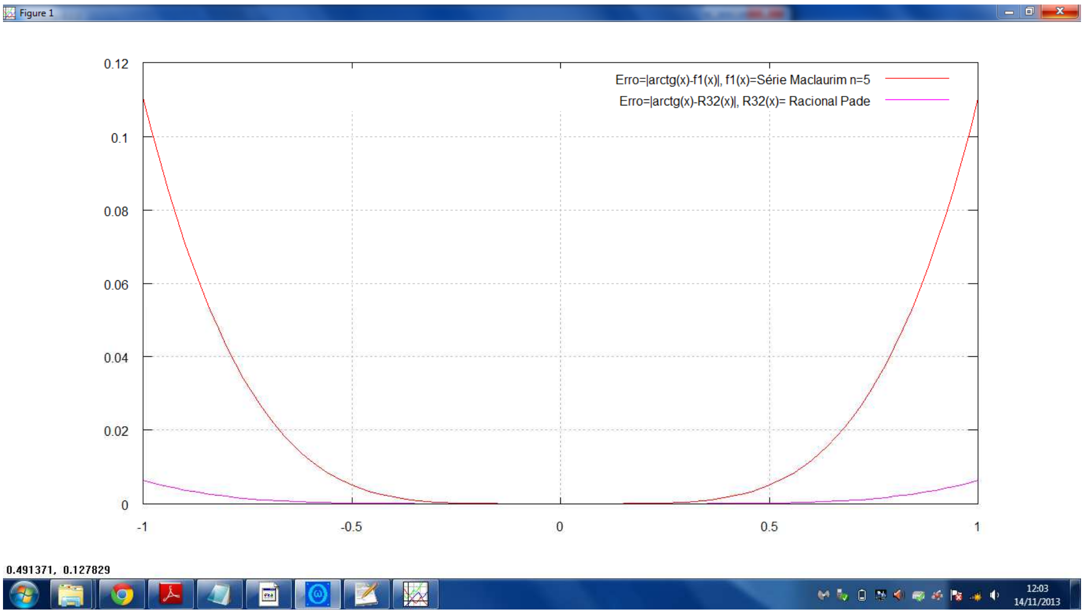


Avaliação de erro exato:

$$Et(x) = |arctg(x) - f_1(x)|$$ ($f_1(x)$ obtido por Maclaurin com n=5)

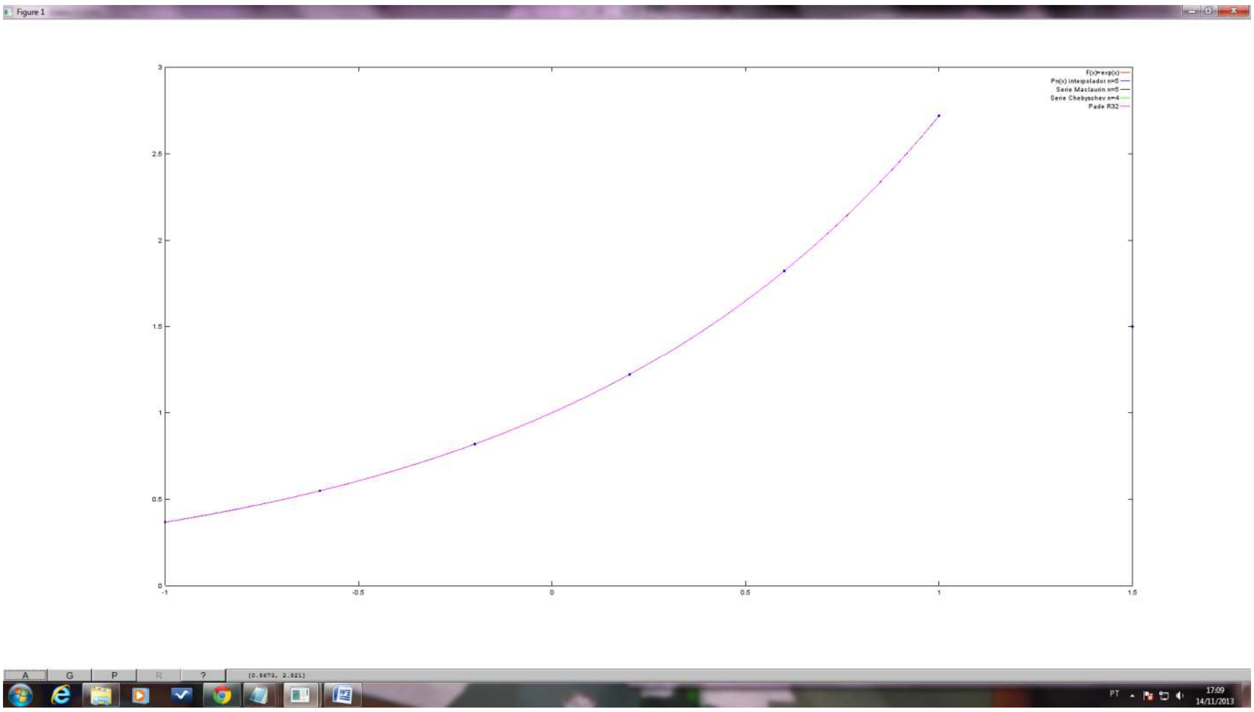
$$Ep(x) = |arctg(x) - R_{32}(x)|$$ ($R_{32}(x)$ obtido por Padé n=3 e m=2)

x	-1	-0,5	0	0,5	1,0
Et(x)	0,1104	0.00505	0	0.00505	0.1104
Ep(x)	0.006268	0.0001205	0,0	0.0001205	0.0062685



Note que os erros não estão uniformemente distribuídos, mantendo as características da série de Maclaurin que gerou a aproximação de Padé. A aproximação racional de Padé não distribui o erro, mas o reduz em relação à série geradora.
Com a aproximação de Maclaurin com n=5 termos, temos um erro de truncamento máximo estimado de E_{Tmax} =1/7=0,14286, que avaliado de forma exata chega a 0,1104, conforme tabela e gráfico acima, enquanto o erro máximo exato obtido com a aproximação de Padé R_{32} é no máximo 0,0062685.
Por Maclaurin, seriam necessários 165 termos na série para se atingir um erro de truncamento da ordem de 0,006, enquanto na aproximação de Padé foi usado apenas M=5 no total.

Exemplo: f(x)=exp(x) com n=5 termos na série de maclaurin, Chebyshev n=4 e Padé R32.



Obtidos com o seguinte algoritmo:

---

clear

```
%Comparativo entre aproximações polinomial, séries de taylor, Chebyschev e Padé
%1-Interpolação polinomial para grau n >= 2
a = -1;
b = +1;
n = 5;  %ETmax = M.h^(n+1)/(n+1)=exp(1)*(2/n)^(n+1)/(n+1) => ETmax=0.0018557 para n=5
h = (b-a)/n;
x = a : h : b;
y = exp(x);
tsis = n+1;

for i = 1 : tsis
        A(i,1) = 1;
        for j = 2 : tsis
              A(i,j) = A(i,j-1)*x(i);
        endfor
        A(i, tsis+1) = y(i);
endfor
A
C = fgauss(tsis,A) % coeficientes do polinomio interpolador

%2-aproximação por serie de maclaurin
%ETmax = M.(x-0)^(n+1)/(n+1)! => ETmax=exp(1)*(1-0)^(n+1)/factorial(n+1)
ETmax=0.0037754 para n=5
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5!

%3-aproximação por serie com polinomios de Chebyschev
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5!
%f1(t) = t0 + t1 + 1/2!*(t2+t0)/2 + 1/3! * (t3 + 3t1)/4 + 1/4! * (t4 +4t2 +3t0)/8 + 1/5! * (t5 + 5t3
+10t1)/16
%f1(t) = (81*t0)/64+(217*t1)/192+(13*t2)/48+(17*t3)/384+t4/192+t5/1920
%f2(t) = (81*t0)/64+(217*t1)/192+(13 t2)/48+(17 t3)/384+t4/192
%f2(x) = (81)/64+(217x)/192+(13*(2x^2-1))/48+(17*(4x^3 - 3x))/384+(8x^4 -8x^2 +1)/192
%f2(x) = 1+(383 x)/384+x^2/2+(17 x^3)/96+x^4/24
%ET(x) ~=0.0037754 para n=5


%4-aproximação racional de padé
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5! ErroTruncamento1 = 3.7*10-3 (na real
1.6*10-3 visto no grafico)
%R32 = (a0 + a1x + a2x^2 + a3x^3)/(1 + b1x + b2*x^2)
%ET(x) ~=0.0037754 para n=5

 npade = 3;
 mpade = 2;
 M = npade + mpade;

 %determinar coeficientes C
 %C COMEÇA DO 1
 c = [1  1  1/2  1/6  1/24  1/120]

 %calcular os Bs
```

```
A=[
        [c(3) c(4) -c(5)]; %o c(0) foi trocado por c(1) e etc pq o octave começa do 1
        [c(4) c(5) -c(6)];
  ];

b= fgauss(mpade, A); %b começa em 1 mesmo, igual a formula do pade, pois bo=1 sempre.
aux=b(1);
b(1)=b(2);
b(2)=aux;
b(3) = 0; %para m=2
 %calcular os As

 a(1) = c(1); %o a(0) foi trocado por a(1) e etc =D
 a(2) = b(1)*c(1) + c(2);
 a(3) = b(2)*c(1) + b(1)*c(2) + c(3);
 a(4) = b(3)*c(1) + b(2)*c(2) + b(1)*c(3) + c(4);

a
b

%R32 = (a0 + a1x + a2x^2 + a3x^3)/(1 + b1x + b2*x^2)

np = 1*n;
ap = -1;
bp = 1;
hp = (bp-ap)/np;
xp = ap:hp:bp;
yep = exp(xp);
for i = 1 : np+1
        yip(i) = resto(n, C, xp(i));
endfor
yst = 1 .+ xp .+ xp.^2 ./ factorial(2) .+ xp.^3 ./ factorial(3) .+ xp.^4 ./ factorial(4) .+ xp.^5 ./ factorial(5)
ysc = 1 .+(383 .*xp)./384 +xp.^2 ./2 .+(17 .*xp.^3)./96 .+xp.^4 ./24;
ypade = (a(0+1) + a(1+1) .*xp + a(2+1) .*xp.^2 + a(3+1) .*xp.^3) ./(1 + b(1) .*xp + b(2) .*xp.^2)
Et=abs(yep-yst)
Ec=abs(yep-ysc)
Ep=abs(yep-ypade)

x=[x 1.5]; y=[y 1.5]; %redimensionando os limites do grafico
plot(x,y,".",xp,yep,"r;F(x)=exp(x);", xp,yip,"b;Pn(x) interpolador n=5;", xp, yst, "k;Serie Maclaurin n=5;", xp, ysc, "g; Serie Chebyschev n=4;", xp, ypade, "m; Pade R32;")
```

---

f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5! -> Maclaurin com n=5.
f2(x) = 1+(383 x)/384+x^2/2+(17 x^3)/96+x^4/24 -> Chebyschev com n=4
f3(x) = (1 +0.6x+0.15x^2+0.16666667x^3)/(1-0.4x+0.05x^2) -> Padé R32(x)

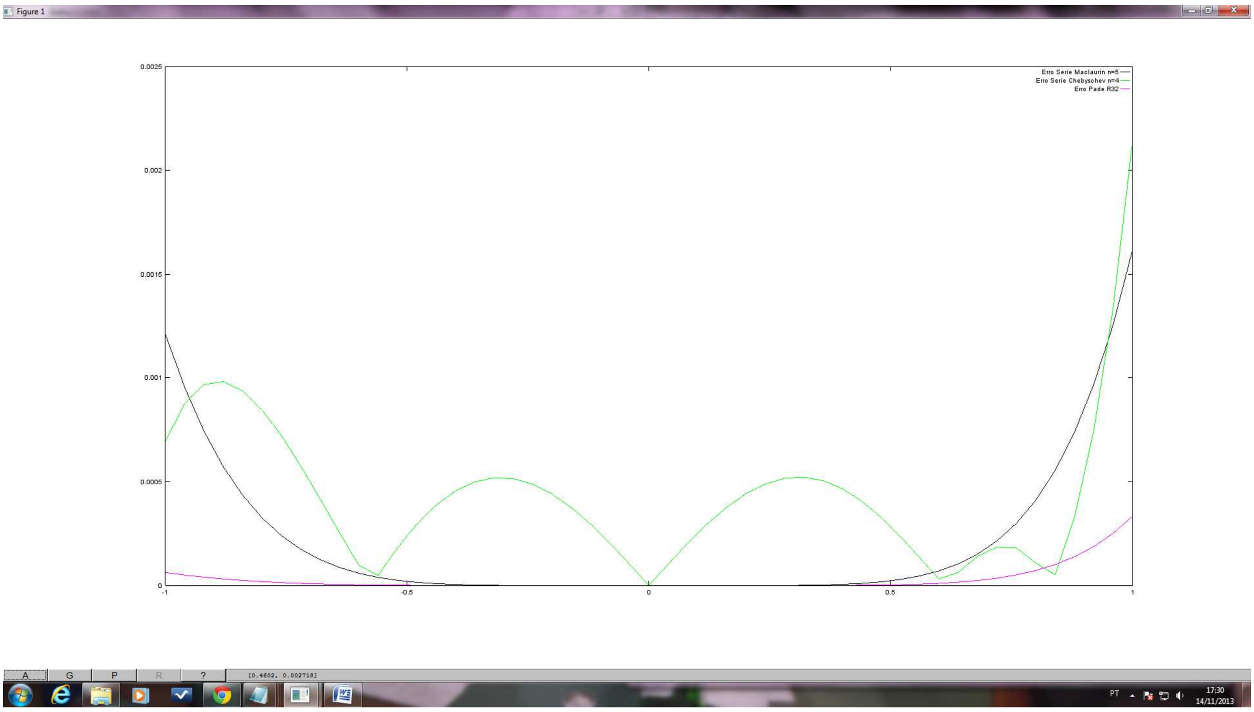
Avaliação de erro exato:

$$Et(x) = |arctg(x) - f_1(x)| \quad (f_1(x) \text{ obtido por Maclaurin com } n=5)$$

$$Ec(x) = |arctg(x) - f_2(x)| \quad (f_2(x) \text{ obtido por Chebyschev com } n=4)$$

$$Ep(x) = |arctg(x) - R_{32}(x)| \quad (R_{32}(x) \text{ obtido por Padé } n=3 \text{ e } m=2)$$

x	-1	-0.6	-0,2	0.2	0,6	1,0
Et(x)	$1.2128.10^{-3}$	$5.9636.10^{-5}$	$8.6411.10^{-8}$	$9.1494.10^{-8}$	$7.0800.10^{-5}$	$1.6152.10^{-3}$
Ec(x)	$6.9194.10^{-4}$	$9.9136.10^{-5}$	$4.4008.10^{-4}$	$4.4026.10^{-4}$	$3.1300.10^{-5}$	$2.1360.10^{-3}$
Ep(x)	$6.3349.10^{-5}$	$4.0049.10^{-5}$	$7.5450.10^{-5}$	$1.0510.10^{-5}$	$1.0831.10^{-5}$	$3.3311.10^{-5}$



Exercícios:

Obtenha as seguintes aproximações de Padé:

(i). $R_{54}(x)$ para f(x) = arctg(x).
(ii). $R_{33}(x)$ para f(x) = x ln(1+x)
(iii). $R_{32}(x)$ para $f(x) = e^{-x}$

Considerações:

1º). Não se tem uma forma prévia de se determinar os valores ideais de n e m para $R_{nm}(x)$. Trata-se de um processo de **tentativa e erro**, os autores do método sugerem que se tome n = m ou n = m +1 ou n = m-1.

Ex.: Para $f(x) = e^x$ tem-se que:

$$e^x \cong R_{22}(x) = \frac{12 + 6x + x^2}{12 - 6x + x^2} \qquad \Rightarrow \quad E_{max} = 0,0039961$$

$$e^x \cong R_{40}(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} \quad \Rightarrow \quad E_{max} = 0{,}0099485$$

$$e^x \cong R_{04}(x) = \frac{1}{1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24}} \quad \Rightarrow \quad E_{max} = 0{,}051615$$

Dentre as três aproximações apresentadas, a forma R_{22} é a que apresenta menor erro de truncamento.

2º). Para se obter uma aproximadora racional com distribuição uniforme de erros é necessário compensar os erros na série geradora. Desta forma se for utilizada previamente a série aproximadora por polinômios de Chebyschev no passo (1º), se obtém uma distribuição de erros uniforme na aproximação racional.

3º). Pelos exemplos anteriores, nota-se que Padé não distribuiu uniformemente os erros em [-1;+1], que é um defeito previsível, pois a distribuição de erros é uma extensão de Chebyschev. Para sanar este problema, mescla-se Padé com Chebyschev. Desta forma é utilizada primeiramente a série aproximadora por polinômios de Chebyschev, distribuindo os erros e reduzindo o grau total se for o caso, para depois se obter a aproximadora racional de Padé sobre a série de Chebyschev em função de x.

Assim, Obtém-se inicialmente o polinômio aproximador de Chebyshev de grau M (menor que o M usado na série de Mclaurin) para representar f(x) em termos de $T_i(x)$, analogamento à série de Maclaurin :

$$f(x) \cong t(x) = \sum_{k=0}^{M} c_k T_k(x) = c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M$$

E aproximamos o polinômio aproximador de Chebyshev por uma forma Racional:

$$\sum_{k=0}^{M} b_k T_k(x) \cong r(x) = \frac{a_0 + a_1 T_1 + \cdots + a_n T_n}{1 + b_1 T_1 \cdots + b_m T_m}$$, com n+m=M (b_0=1).

Fazendo

$$f(x) \cong t(x) \cong r(x) \Rightarrow t(x) - r(x) = 0$$

$$c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M - \frac{a_0 + a_1 T_1 + \cdots + a_n T_n}{1 + b_1 T_1 \cdots + b_m T_m} = 0$$

$$\frac{(c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M).(1 + b_1 T_1 \cdots + b_m T_m) - (a_0 + a_1 T_1 + \cdots + a_n T_n)}{1 + b_1 T_1 \cdots + b_m T_m} = 0$$

Assim,

$$(c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M).(1 + b_1 T_1 \cdots + b_m T_m) - (a_0 + a_1 T_1 + \cdots + a_n T_n) = 0$$

$$\begin{aligned}
&(c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M).1 + \\
&(c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M).b_1 T_1 + \\
&\vdots \\
&(c_0 + c_1 T_1 + c_2 T_2 + \cdots + c_M T_M).b_m T_m = (a_0 + a_1 T_1 + \cdots + a_n T_n)
\end{aligned}$$

$$\left(c_0 + c_1 T_1 + c_2 \mathrm{T}_2 + \cdots + \mathrm{c_M T_M}\right) +$$
$$\left(c_0 . b_1 \mathrm{T}_1 + c_1 . b_1 \mathrm{T}_1 T_1 + c_2 . b_1 \mathrm{T}_1 \mathrm{T}_2 + \cdots + \mathrm{c_M} . b_1 \mathrm{T}_1 \mathrm{T_M}\right) +$$
$$\vdots$$
$$\left(c_0 . b_m \mathrm{T_m} + c_1 . b_m \mathrm{T_m} T_1 + c_2 . b_m \mathrm{T_m T_2} + \cdots + \mathrm{c_M} . b_m \mathrm{T_m T_M}\right) = \left(a_0 + a_1 T_1 + \cdots + \mathrm{a_n} T_n\right)$$

Os produtos entre T_i e T_j podem ser simplificados considerando que $\mathrm{T_i}(x) = \cos(i\theta)$:

$$\mathrm{T_i}(x).\mathrm{T_j}(x) = \cos(i\theta).\cos(j\theta) = \frac{1}{2}\left(\cos(i+j)\theta + \cos(i-j)\theta\right) = \frac{1}{2}\left(\mathrm{T_{i+j}}(x) + \mathrm{T_{|i-j|}}(x)\right)$$
$$\left(c_0 . T_0 + c_1 T_1 + c_2 \mathrm{T}_2 + \cdots + \mathrm{c_M T_M}\right) +$$
$$\left(c_0 . b_1 \mathrm{T}_1 + c_1 . b_1 .\left(\mathrm{T}_2 + T_0\right)/2 + c_2 . b_1\left(\mathrm{T}_3 + \mathrm{T}_1\right)/2 + \cdots + \mathrm{c_M} . b_1\left(\mathrm{T_{M+1}} + \mathrm{T_{M-1}}\right)\right) +$$
$$\vdots$$
$$\left(c_0 . b_m \mathrm{T_m} + c_1 . b_m\left(\mathrm{T_{m+1}} + T_{m-1}\right)/2 + c_2 . b_m\left(\mathrm{T_{m+2}} + \mathrm{T_{m-2}}\right)/2 + \cdots + \mathrm{c_M} . b_m\left(\mathrm{T_{M+m}} + \mathrm{T_{M-m}}\right)/2\right) = \left(a_0 . T_0 + a_1 T_1 + \cdots + \mathrm{a_n} T_n\right)$$

Agrupando termos:

$$\left(c_0 + c_1 . b_1 / 2 + \ldots \qquad\right) . T_0 +$$
$$\left(c_1 + c_0 . b_1 + c_2 . b_1 / 2 + \ldots\right) . T_1 +$$
$$\left(c_2 + c_1 . b_1 / 2 + \ldots \qquad\right) . \mathrm{T}_2 +$$
$$\vdots$$
$$\left(\mathrm{c_M} + c_0 . b_m + \ldots \qquad\right) . \mathrm{T_M} +$$
$$\vdots$$
$$\left(\ldots . \qquad + \mathrm{c_M} . b_m / 2\right) . \mathrm{T_{M+m}} = \left(a_0 . T_0 + a_1 T_1 + \cdots + \mathrm{a_n} T_n\right)$$

Exemplo: Aproximar f(x)=exp(x) por
1. Série de Maclaurin de f(x)=exp(x)
Com ETmax = M.(x-0)^(n+1)/(n+1)! => ETmax=exp(1)*(1-0)^(n+1)/factorial(n+1)
ETmax=0.0037754 para n=5
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5!

2. Série com polinomios de Chebyschev de f(x)=exp(x)
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5!
%f1(T) = t0 + t1 + 1/2!*(t2+t0)/2 + 1/3! * (t3 + 3t1)/4 + 1/4! * (t4 +4t2 +3t0)/8 + 1/5! * (t5 + 5t3 +10t1)/16
%f1(T) = (81*t0)/64+(217*t1)/192+(13*t2)/48+(17*t3)/384+t4/192+t5/1920
Com n=4, mantemos a mesma ordemd e grandeza do erro: 0.0037754+1/1920=0.0042962
%f2(T) = (81*T0)/64+(217*T1)/192+(13 T2)/48+(17 T3)/384+T4/192

3. A partir do polinômio de Chebyshev acima, com M=4, aproxime uma forma Racional, $R_{22}(x)$:

$$f(x) \cong f_2(x) = \sum_{k=0}^{M} c_k T_k(x) = c_0 + c_1 T_1 + c_2 \mathrm{T}_2 + \cdots + \mathrm{c_M T_M}$$

onde c_0=81/64, c_1=217/192, c_2=13/48, c_3=17/384 e c_4=1/192.

Podemos aproximar o polinômio de Chebyshev acima por uma forma Racional $R_{22}(x)$, n=2 e m=2:

$$R_{22}(x)=\frac{a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2}{1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2}$$, com n+m=M (b_0=1).

Igualando

$$f(x)\cong f_2(x)=c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4$$

$$f(x)\cong R_{22}(x)=\frac{a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2}{1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2}$$

Aproximando Chebyschev por Padé:

$$f_2(x)-R_{22}(x)=0\Rightarrow c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4-\frac{a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2}{1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2}=0$$

Multiplicando ambos lados por ($1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2$):

$$\frac{(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2)-(a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2)}{(1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2)}=0$$

$$(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(1+b_1\mathrm{T}_1+\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2)-(a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2)=0$$

$$\begin{aligned}&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(1)+\\&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(b_1\mathrm{T}_1)+\\&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2)=(a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(1)+\\&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(b_1\mathrm{T}_1)+\\&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4).(\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2)=(a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&(c_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4)+\\&(c_0.b_1\mathrm{T}_1+c_1.b_1\mathrm{T}_1T_1+c_2.b_1\mathrm{T}_1\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3.b_1\mathrm{T}_1\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4.b_1\mathrm{T}_1\mathrm{T}_4)+\\&(c_0.\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2+c_1.\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2T_1+c_2.\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3.\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4.\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2\mathrm{T}_4)=(a_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2)\end{aligned}$$

Os produtos entre T_i e T_j podem ser simplificados considerando que $\mathrm{T}_i(x)=\cos(i\theta)$:

$$\mathrm{T}_i(x).\mathrm{T}_j(x)=\cos(i\theta).\cos(j\theta)=\frac{1}{2}(\cos(i+j)\theta+\cos(i-j)\theta)=\frac{1}{2}(\mathrm{T}_{i+j}(x)+\mathrm{T}_{|i-j|}(x))$$

$$\begin{aligned}&(c_0.\mathrm{T}_0+c_1T_1+c_2\mathrm{T}_2+\mathrm{c}_3\mathrm{T}_3+\mathrm{c}_4\mathrm{T}_4)+\\&(c_0.b_1\mathrm{T}_1+c_1.b_1(\mathrm{T}_2+T_0)/2+c_2.b_1(\mathrm{T}_3+\mathrm{T}_1)/2+\mathrm{c}_3.b_1(\mathrm{T}_4+\mathrm{T}_2)/2+\mathrm{c}_4.b_1(\mathrm{T}_5+\mathrm{T}_3)/2)+\\&(c_0.\mathrm{b}_2\mathrm{T}_2+c_1.\mathrm{b}_2(\mathrm{T}_3+T_1)/2+c_2.\mathrm{b}_2(\mathrm{T}_4+\mathrm{T}_0)/2+\mathrm{c}_3.\mathrm{b}_2(\mathrm{T}_5+\mathrm{T}_1)/2+\mathrm{c}_4.\mathrm{b}_2(\mathrm{T}_6+\mathrm{T}_2)/2)=(a_0.\mathrm{T}_0+a_1T_1+\mathrm{a}_2T_2)\end{aligned}$$

$$(c_0 + c_1.b_1/2 + c_2.b_2/2).T_0 +$$
$$(c_1 + c_0.b_1 + c_2.b_1/2 + c_1.b_2/2 + c_3.b_2/2).T_1 +$$
$$(c_2 + c_0.b_2 + c_1.b_1/2 + c_3.b_1/2 + c_4.b_2/2).T_2 +$$
$$(c_3 + c_2.b_1/2 + c_4.b_1/2 + c_1.b_2/2).T_3 +$$
$$(c_4 + c_3.b_1/2 + c_2.b_2/2).T_4 +$$
$$(c_4.b_1/2 + c_3.b_2)/2).T_5 +$$
$$(c_4.b_2/2).T_6 = (a_0.T_0 + a_1T_1 + a_2T_2)$$

Igualando termos de mesma ordem:

$$\begin{cases} (c_0 + c_1.b_1/2 + c_2.b_2/2).T_0 = (a_0.T_0) \\ (c_1 + c_0.b_1 + c_2.b_1/2 + c_1.b_2/2 + c_3.b_2/2).T_1 = (a_1T_1) \\ (c_2 + c_0.b_2 + c_1.b_1/2 + c_3.b_1/2 + c_4.b_2/2).T_2 = (a_2T_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} (c_3 + c_2.b_1/2 + c_4.b_1/2 + c_1.b_2/2).T_3 = 0 \\ (c_4 + c_3.b_1/2 + c_2.b_2/2).T_4 = 0 \end{cases}$$

$$(c_4.b_1/2 + c_3.b_2)/2).T_5 = 0 \Rightarrow \text{desprezar}$$
$$(c_4.b_2/2).T_6 = 0 \qquad \Rightarrow \text{desprezar}$$

$$\begin{cases} (c_2/2 + c_4/2).b_1 + c_1.b_2/2 = -c_3 \\ c_3.b_1/2 + c_2.b_2/2 = -c_4 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0. = (c_0 + c_1.b_1/2 + c_2.b_2/2) \\ a_1 = (c_1 + c_0.b_1 + c_2.b_1/2 + c_1.b_2/2 + c_3.b_2/2) \\ a_2 = (c_2 + c_0.b_2 + c_1.b_1/2 + c_3.b_1/2 + c_4.b_2/2) \end{cases}$$

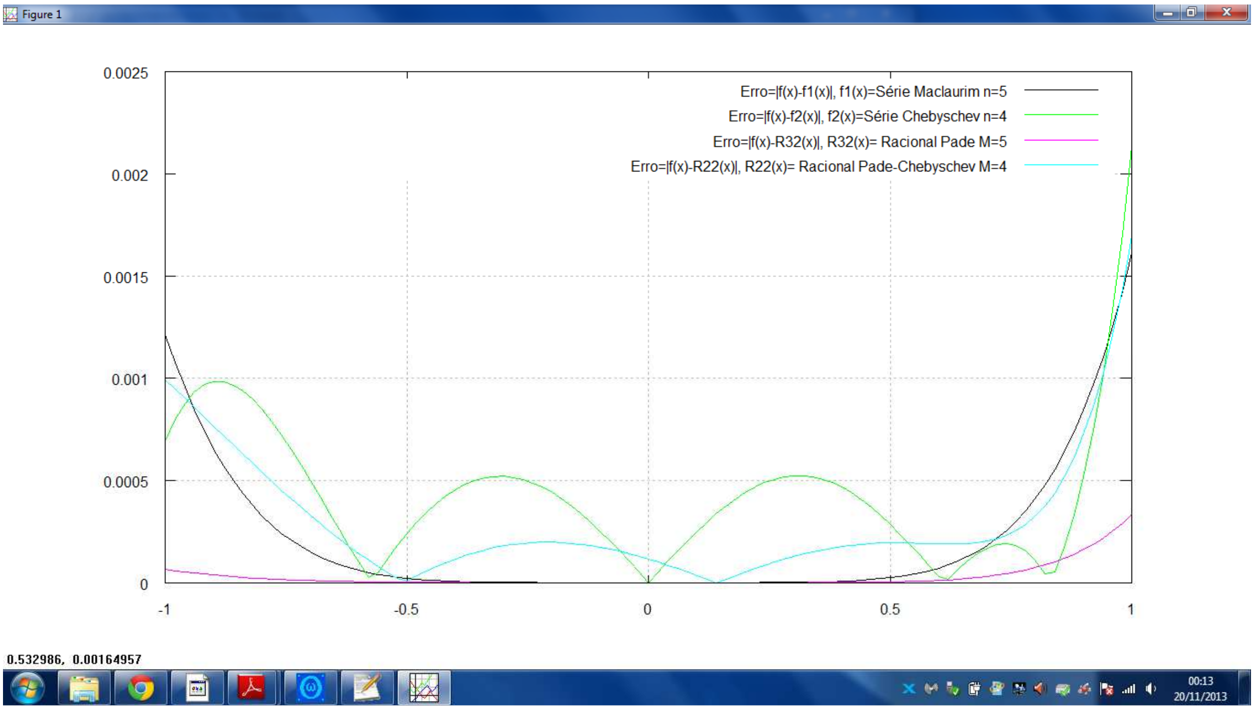
Resolvendos os sistema acima via algortimo abaixo, temos:

```
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------
%Comparativo entre aproximações polinomial, séries de taylor, Chebyschev, Padé e Padé-Chebyschev
%1-Interpolação polinomial para grau n >= 2
a = -1;
b = +1;
n = 5;  %ETmax = M.h^(n+1)/(n+1)=exp(1)*(2/n)^(n+1)/(n+1) => ETmax=0.0018557 para n=5
h = (b-a)/n;
x = a : h : b;
y = exp(x);
tsis = n+1;

for i = 1 : tsis
        A(i,1) = 1;
        for j = 2 : tsis
               A(i,j) = A(i,j-1)*x(i);
        endfor
        A(i, tsis+1) = y(i);
endfor
A
C = fgauss(tsis,A) % coeficientes do polinomio interpolador
```

```
%2-aproximação por serie de maclaurin
%ETmax = M.(x-0)^(n+1)/(n+1)! => ETmax=exp(1)*(1-0)^(n+1)/factorial(n+1)
ETmax=0.0037754 para n=5
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5!

%3-aproximação por serie com polinomios de Chebyschev
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5!
%f1(t) = t0 + t1 + 1/2!*(t2+t0)/2 + 1/3! * (t3 + 3t1)/4 + 1/4! * (t4 +4t2 +3t0)/8 + 1/5! * (t5 + 5t3 +10t1)/16
%f1(t) = (81*t0)/64+(217*t1)/192+(13*t2)/48+(17*t3)/384+t4/192+t5/1920
%f2(t) = (81*t0)/64+(217*t1)/192+(13 t2)/48+(17 t3)/384+t4/192
%f2(x) = (81)/64+(217x)/192+(13*(2x^2-1))/48+(17*(4x^3 - 3x))/384+(8x^4 -8x^2 +1)/192
%f2(x) = 1+(383 x)/384+x^2/2+(17 x^3)/96+x^4/24
%ET(x) ~=0.0037754 para n=5


%4-aproximação racional de padé
%f1(x) = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + x^4/4! + x^5/5! ErroTruncamento1 = 3.7*10-3 (na real 1.6*10-3 visto no grafico)
%R32 = (a0 + a1x + a2x^2 + a3x^3)/(1 + b1x + b2*x^2)
%ET(x) ~=0.0037754 para n=5

 npade = 3;
 mpade = 2;
 M = npade + mpade;

 %determinar coeficientes c
 %c COMEÇA DO 1
 c = [1  1  1/2  1/6  1/24  1/120] %o c(0) foi trocado por c(1) e etc =D

 %calcular os Bs

A=[
        [c(3) c(4) -c(5)]; %o c(0) foi trocado por c(1) e etc pq o octave começa do 1
        [c(4) c(5) -c(6)];
  ];


baux= fgauss(mpade, A); %b começa em 1 mesmo, igual a formula do pade, pois bo=1 sempre.
b(1)=baux(2)
b(2)=baux(1)      %o b(0) NÃO foi trocado por b(1), pois só usamos b(1 e b(2)
b(3) = 0 %para m=2
 %calcular os As

 a(1) = c(1);                    %o a(0) foi trocado por a(1) e etc =D
 a(2) = b(1)*c(1) + c(2);
 a(3) = b(2)*c(1) + b(1)*c(2) + c(3);
 a(4) = b(3)*c(1) + b(2)*c(2) + b(1)*c(3) + c(4);

%R32 = (a1 + a2x + a3x^2 + a4x^3)/(1 + b1x + b2*x^2)

%5-aproximação racional de Padé sobre serie com polinomios de Chebyschev de M=4 termos
```

```
%f2(t) = (81*t0)/64+(217*t1)/192+(13 t2)/48+(17 t3)/384+t4/192
%R22(x)=(a1.T0 + a2.T1+ a3.T2 )/(1 + b1.T1 + b2.T2)

 npade2 = 2;
 mpade2 = 2;
 M2 = npade2 + mpade2;

 %determinar coeficientes c
 %c COMEÇA DO 1
 c2 = [81/64 217/192 13/48 17/384 1/192]

 %calcular os b's

A2=[
        [(c2(3)/2+c2(5)/2) c2(2)/2 -c2(4)]; %o c(0) foi trocado por c(1) e etc pq o octave começa do 1
        [ c2(4)/2          c2(3)/2 -c2(5)];
  ];
b2= fgauss(mpade2, A2); %b começa em 1 mesmo, igual a formula do pade, pois bo=1 sempre.

 a2(1) = c2(1)                          +c2(2)*b2(1)/2+c2(3)*b2(2)/2; %o a(0) foi trocado por a(1) e etc =D
 a2(2) = c2(2)+c2(1)*b2(1)+c2(3)*b2(1)/2+c2(2)*b2(2)/2+c2(4)*b2(2)/2;
 a2(3) = c2(3)+c2(1)*b2(2)+c2(2)*b2(1)/2+c2(4)*b2(1)/2+c2(5)*b2(2)/2;

np = 20*n;
ap = -1;
bp = 1;
hp = (bp-ap)/np;
xp = ap:hp:bp;
yep = exp(xp);
for i = 1 : np+1
        yip(i) = resto(n, C, xp(i));
endfor
yst = 1 .+ xp .+ xp.^2 ./ factorial(2) .+ xp.^3 ./ factorial(3) .+ xp.^4 ./ factorial(4) .+ xp.^5 ./ factorial(5);
ysc = 1 .+(383 .*xp)./384 +xp.^2 ./2 .+(17 .*xp.^3)./96 .+xp.^4 ./24;
ypade = (a(0+1) + a(1+1) .*xp + a(2+1) .*xp.^2 + a(3+1) .*xp.^3) ./(1 + b(1) .*xp + b(2) .*xp.^2);
ypade2 = (a2(0+1)*1 + a2(1+1) .*xp + a2(2+1) .*(2.*xp.^2.-1) ) ./(1 + b2(1) .*xp + b2(2) .*(2.*xp.^2-1));

Et=abs(yep-yst);
Ec=abs(yep-ysc);
Ep=abs(yep-ypade);
Epc=abs(yep-ypade2);

plot(xp,Et,"k;Erro=|f(x)-f1(x)|, f1(x)=Serie Maclaurim n=5;",xp,Ec,"g;Erro=|f(x)-f2(x)|, f2(x)=Serie Chebyschev n=4;", xp, Ep, "m; Erro=|f(x)-R32(x)|, R32(x)= Racional Pade M=5;", xp, Epc, "c; Erro=|f(x)-R22(x)|, R22(x)= Racional Pade-Chebyschev M=4;")
```

%plot(xp,yep,"r;F(x)=exp(x);", xp,yip,"b;Pn(x) interpolador n=5;", xp, yst, "k;Serie Maclaurin n=5;", xp, ysc, "g; Serie Chebyschev M=4;", xp, ypade, "m; Pade R32;", xp, ypade2, "c; Pade-Chebyschev R22;")
Grid



Conclusão: os Erros da aproximação racional de Chebyschev-Padé com M=4 se mantem de forma distribuída e na mesma ordem da série de Chebyschev. Padé com M=5 é bem superior às demais aproximações de mesmo número de termos.

Exercício:
Para $f(x) = e^x$ determine
a). o polinômio aproximador de Chebyshev de grau M=4;
b). a aproximação racional $R_{22}(x)$ a partir do aproximador de Chebyshev em x e calcule os erros exatos. Compare com $e^x \cong R_{22}(x) = \dfrac{12+6x+x^2}{12-6x+x^2}$ $\Rightarrow$ $E_{max} = 0{,}0039961$;
c). a aproximação racional $R_{40}(x)$ a partir do aproximador de Chebyshev e calcule os erros exatos. Compare com $e^x \cong R_{40}(x) = 1 + x + \dfrac{x^2}{2} + \dfrac{x^3}{6} + \dfrac{x^4}{24}$ $\Rightarrow$ $E_{max} = 0{,}0099485$;
d). a aproximação racional $R_{04}(x)$ a partir do aproximador de Chebyshev e calcule os erros exatos. Compare com $e^x \cong R_{04}(x) = \dfrac{1}{1 - x + \dfrac{x^2}{2} - \dfrac{x^3}{6} + \dfrac{x^4}{24}}$ $\Rightarrow$ $E_{max} = 0{,}051615$;