Matemática Computacional

Aula 5 - Interpolação polinomial

Ricardo Moura

Definição de desvio

Definition

Dispondo de n pares ordenados (x_i, y_i) de números reais e de uma função $g(x)$. uma função de ajustamento aos pontos dados, chama-se **desvio** na abcissa x_i a

$$d(x_i) = d_i = y_i - g(x_i)$$

Vários critérios de ajustamento baseiam-se na minimização da soma destes desvios.

Critério dos mínimos quadrados: caso discreto

Este método consiste em achar uma função de ajustamento, $g(x)$ a uma série de n pares ordenados (x_i, y_i), minimizando

$$R_g = \sum_{i=1}^{n} (y_i - g(x_i))^2.$$

Para o mesmo número n de pares de ordenados, $g(x)$ terá melhor ajustamento que $h(x)$ se

$$R_g < R_h$$

Regressão Linear

Regressão linear refere-se ao ajustamento por uma reta de acordo com o critério dos mínimos quadrados. A função que procuramos é

$$g(x) = a_0 + a_1 x,$$

e o que pretendemos é minimizar

$$R(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2.$$

função de duas variáveis. Logo, para minimizar basta encontrar a_0 e a_1 tal que:

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial a_0} = 0 \\ \frac{\partial R}{\partial a_1} = 0 \end{cases} .$$

Regressão Linear

O algoritmo do método dos mínimos quadrados para a regressão linear consiste em estabelecer e resolver o seguinte ***sistema normal***

$$\begin{bmatrix} \sum 1 & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_o \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{bmatrix}.$$

Nota 1: Havendo pelo menos dois pontos com abcissas distintas, o sistema normal é possível e determinado.

Nota 2: A solução é minimizante de $R(a_0, a_1)$.

Example

Considerando os seguintes 5 pares ordenados $(0.013, 0.11), (0.024, 0.23), (0.038, 0.33), (0.048, 0.45), (0.067, 0.58)$ qual é a função proveniente da regressão linear?

Solução: $g(x) = 0.008956 + 8.712x$.

Regressão Linear

Para que passe na origem, a função de ajustamento seria $g(x) = mx$ e, assim, teríamos de minimizar

$$R(m) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - mx_i)^2$$

De seguida, teríamos a resolução de

$$\frac{\partial R}{\partial m} = 0 \Leftrightarrow m = \frac{\sum xy}{\sum x^2}.$$

Theorem

A reta de regressão linear $y = a_0 + a_1 x$ passa pelo ponto M, de coordenadas $(\bar{x}, \bar{y})$.

Nota: Se trocarmos as variáveis x por y, a reta de regressão proveniente desta troca não irá coincidir com a inicial a menos que $R = 0$

Regressão Linear como $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$

O problema consiste em encontrar uma solução de mínimos quadrados para o sistema $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

e a sua solução vem de resolver

$$\mathbf{A}'.\mathbf{A} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \mathbf{A}'.\mathbf{B} \quad \text{onde} \quad \mathbf{A}'.\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sum 1 & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}'.\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{bmatrix}.$$

Corollary

$\mathbf{X}$ *é solução de mínimos quadrados do sistema* $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$ *sse é solução de* $\mathbf{A}'\mathbf{AX} = \mathbf{A}'\mathbf{B}$.

Regressão quadrática

Encontrar polinómio $a_0 + a_1x + a_2x^2$ que se ajuste aos dados. Neste caso, pretendemos encontrar a solução de mínimos quadrados do sistema: $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

e a sua solução vem de resolver

$$\mathbf{A}'.\mathbf{A} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \mathbf{A}'.\mathbf{B} \quad \text{onde} \quad \mathbf{A}'.\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sum 1 & \sum x & \sum x^2 \\ \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \end{bmatrix}$$

$$, \quad \mathbf{A}'.\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum xy \\ \sum x^2 y \end{bmatrix}.$$

Regressão quadrática

Example

Dada a tabela

x	y
0	2
2	4
4	6
6	12

determine um polinómio, de grau máximo e não superior a 2, que se ajusta aos pontos tabelados, segundo o critério de mínimos quadrados.
Solução: $2.2 + 0.1x + 0.25x^2$

Outras regressões

De forma análoga, podemos fazer regressão cúbica, etc. No entanto, devemos notar que se houver muitos dados fornecido (matriz $\mathbf{A}$ é grande) ou se o polinómio for de grande ordem ($\mathbf{A}'\mathbf{A}$ grande), os sistemas $\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{A}'\mathbf{B}$ costumam estar mal condicionados.

Definição

Definition

Um polinómio $p(x)$ de grau $n-1$ diz-se **interpolador de um conjunto de n pontos** $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$ se

$$\forall i = 1, ..., n : p(x_i) = y_i.$$

Este polinómio interpolador, será o polinómio de menor grau que interpola os pontos.
É usual chamar aos x_i nós ou nodos da interpolação e valores nodais aos y_i.
São habitualmente utilizados para estimar $f(\hat{x})$ para um $\hat{x} \neq x_i$, não se sabendo para já sobre a qualidade desta estimativa/aproximação.

Definição

Example

$$p_1(x) = 2x + 1$$
$$p_2(x) = 2x^2 + 1$$
$$p_3(x) = -2x^2 + 4x + 1$$

são polinómios interpoladores dos pontos tabelados:

x	y
0	1
1	3

Se quiséssemos aproximar $f(0.8)$ através de $p_i(0.8)$, obteríamos valores diferentes em cada caso.

Definição

Se na tabela existirem dois pontos iguais, ou seja, para $i \neq j$ temos $(x_i, y_i) = (x_j, y_j)$, dever-se-á retirá-lo pois está repetido.
Se para certos $i \neq j$, tivermos $x_i \neq x_j$ mas, no entanto, $y_i = y_j$, então não existe polinómio interpolador para o conjunto de pontos dado.
O objetivo resume-se a resolver

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^k \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ 1 & x_n & \dots & x_n^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

Exemplo sem fórmula geral

Example

Considerando a tabela seguinte de valores de uma função $y = f(x)$.

x	y
1.0	0.84
1.3	0.96
1.9	0.95

Determine o polinómio, de grau mínimo, que interpola os pontos.
Determine um valor aproximado de $f(1.65)$. Sabendo que na verdade $f(x) = sen(x)$, determine o erro relativo da interpolação anterior.
Solução: $p(x) = -0.162 + 1.465x - 0.463x^2$ polinómio de grau 2.
$f(1.65) \approx p(1.65) = 0.995$
Estimativa do erro relativo, sabendo que
$f(1.65) = sen(1.65) = 0.996865...$:

$$\delta = \frac{|0.9969 - 0.995|}{|0.9969|} = 0.0019(0.19\%)$$

Teorema da existência

Theorem

Sejam $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ um conjunto de n pares ordenados com $x_i \neq x_j$, $\forall i \neq j$, então o sistema de equações lineares

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & \ldots & x_1^k \\ 1 & x_2 & \ldots & x_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \ldots \\ a_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

- *no caso de $k < n - 1$, só tem solução para determinados valores de y_i. Quando a solução existe, é única. Quando não existe, procura-se uma solução de mínimos quadrados;*
- *no caso de $k = n - 1$, tem sempre solução e esta é única;*
- *no caso de $k \geq n$, tem solução e para cada solução $p(x)$, os polinómios $p(x) + (x - x_1)(x - x_2) \ldots (x - x_n).r(x)$ são também soluções.*

Interpolação de Lagrange

O polinómio interpolador segundo a fórmula de interpolação de Lagrange será dado por:

$$p(x) = \sum_{k=1}^{n} y_k . L_k(x)$$

onde os **polinómios de Lagrange** são:

$$L_k(x) = \frac{\prod_{l=1, l \neq k}^{n} (x - x_l)}{\prod_{l=1, l \neq k}^{n} (x_k - x_l)}.$$

Exemplo

Example

Considerando a tabela seguinte de valores de uma função $y = f(x)$.

x	y
1	25
3	38
4	45
7	40
8	58

Determine um valor aproximado de y para $x = 7.4$, usando uma interpolação linear:
Para a interpolação linear, o polinómio interpolador segundo a fórmula de Lagrange será obtido através de linear
$p_1(x) = L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2 = \frac{x-x_2}{x_1-x_2}y_1 + \frac{x-x_1}{x_2-x_1}y_2$.

Exemplo

Example

Vamos escolher os dois últimos para interpolar $x = 7.4$; o critério da escolha dos pontos será desenvolvido aquando do estudo do erro da interpolação.

$$p_1(x) = \frac{x-8}{7-8} \times 40 + \frac{x-7}{8-7} \times 58$$

$$f(7.4) \approx p(7.4) = \frac{7.4-8}{-1} \times 40 + \frac{7.4-7}{1} \times 58 = 47.2$$

Se quiséssemos um interpolador quadrático teríamos

$$p_2(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} y_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} y_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} y_3$$

$$p_2(7.4) = \frac{(7.4-7)(7.4-8)}{(4-7)(4-8)} 45 + \frac{(7.4-4)(7.4-8)}{(7-4)(7-8)} 40 + \frac{(7.4-4)(7.4-7)}{(8-4)(8-7)} 58 = 46$$

Diferenças divididas

A fórmula de Lagrange envolve demasiados produtos e quocientes comprometendo a estabilidade do método. Usando o polinómio interpolador, na forma de Lagrange, para uma interpolação com n nós, se quisermos adicionar um nó, todo o trabalho feito terá de ser perdido. O mesmo não acontece com a forma de Newton que iremos explicar.

Theorem

Se tivermos à partida o polinómio $p_{n-1}(x)$, então

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + a_n(x - x_1)\dots(x - x_n)$$

onde

$$a_n = \frac{y_{n+1} - p_n(x_{n+1})}{(x_{n+1} - x_1)(x_{n+1} - x_2)\dots(x_{n+1} - x_n)}$$

e onde $y_{n+1} = p_n(x_{n+1}) = f(x_{n+1})$.

Diferenças divididas

Definition

- Diferença dividida de ordem 0 da função f, relativamente a x_i, é
$$\Delta^0 y[x_i] = y_i$$
- De ordem 1, relativamente a x_i e x_j, é
$$\Delta^1 y[x_i, x_j] = \frac{y_j - y_i}{x_j - x_i}$$
- De ordem 2, relativamente a x_i, x_{i+1} e x_{i+2}, é
$$\Delta^2 y[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{\Delta^1 y[x_{i+1}, x_{i+2}] - \Delta^1 y[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i}$$

Diferenças divididas

Definition

- Diferença dividida de ordem n da função f, relativamente a x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+n}, é

$$\Delta^n y[x_i, \ldots, x_{i+n}] = \frac{\Delta^{n-1} y[x_{i+1}, \ldots, x_{i+n}] - \Delta^{n-1} y[x_i, \ldots, x_{i+n-1}]}{x_{i+n} - x_n} =$$

- Diferença dividida de ordem $n-1$ da função f, relativamente a x_1, x_2, ..., x_n, é

$$\Delta^{n-1} y[x_1, \ldots, x_n] = \sum_{k=1}^{n} \left(y_k \prod_{l=1, l \neq k}^{n} \frac{1}{x_k - x_l} \right)$$

Diferenças divididas

O polinómio interpolador dos valores $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ pode-se escrever através da fórmula de interpolação com diferenças divididas, chamada forma de Newton, como:

$$p_n(x) = \Delta^0 y[x_1] + \Delta^1 y[x_1, x_2](x - x_1) + \Delta^2 y[x_1, x_2, x_3](x - x_1)(x - x_2)$$
$$+ \cdots + \Delta^{n-1} y[x_1, \ldots, x_n] \prod_{i=1}^{n-1} (x - x_i)$$

Example

Considerando $y = f(x)$, tabelada como:

x	0	1	3	4	7	9
$f(x)$	0	1	1.73	2	2.65	3

Qual o valor de $f(4.4)$?

Diferenças divididas

Example

Comecemos por construir uma tabela com todas as diferenças divididas calculadas recursivamente:

x	$f(x) = \Delta^0 y$	$\Delta^1 y$	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$
4	2	0.27	-0.0133	0.00307	-0.00603	0.000642
3	1.73	0.23	-0.0225	0.0272	-0.00282	
7	2.65	0.275	-0.104	0.0103		
1	1	1	-0.0834			
0	0	0.333				
9	3					

$p_1(x) = y_1 + \Delta^1 y[x_1, x_2](x - x_1) = 2 + 0.27(x - 4)$

$p_2(x) = y_1 + \Delta^1 y[x_1, x_2](x - x_1) + \Delta^2 y[x_1, x_2, x_3](x - x_1)(x - x_2) =$
$2 + 0.270(x - 4) - 0.0133(x - 4)(x - 3)$

$p_3(x) = 2 + 0.270(x-4) - 0.0133(x-4)(x-3) + 0.00307(x-4)(x-3)(x-7)$

etc...

Erro

Depois de considerar o teorema

Theorem

Dados os pontos $x_i \in [a, b], i = 1, \ldots, n$ reais diferentes, dada uma função $f(x)$ com derivada contínua até ordem $n-1$, então $\exists c \in [a, b]$:

$$f^{(n-1)}(c) = (n-1)!\Delta^{n-1}y[x_1, ..., x_n]$$

A fórmula do erro de $p(x)$ como aproximação de $f(x)$ é dada por

$$E(f(x), p(x)) = \left| \frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n) \right|$$

Nota: $\Delta^{n-1}y[x_1, ..., x_n]$ serão então aproximações de $\frac{f^{(n-1)}(x)}{(n-1)!}$ para valores em $[a, b]$.

Diferenças finitas

Se as abcissas forem igualmente espaçadas, ou seja,

$$h = x_{i+1} - x_i = \frac{x_n - x_1}{n-1}$$

a **diferença finita** de ordem 1 será:

$$\Delta^1 y_i = y_{i+1} - y_i$$

de ordem 2

$$\Delta^2 y_i = \Delta^1(\Delta^1 y_i) = \Delta^1 y_{i+1} - \Delta^1 y_i$$

de ordem k (inteiro não negativo)

$$\Delta^k y_i = \Delta^1(\Delta^{k-1} y_i) = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i = k! \times h^n \times \Delta^k y[x_i, ..., x_{i+k}]$$

tendo para $k = 0$, $\Delta^0 y_i = y_i$. E, dessa forma, pode-se escrever

$$p(x) = y_i + \sum_{i=1}^{n-1} \left(\prod_{k=1}^{i} (x - x_i) \right) \frac{\Delta^i y_i}{i! \times h^n}$$

Diferenças finitas

Example

x	y	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
2	13				
		65			
3	78		110		
		175		84	
4	253		194		24
		369		108	
5	622		302		
		671			
6	1293				

$$p_2(x) = 13 + (x-2) \times \frac{65}{1! \times 1} + (x-2)(x-3) \times \frac{110}{2! \times 1^2}$$
$$p_2^*(x) = 78 + (x-3) \times \frac{175}{1! \times 1} + (x-3)(x-4) \times \frac{194}{2! \times 1^2}$$

Derivação numérica

Tendo em conta o seguinte resultado:

$$f(x) - p_{n-1}(x) = \frac{f^n(c)}{n!}(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_n)$$

é equivalente a dizer que

$$f(x) = p_{n-1}(x) + \frac{f^n(c)}{n!}\prod_{i=1}^{n}(x - x_i)$$

e daí podermos concluir que

$$f'(x) = p'_{n-1}(x) + \frac{f^n(c)}{n!}\prod_{i=1}^{n-1}(x - x_i)$$

para valores x no intervalo que contem os pontos x_i. Portanto, podemos agora criar várias fórmulas para calcular $f'(a)$.

Derivação numérica

Com dois pontos $x_1 = a$, $x_2 = a + h$:

$$f'(a) = \frac{1}{h}(f(a) - f(a+h)) - \frac{h}{2}f''(c), c \in [a, a+h]$$

Com dois pontos $x_1 = a - h$, $x_2 = a$:

$$f'(a) = \frac{1}{h}(f(a-h) - f(a)) - \frac{h}{2}f''(c), c \in [a-h, a]$$

Com três pontos $x_1 = a - h$, $x_2 = a$ e $x_3 = a + h$:

$$f'(a) = \frac{1}{2h}(f(a+h) - f(a-h)) - \frac{h^2}{6}f'''(c), c \in [a-h, a+h]$$