

⇒ Interpolação Inversa

- Sejam $x_0, x_1, \dots, x_n$ **nós** pertencentes ao intervalo $[a, b]$ e
sejam $y_0, y_1, \dots, y_n$ os **valores nodais** de uma função $f \in C([a, b])$:

x_i	x_0	x_1	$\dots$	x_n
y_i	y_0	y_1	$\dots$	y_n

- Se a função f possuir **inversa**, g , podemos escrever

$$y = f(x) \iff x = g(y)$$

- E assim os nós e os valores nodais **trocam de papel**:

y_i	y_0	y_1	$\dots$	y_n
x_i	x_0	x_1	$\dots$	x_n

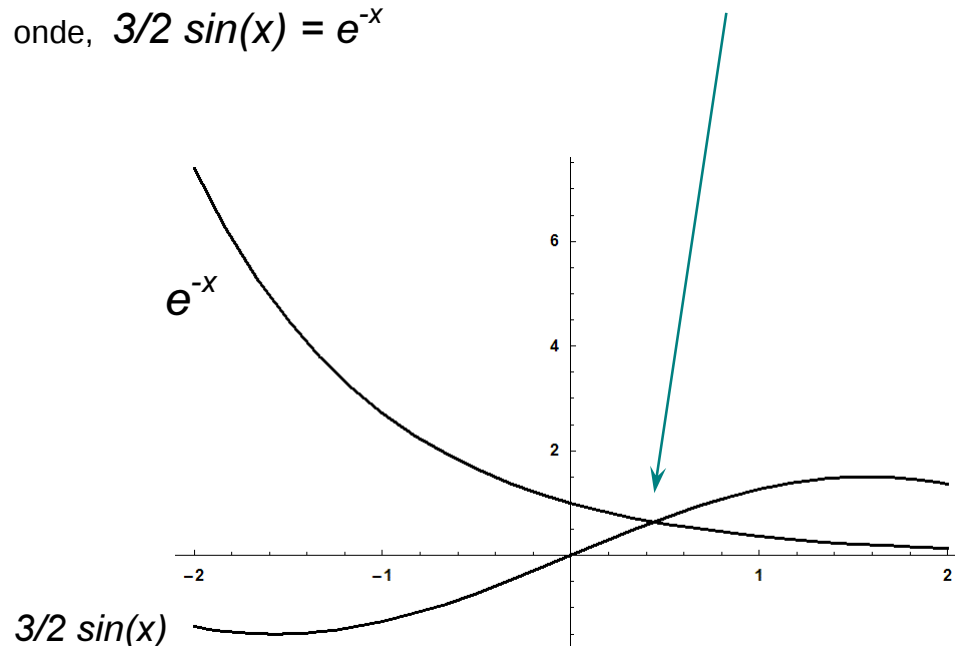
- Podemos pois construir o polinómio interpolador que **interpole os valores nodais** $x_0, x_1, \dots, x_n$ nos **nós** $y_0, y_1, \dots, y_n$.

Neste caso, trata-se de uma **Interpolação Inversa**.

- Utilizamos a Interpolação Inversa, por exemplo, quando **não conhecemos a função inversa** e pretendemos determinar a que valor de x correspondente a um dado $f(x)$.

exemplo: Determinar um valor aproximado do **ponto no intervalo $[0,1]$**

onde, $\frac{3}{2} \sin(x) = e^{-x}$



Consideremos a **função diferença**,

$$f(x) = \frac{3}{2} \sin(x) - e^{-x}$$

e procuremos um **zero** de $f(x)$ em $[0,1]$, isto é, um ponto s onde $f(s) = 0$

Nos extremos do intervalo: $f(0) = -1$

$$f(1) = 0.89433$$

a função tem **sinais contrários** , portanto **tem** (pelo menos) uma **raiz**.

E como $f(x)$ é **estritamente crescente em $[0, 1]$** (derivada positiva) então:

- a raiz é **única**
- a função **admite inversa**, $g(y)$, nesse intervalo. Logo,

$$f(s) = 0 \Leftrightarrow s = g(0)$$

Utilizando **interpolação inversa**,

vamos calcular o valor de um **polinómio interpolador de $g(y)$** no ponto **0**.

Escolhemos alguns **nós no intervalo** e calculamos:

x	0	0.4	0.6	1
$y = f(x)$	-1.00000	-0.08619	0.29815	0.89433

e construindo uma tabela de **diferenças divididas**,

y	x	$x[,]$	$x[, ,]$	$x[, , ,]$
-1.00000	0			
		0.43773		
-0.08619	0.4		0.06366	
		0.52037		0.04745
0.28815	0.6		0.15356	
		0.67094		
0.89433	1			

obtemos a forma de Newton do **polinómio interpolador**,

$$p(y) = 0 + 0.43773(y + 1) + 0.06366(y + 1)(y + 0.08619) + \\ + 0.04745(y + 1)(y + 0.08619)(y - 0.28815)$$

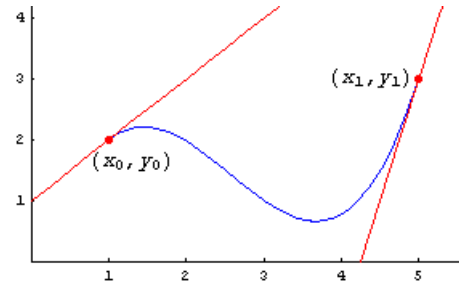
E assim podemos calcular $s = g(0) \approx p(0) = \mathbf{0.44200}$

e verificar que efectivamente, $f(0.44200) = -0.00113 \approx 0$

Portanto $\mathbf{x = 0.44200}$ é uma aproximação do ponto em $[0,1]$ onde $3/2 \sin(x) = e^{-x}$

⇒ Interpolação de Hermite

Para além dos valores do polinómio interpolador serem **iguais aos valores da função** nos nós de interpolação, vamos exigir também que sejam **iguais os valores das suas derivadas**.



definição: O **Polinómio Interpolador de Hermite** $H_{2n+1}(x)$

satisfaz **$2(n + 1)$** condições:

- Condições sobre a **função f** :

$$H_{2n+1}(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

- Condições sobre a **derivada** da função f :

$$H'_{2n+1}(x_i) = f'_i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

- Como a função e o polinómio interpolador são **tangentes** nos nós, esta **interpolação** chama-se **osculatória**.
- Demonstra-se que o polinómio H_{2n+1} , de grau menor ou igual a **$2n + 1$** **existe e é único**.

* **Construção do Polinómio Interpolador de Hermite na forma de Newton**

- A construção do polinómio interpolador de Hermite tem por base a **ligação** entre as **diferenças divididas** e as sucessivas **derivadas** da função
- Na **forma de Newton**, substituir os nós $x_0, x_1, \dots, x_n$ pelos nós $x_0, x'_0, x_1, x'_1, \dots, x_n, x'_n$ e considerar $x'_k \rightarrow x_k$, para $k = 0, 1, \dots, n$ de tal modo que,

$$\overbrace{\lim_{x'_k \rightarrow x_k} f[x_k, x'_k]}^{f[x_k, x_k]} = \lim_{x'_k \rightarrow x_k} \frac{f(x_k) - f(x'_k)}{x_k - x'_k} = f'(x_k)$$

- A interpolação é assim realizada sobre **$2n+2$ pontos** e o **polinómio interpolador de Hermite** de **grau $2n+1$** na forma de Newton é dado por:

$$\begin{aligned} H_{2n+1}(x) = & f(x_0) + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + \\ & f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1) + \dots + \\ & f[x_0, x_0, \dots, x_n, x_n](x - x_0)^2(x - x_1)^2 \dots (x - x_{n-1})^2(x - x_n) \end{aligned}$$

- Por exemplo, para construir o **polinómio cúbico de Hermite**, basta construir a seguinte tabela de **diferenças divididas**, sobre $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1$:

x_i	f_i	$f[\cdot, \cdot]$ ou D	$f[\cdot, \cdot, \cdot]$ ou D^2	$f[\cdot, \cdot, \cdot, \cdot]$ ou D^3
x_0	f_0			
		$f[x_0, x_0] = f'_0$		
x_0	f_0		$f[x_0, x_0, x_1]$	
		$f[x_0, x_1]$		$f[x_0, x_0, x_1, x_1]$
x_1	f_1		$f[x_0, x_1, x_1]$	
		$f[x_1, x_1] = f'_1$		
x_1	f_1			

derivadas da função nos pontos

e depois calcular,

$$\begin{aligned}
 H_3(x) = & f(x_0) + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + \\
 & f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1)
 \end{aligned}$$

exemplo: Com $f(x) = \ln(x)$, calcular uma aproximação para $f(1.5)$

usando **interpolação cúbica de Hermite**,

sabendo que $f(1) = 0$ $f'(1) = 1$

$f(2) = 0.693147$ $f'(2) = 0.5$

Construção da tabela de diferenças divididas:

x_i	f_i	$f[\cdot, \cdot]$ ou D	$f[\cdot, \cdot, \cdot]$ ou D^2	$f[\cdot, \cdot, \cdot, \cdot]$ ou D^3
$x_0 = 1$	$f_0 = 0$	$f'_0 = 1$		
$x_0 = 1$	$f_0 = 0$		$f[x_0, x_0, x_1] = -0.306853$	
		$f[x_0, x_1] = 0.693147$		$f[x_0, x_0, x_1, x_1] = 0.113706$
$x_1 = 2$	$f_1 = 0.693147$		$f[x_0, x_1, x_1] = -0.193147$	
		$f'_1 = 0.5$		
$x_1 = 2$	$f_1 = 0.693147$			

Cálculo do **polinómio interpolador cúbico**:

$$\begin{aligned}
 H_3(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + \\
 &\quad f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1) \\
 &= 0 + 1(x - 1) - 0.306853(x - 1)^2 + 0.113706(x - 1)^2(x - 2)
 \end{aligned}$$

donde, $f(1.5) \approx H_3(1.5) = \mathbf{0.409074}$

(e podemos verificar que efectivamente $\ln(1.5) = 0.405465\dots$)

* Erro da Interpolação de Hermite

O **teorema geral** do **erro da interpolação polinomial** (pág. 29) continua válido.

Se $f \in \mathbf{C}^{2n+2}([a, b])$, para **qualquer** $\hat{x} \in [a, b]$ **existe** um $\xi \in (a, b)$,

$$\begin{aligned} e_{2n+1}(\hat{x}) &\equiv f(\hat{x}) - H_{2n+1}(\hat{x}) \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (\hat{x} - x_0)^2 (\hat{x} - x_1)^2 \cdots (\hat{x} - x_n)^2 \end{aligned}$$

para o **exemplo** anterior:

$$e_3(1.5) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (1.5 - 1)^2 (1.5 - 2)^2, \quad \xi \in (1, 2)$$

ou,

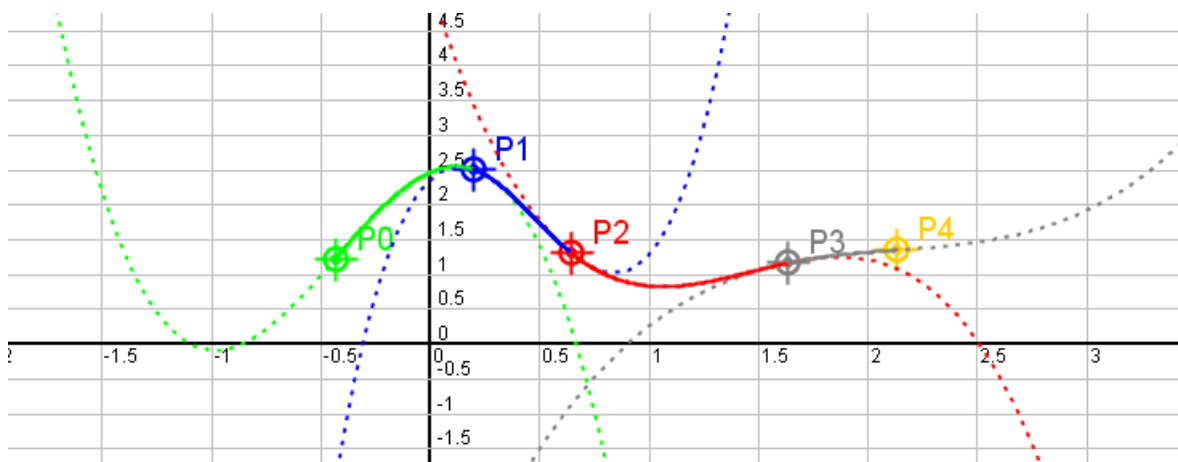
$$|e_3(1.5)| \leq \frac{M}{4!} 0.5^4$$

onde
$$M \geq \max_{x \in [1,2]} |f^{(4)}(x)| = \max_{x \in [1,2]} \left| \frac{-6}{x^4} \right| = 6$$

e portanto
$$|e_3(1.5)| \leq 0.2 \times 10^{-1}$$

⇒ Interpolação Polinomial Segmentada

- A interpolação de $n+1$ nós **com um só polinómio** exige que esse polinómio tenha grau n . Os polinómios de **grau muito elevado** apresentam efeitos indesejáveis.
- Em vez de **um só polinómio** para interpolar **todos os pontos**, a **interpolação segmentada** consiste em utilizar diferentes polinómios interpoladores para **interpolar sucessivos pares** de dados.
- Deste modo, é possível utilizar **polinómios de baixo grau** em cada segmento.



* Funções Spline

definição: Uma função S_m é uma **função spline polinomial de grau m** ($m \geq 1$) relativamente aos nós $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ quando:

- S_m coincide em cada subintervalo $[x_k, x_{k+1}]$ com um polinómio $S_{m,k}$ de **grau menor ou igual a m** , isto é,

$$S_{m,k} = S_m|_{[x_k, x_{k+1}]} \in \mathbb{P}_m \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

- $S_m \in C^{m-1}[a, b]$

observações:

- Qualquer polinómio interpolador de grau m em $[a, b]$ é um spline.
- Contudo, tipicamente, um spline é representado através de diferentes polinómios de grau $\leq m$, um para cada subintervalo
- Um spline pode apresentar descontinuidades na sua m -ésima derivada nos nós internos $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$.
- As duas condições anteriores não são suficientes para caracterizar univocamente um spline.

Vejamos:

- Podemos representar cada polinómio $S_{m,k} = S_m | [x_k, x_{k+1}]$ por

$$S_{m,k}(x) = \sum_{i=0}^m s_{ik} (x - x_k)^i$$

para $x \in [x_k, x_{k+1}]$, $k = 0, 1, \dots, n-1$

Logo, temos $(m + 1) n$ coeficientes s_{ik} para determinar.

- A partir da continuidade das derivadas, temos que

$$S_{m,k-1}^{(j)}(x_k) = S_{m,k}^{(j)}(x_k)$$

para $j = 0, 1, \dots, m-1$ e $k = 1, 2, \dots, n-1$

Donde resultam $m(n-1)$ condições.

- Como o spline é **interpolador da função f** nos **$n + 1$** nós,

$$S_m(x_k) = f(x_k) \quad \text{para } k = 0, 1, 2, \dots, n$$

temos mais **$n + 1$ condições**.

- Assim, temos **$(m + 1)n$ incógnitas**
e apenas **$m(n - 1) + (n + 1) = (m + 1)n - (m - 1)$ condições**.
- Restam **$m - 1$ graus de liberdade**.
- Por isso podemos **impor mais condições** aos splines, como por exemplo, tentar **minimizar a curvatura** fora do intervalo **$[a, b]$** , como é o caso dos

Splines naturais :

se para **$m = 2l - 1$** , com **$l \geq 2$** tivermos,

$$S_m^{(l+j)}(a) = S_m^{(l+j)}(b) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, l - 2$$

como veremos para **$m = 3$** .

* Spline Interpolador Linear

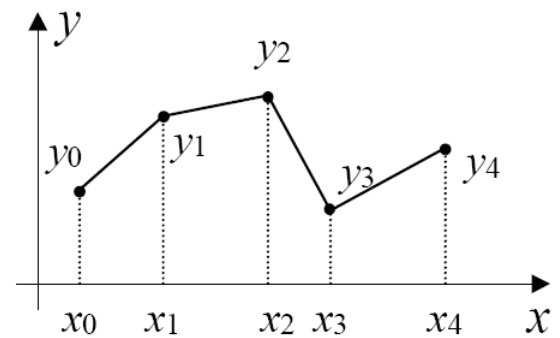
Para o **suporte de interpolação** $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$

com $x_0 < x_1 < \dots < x_n$

a **função de spline linear**

consiste simplesmente num

caminho poligonal ao longo dos pontos.



- Seja $y_k = f(x_k)$, para $k = 0, 1, \dots, n$.

O **segmento de recta** no intervalo $[x_k, x_{k+1}]$ é dado por,

$$S_{1,k}(x) = f(x_k) + f[x_k, x_{k+1}](x - x_k)$$

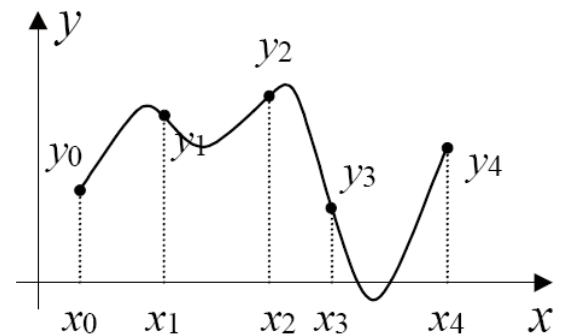
$$\text{com } f[x_k, x_{k+1}] = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{x_{k+1} - x_k}$$

- Portanto a **função interpoladora spline linear** pode escrever-se,

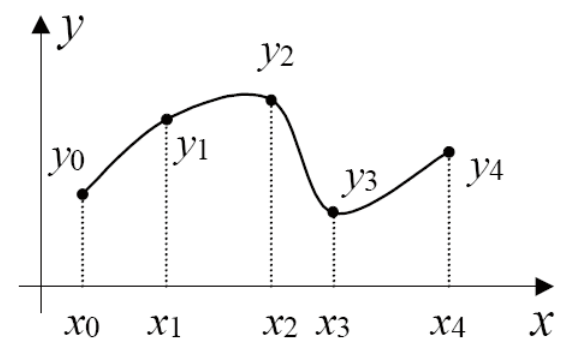
$$S_m(x) = \begin{cases} S_{1,0}(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0), & x \in [x_0, x_1] \\ S_{1,1}(x) = f(x_1) + f[x_1, x_2](x - x_1), & x \in [x_1, x_2] \\ \vdots \\ S_{1,n-1}(x) = f(x_{n-1}) + f[x_{n-1}, x_n](x - x_{n-1}), & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

- Os “bicos” aparecem porque a função interpoladora **não é diferenciável** em cada nó interno.
- Os **splines lineares** não são obviamente uma boa solução para a maior parte dos problemas reais de interpolação.

- A **função de spline quadrática** consiste numa sucessão de **arcos de parábola**.



- Os **splines quadráticos** também não são muito utilizados, por geralmente apresentarem **grandes oscilações**.
- Os splines mais utilizados são, sem dúvida, os **splines cúbicos**.
Cada polinómio tem apenas grau ≤ 3 e tanto a primeira como a segunda derivadas são contínuas em cada nó.



* Spline Interpolador Cúbico

definição: Consideremos o suporte de interpolação $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ com $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ e $y_k = f(x_k)$, para $k = 0, 1, \dots, n$.

Uma função S_3 é um **spline cúbico interpolador** de $f(x)$ nos nós $x_0, x_1, \dots, x_n$ se existirem n **polinómios** de grau ≤ 3 $S_{3,k}$ com $k = 0, 1, \dots, n-1$ tais que:

(em cada intervalo, a função spline coincide com um polinómio)

$$S_3(x) = S_{3,k}(x) \quad \text{para} \quad x \in [x_k, x_{k+1}],$$

$$k = 0, 1, \dots, n-1$$

(a função spline interpola nos pontos)

$$S_3(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, n$$

(os polinómios ligam-se nos nós internos de forma contínua, sendo também contínuas a primeira e a segunda derivadas)

$$\begin{aligned} S_{3,k}(x_{k+1}) &= S_{3,k+1}(x_{k+1}), & k &= 0, 1, \dots, n-2 \\ S'_{3,k}(x_{k+1}) &= S'_{3,k+1}(x_{k+1}), & k &= 0, 1, \dots, n-2 \\ S''_{3,k}(x_{k+1}) &= S''_{3,k+1}(x_{k+1}), & k &= 0, 1, \dots, n-2 \end{aligned}$$

- Neste caso ($m = 3$) temos $m - 1 = 2$ **graus de liberdade** o que nos permite escolher **mais 2 condições** a introduzir.

definições: Uma **função spline cúbica** diz-se:

- spline cúbico **natural** se,

$$S''_{3,0}(x_0) = S''_{3,n-1}(x_n) = 0$$

- spline cúbico **completo** se,

$$S'_{3,0}(x_0) = f'(x_0)$$

$$S'_{3,n-1}(x_n) = f'(x_n)$$

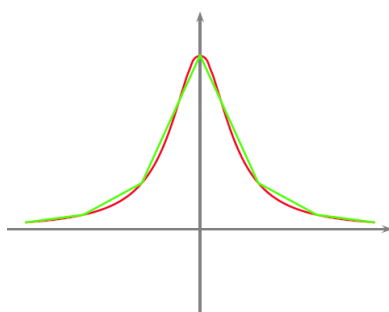
- spline cúbico **periódico** se,

$$S'_{3,0}(x_0) = S'_{3,n-1}(x_n)$$

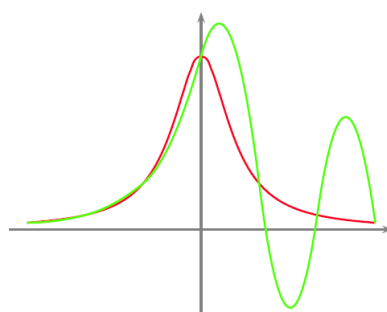
$$S''_{3,0}(x_0) = S''_{3,n-1}(x_n)$$

exemplos:

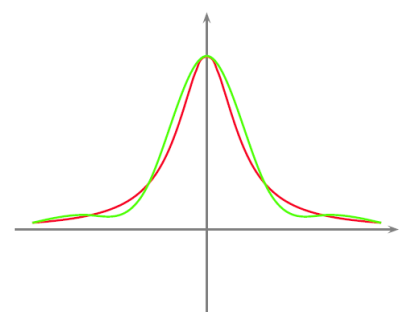
da utilização de splines, na interpolação da **função de Runge** com 7 pontos:



linear



quadrático



cúbico natural

* Erro de Interpolação para Funções Spline Cúbicas

teorema: Sejam $f \in C^{(4)}([x_0, x_n])$ e $x_0 < x_1 < \dots < x_n$.

e seja S_3 a **função spline cúbica** interpoladora de f em $x_0, x_1, \dots, x_n$

Se,

$$\max_{x \in [x_0, x_n]} |f^{(4)}(x)| \leq M$$

e

$$h = \max_{i=0, \dots, n-1} (x_{i+1} - x_i)$$

então,

$$\max_{x \in [x_0, x_n]} |f(x) - S_3(x)| \leq \frac{5}{384} M h^4$$

e

$$\max_{x \in [x_0, x_n]} |f'(x) - S'_3(x)| \leq \frac{1}{24} M h^3$$

* Construção de um Spline Cúbico

Dado um conjunto de $n+1$ **pontos** $\{(x_k, f(x_k))\}, k = 0, 1, \dots, n\}$

em **cada intervalo** $[x_k, x_{k+1}], k = 0, 1, \dots, n-1$ temos:

$$S_{3,k}(x) = f(x_k) + a_k(x - x_k) + b_k(x - x_k)^2 + c_k(x - x_k)^3$$

$$S_{3,k}(x) = f(x_k) + a_k(x - x_k) + b_k(x - x_k)^2 + c_k(x - x_k)^3$$

onde $a_0, b_0, c_0, a_1, b_1, c_1, \dots, a_{n-1}, b_{n-1}, c_{n-1}$
são as **3n incógnitas** a determinar.

Como se trata de polinómios interpoladores,

$$S_{3,k}(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

e para garantir a **continuidade** nos nós, temos **n condições**,

$$S_{3,k}(x_{k+1}) = S_{3,k+1}(x_{k+1})$$

$$S_{3,k}(x_{k+1}) = f(x_{k+1}), \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

ou, fazendo $h_k = x_{k+1} - x_k$ temos,

$$f(x_k) + a_k h_k + b_k h_k^2 + c_k h_k^3 = f(x_{k+1}), \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Para garantir a **continuidade da primeira derivada**, temos mais **n-1 condições**,

$$S'_{3,k}(x_{k+1}) = S'_{3,k+1}(x_{k+1}), \quad k = 0, 1, \dots, n-2$$

Neste caso podemos calcular,

$$S'_{3,k}(x) = a_k + 2b_k(x - x_k) + 3c_k(x - x_k)^2$$

$$S'_{3,k+1}(x) = a_{k+1} + 2b_{k+1}(x - x_{k+1}) + 3c_{k+1}(x - x_{k+1})^2$$

ou seja,

$$a_k + 2b_k h_k + 3c_k h_k^2 = a_{k+1} \quad , \quad k = 0, 1, \dots, n-2$$

Para garantir a **continuidade da segunda derivada**, temos mais **$n-1$ condições**,

calculando, a partir de,

$$S''_{3,k}(x) = 2b_k + 6c_k(x - x_k)$$

$$S''_{3,k+1}(x) = 2b_{k+1} + 6c_{k+1}(x - x_{k+1})$$

temos,

$$\boxed{b_k + 3c_k h_k = b_{k+1}} \quad , \quad k = 0, 1, \dots, n-2$$

Deste modo, temos **$3n$ incógnitas** para **$3n-2$ equações**.

A solução mais comum consiste em utilizar **splines cúbicos naturais**, onde,

$$S''_{3,0}(x_0) = S''_{3,n-1}(x_n) = 0$$

ou,

$$b_0 = 0;$$

$$\boxed{b_{n-1} + 3c_{n-1}h_{n-1} = 0}$$

Deste modo já temos um **sistema linear** de **$3n$ equações** a **$3n$ incógnitas**.

Por outro lado, podemos calcular,

$$a_k = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h_k} - b_k h_k - c_k h_k^2, \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

$$c_k = \frac{b_{k+1} - b_k}{3h_k}, \quad k = 0, 1, \dots, n-2$$

$$c_{n-1} = -\frac{b_{n-1}}{3h_{n-1}}$$

e substituir em

$$a_k + 2b_k h_k + 3c_k h_k^2 = a_{k+1}$$

Assim, em vez de a_k , b_k , c_k , as **incógnitas** são apenas os b_k , e temos apenas que resolver um **sistema linear** de **n equações** a **n incógnitas**.

$$Hb = g$$

onde,

$$H = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & \\ & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & h_{n-3} & 2(h_{n-3} + h_{n-2}) & h_{n-2} \\ & & & & h_{n-2} & & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{bmatrix}$$

e $g_0 = 0$

$$g_i = 3 \left(\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_i} - \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h_{i-1}} \right), \quad i = 1, \dots, n-1$$

⇒ Interpolação Trigonométrica

- Dada uma função $f: [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}$ **periódica**, isto é, $f(0) = f(2\pi)$

pretendemos aproximá-la por um **polinómio trigonométrico** φ

que **interpole** f nos **$n+1$ nós**, $x_j = \frac{2\pi}{n+1}j$, $j = 0, 1, \dots, n$

$$\varphi(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, n$$

- Quando **n é par**, a **função de interpolação trigonométrica** (o polinómio trigonométrico) tem a forma,

$$\varphi(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^M [a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)]$$

onde $M = n/2$

- Quando **n é ímpar**, a **função de interpolação trigonométrica** tem a forma,

$$\varphi(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^M [a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)] + a_{M+1} \cos((M+1)x)$$

onde $M = (n-1)/2$

- Recordemos a **fórmula de Euler**,

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$



- Para **n par** podemos reescrever, $\varphi(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^M [a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)]$ como,

$$\varphi(x) = \sum_{k=-M}^M c_k e^{ikx}$$

estando os **coeficientes complexos** a_k, b_k, c_k relacionados por,

$$a_k = c_k + c_{-k}, \quad b_k = i(c_k - c_{-k}), \quad k = 0, \dots, M$$

porque,

$$\begin{aligned} \sum_{k=-M}^{k=M} c_k e^{ikx} &= \\ &= \sum_{k=-M}^{k=M} c_k (\cos(kx) + i \sin(kx)) \\ &= \sum_{k=1}^{k=M} [c_k (\cos(kx) + i \sin(kx)) + c_{-k} (\cos(kx) - i \sin(kx))] + c_0 \end{aligned}$$

- De modo análogo para **n ímpar** podemos reescrever,

$$\varphi(x) = \sum_{k=-(M+1)}^{M+1} c_k e^{ikx}$$

onde os c_k são os mesmos e $c_{M+1} = c_{-(M+1)} = \frac{a_{M+1}}{2}$

- Juntando os **dois casos**, temos:

$$\varphi(x) = \sum_{k=-(M+\mu)}^{M+\mu} c_k e^{ikx}$$

com $\mu = 0$ se n par
 $\mu = 1$ se n ímpar

Se a função só tiver **valores reais**, então $c_{-k} = \overline{c_k}$

e nesse caso os **coeficientes** a_k e b_k são todos **reais**.

- Pela sua analogia com as **séries de Fourier**, $\varphi(x)$ chama-se **série discreta de Fourier**.

* **Interpolação por séries discretas de Fourier**

- Tomando os pontos $x_j = jh$, com $h = 2\pi/(n+1)$ como **nós de interpolação**, temos,

$$\sum_{k=-(M+\mu)}^{M+\mu} c_k e^{ikjh} = f(x_j), \quad j = 0, \dots, n$$

- Resta **calcular os valores** dos c_k , $k = -(M+\mu), \dots, M+\mu$

Multipliquemos por $e^{-imx_j} = e^{-imjh}$ onde m é um inteiro entre 0 e n .

e **somemos** para todo o j ,

$$\sum_{j=0}^n \sum_{k=-(M+\mu)}^{M+\mu} c_k e^{ikjh} e^{-imjh} = \sum_{j=0}^n f(x_j) e^{-imjh}$$

- Provemos agora um **resultado auxiliar**,

$$\sum_{j=0}^n e^{ijh(k-m)} = (n+1)\delta_{km}$$

onde δ_{km} é o delta de Kronecker

- Para $k = m$ ambos os termos são **iguais** a $(n+1)$ e o resultado é verdadeiro.
- Para $k \neq m$ provemos que o somatório se **anula**.

Usando a relação,

$$\begin{aligned} 1 - \left(e^{ih(k-m)} \right)^{n+1} &= \\ &= 1 - e^{ih(k-m)(n+1)} \\ &= 1 - e^{i(k-m)2\pi} \\ &= 1 - \cos((k-m)2\pi) - i \sin((k-m)2\pi) \end{aligned}$$

e somando para todo o j , efectivamente,

$$\sum_{j=0}^n e^{ijh(k-m)} = \frac{1 - \left(e^{ih(k-m)} \right)^{n+1}}{1 - e^{ih(k-m)}} = 0$$

quando $k \neq m$

- Retomando o **cálculo dos valores** dos c_k , $k = -(M + \mu), \dots, M + \mu$ na relação,

$$\sum_{j=0}^n \sum_{k=-(M+\mu)}^{M+\mu} c_k e^{ikjh} e^{-imjh} = \sum_{j=0}^n f(x_j) e^{-imjh}$$

e utilizando o resultado auxiliar, temos finalmente,

$$c_k = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n f(x_j) e^{-ikjh}$$

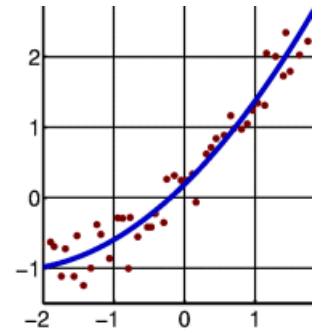
$$k = -(M + \mu), \dots, M + \mu$$

- Para efectuar estes cálculos existe vasta gama de **algoritmos muito eficientes**, de complexidade $O(n \log n)$, conhecidos pelas designação genérica de **FFT (Fast Fourier Transform)**.
- Todos os **sistemas de computação numérica e simbólica**, tais como o MATLAB, possuem funções para calcular **Transformadas de Fourier** e suas **Inversas**, bem como para o cálculo da **interpolação trigonométrica** de um conjunto de pontos e correspondente **visualização gráfica** do resultado.

⇒ Aproximação dos Mínimos Quadrados

- Em muitos casos reais, os **valores nodais** que temos foram obtidos experimentalmente, vindo portanto **afectados de erros**.

Em vez de tentar construir uma função interpoladora, faz mais sentido procurar a **função que melhor aproxima** esses valores.



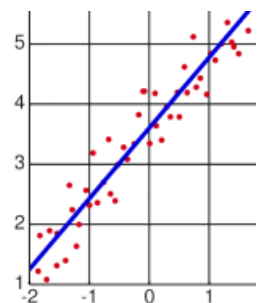
- Seja $\{ (x_i, y_i) \}, i = 1, 2, \dots, m$ um conjunto de pares de números reais onde,

$$y_i \approx f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, m$$

A partir destes valores, pretendemos construir uma função que, **de alguma forma**, seja **a melhor aproximação** da função $f(x)$.

- Tomemos **como exemplo o caso linear**, isto é, quando a função interpoladora pretendida for uma recta **$y = ax + b$** .

Para calcular os parâmetros **a** e **b** , podem ser estabelecidos **diferentes critérios**, tais como:



- Minimizar o **erro máximo**, $\max_{i=1, \dots, m} |y_i - (ax_i + b)|$

- Minimizar a **soma dos erros**, $\sum_{i=1}^m |y_i - (ax_i + b)|$

- Minimizar o **erro quadrático**, $\sum_{i=1}^m [y_i - (ax_i + b)]^2$

* Funções aproximantes e desvios

- No caso geral, o problema consiste em determinar a **função que melhor aproxima** um dado conjunto de pontos $\{ (x_i, y_i) \}, i = 1, 2, \dots, n$.

- A **classe das funções aproximantes** é caracterizada por um conjunto de **parâmetros** $c_1, c_2, \dots, c_k$.

Cada função da classe é especificada pelos **valores** desses parâmetros,

$$f(x) = F(x; c_1, c_2, \dots, c_k)$$

- Por exemplo,
 - se pretendermos aproximar os pontos por uma **recta**, são dois os parâmetros: c_1 e c_2 ,

$$f(x) = F(x; c_1, c_2) = c_1 + c_2 x$$

- se pretendermos aproximar os pontos por uma **parábola**, são três os parâmetros: c_1, c_2 e c_3 ,

$$f(x) = F(x; c_1, c_2, c_3) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2$$

- Para cada classe definem-se os **desvios**, em relação aos valores y_i dos dados,

$$d_i = y_i - F(x_i; c_1, c_2, \dots, c_k), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

- Em função dos desvios, é necessário decidir qual o **critério** a estabelecer. Cada critério define um **problema de minimização**.

- Problema de **minimax** (minimização do desvio máximo),

$$\text{minimizar} \quad \max_{i=1, \dots, n} |y_i - F(x_i; c_1, c_2, \dots, c_k)|$$

- Problema de minimização (da soma) dos **desvios absolutos**,

$$\text{minimizar} \quad \sum_{i=1}^n |y_i - F(x_i; c_1, c_2, \dots, c_k)|$$

- Problema de minimização do **erro quadrático total**,

$$\text{minimizar} \quad \sum_{i=1}^n (y_i - F(x_i; c_1, c_2, \dots, c_k))^2$$

O método de resolução do problema **de minimização do erro quadrático total** chama-se **método dos mínimos quadrados** e a função que o minimiza chama-se **aproximação dos mínimos quadrados**.

* **Método dos Mínimos Quadrados**

- Considere-se uma classe de funções,

$$F(x; c_1, c_2, \dots, c_k) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) \dots + c_k f_k(x)$$

onde $f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)$ são funções dadas.

- A **aproximação dos mínimos quadrados** consiste na determinação dos **parâmetros** $c_1, c_2, \dots, c_k$ que **minimizam a soma dos quadrados dos desvios**,

$$\begin{aligned} E(c_1, \dots, c_k) &= \sum_{i=1}^n \left(y_i - c_1 f_1(x_i) - c_2 f_2(x_i) - \dots - c_k f_k(x_i) \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^k c_j f_j(x_i) \right)^2 \end{aligned}$$

- Tratando-se de um problema de minimização em $\mathbb{R}^k$, para que $E(c_1, c_2, \dots, c_k)$ seja **mínimo** é necessário que,

$$\nabla E(c_1, \dots, c_k) = 0 \iff \frac{\partial E}{\partial c_j} = 0, \quad j = 1, \dots, k$$

- Onde se obtém um **sistema de k equações** a k incógnitas,

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 \sum_{i=1}^n f_1^2(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^n f_1(x_i)f_2(x_i) + \dots + c_k \sum_{i=1}^n f_1(x_i)f_k(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i f_1(x_i) \\ c_1 \sum_{i=1}^n f_2(x_i)f_1(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^n f_2^2(x_i) + \dots + c_k \sum_{i=1}^n f_2(x_i)f_k(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i f_2(x_i) \\ c_1 \sum_{i=1}^n f_k(x_i)f_1(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^n f_k(x_2)f_2(x_i) + \dots + c_k \sum_{i=1}^n f_k^2(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i f_k(x_i) \end{array} \right.$$

- Em certos casos, este sistema tem solução única e permite determinar univocamente os parâmetros $c_1, c_2, \dots, c_k$ que caracterizam a **melhor função aproximante**.

* *Recta dos Mínimos Quadrados (Recta de Regressão)*

- No **caso linear**, o **problema da minimização do erro quadrático** é simples.

Pretendemos determinar os valores de a e de b em,

$$F(x; a, b) = a + bx$$

que minimizam,

$$E(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2$$

- Para que $E(a, b)$ seja **mínimo** é necessário (e prova-se que também suficiente) que,

$$\nabla E(a, b) = 0 \iff \begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial b} = 0 \end{cases}$$

ou seja que,

$$\begin{cases} an + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases}$$

- Assim temos um sistema linear com **duas equações** (**equações normais**) e as **duas incógnitas** a e b que caracterizam a recta pretendida (**recta de regressão**).

- Os coeficientes de a e de b e os termos independentes, obtém-se facilmente pela construção de uma tabela,

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
x_1	y_1	x_1^2	$x_1 y_1$
x_2	y_2	x_2^2	$x_2 y_2$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
x_n	y_n	x_n^2	$x_n y_n$
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x_i^2$	$\sum x_i y_i$

exemplo: Para determinar a **recta de regressão** que aproxima os pontos,

x	1	2	4	5	7	8	10
y	1	2	4	4	5	6	7

construímos a **tabela**,

	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
	1	1	1	1
	2	2	4	4
	4	4	16	16
	5	4	25	20
	7	5	49	35
	8	6	64	48
	10	7	100	70
Σ	37	29	259	194

$$\begin{cases} an + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases}$$

donde obtemos o **sistema**,

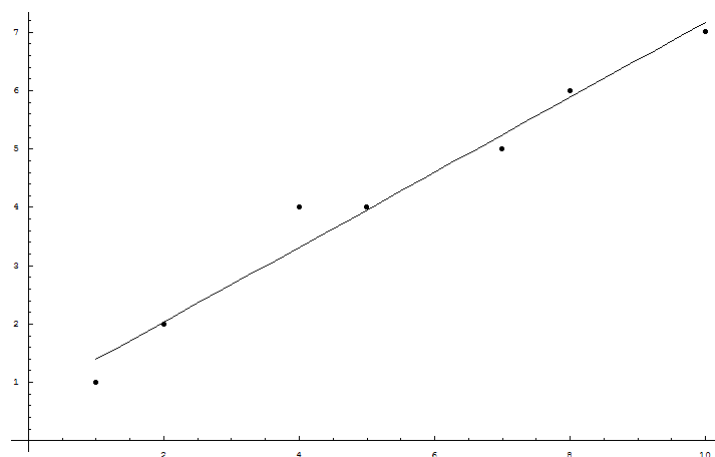
$$\begin{cases} 7a + 37b = 29 \\ 37a + 259b = 194 \end{cases}$$

cujas **solução** é $a = 0.75$

$$b = 0.6418918918919$$

o que permite determinar a **recta de regressão**,

$$y = 0.75 + 0.6418918918919x$$



- Em algumas aplicações, são os valores de $\{x_i\}$, $i = 1, 2, \dots, n$ que estão **afectados de erros**, sendo os $\{y_i\}$ **considerados exactos**.

Nesse caso é necessário efectuar uma **aproximação inversa**.

- Assim, dado $\{(x_i, y_i)\}$, $i = 1, 2, \dots, n$ um conjunto de pares de números reais onde,

$$x_i \approx g(y_i), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

podemos calcular uma **aproximação dos mínimos quadrados** para $g(y)$.

Para o mesmo exemplo:

Basta **trocar os papéis** dos X e y dados,

x	1	2	4	5	7	8	10
y	1	2	4	4	5	6	7

construindo neste caso a **tabela**,

x_i	y_i	y_i^2	$y_i x_i$
1	1	1	1
2	2	4	4
4	4	16	16
5	4	16	20
7	5	25	35
8	6	36	48
10	7	49	70
Σ	37	29	147

donde obtemos o **sistema**,

$$\begin{cases} 7a + 29b = 37 \\ 29a + 147b = 194 \end{cases}$$

cujas **solução** é $a = -0.994680851064$

$$b = 1.5159574468085$$

o que permite determinar a **recta de regressão inversa**,

$$x = -0.994680851064 + 1.5159574468085 y$$

* *Parábola dos Mínimos Quadrados*

- Para aproximar o conjunto de pontos por uma **parábola**, pretendemos determinar os valores de a , b e c em,

$$F(x; a, b, c) = a + bx + cx^2$$

por forma a **minimizar o erro quadrático total**,

$$E(a, b, c) = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i - cx_i^2)^2$$

- Para que ocorra o **mínimo** é necessário (e prova-se que também suficiente) que,

$$\nabla E(a, b, c) = 0$$

ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} an + b \sum_{i=1}^n x_i + c \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \end{array} \right.$$

- Os coeficientes de a de b e de c e os termos independentes, também se obtém pela construção de uma **tabela**,

Para o mesmo exemplo:

x	1	2	4	5	7	8	10
y	1	2	4	4	5	6	7

construímos a **tabela**

	x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
	1	1	1	1	1	1	1
	2	2	4	8	16	4	8
	4	4	16	64	256	16	64
	5	4	25	125	625	20	100
	7	5	49	343	2401	35	245
	8	6	64	512	4096	48	384
	10	7	100	1000	10000	70	700
Σ	37	29	259	2053	17395	194	1502

donde obtemos o **sistema**,

$$\begin{cases} 7a + 37b + 259c = 29 \\ 37a + 259b + 2053c = 194 \\ 259a + 2053b + 17395c = 1502 \end{cases}$$

cuja **solução** é

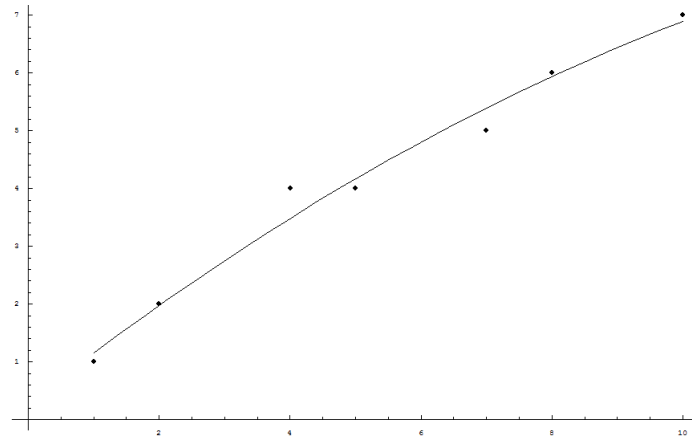
$$a = 0.28869047619$$

$$b = 0.890625$$

$$c = -0.02306547619$$

o que permite determinar a **parábola** que aproxima os pontos,

$$y = 0.28869047619 - 0.890625 x + 0.02306547619 x^2$$



* **Polinómios de Mínimos Quadrados e outras funções**

- Por vezes é necessário aproximar o conjunto de **n** pontos por um **polinómio** geral, de grau **$m \leq n - 1$** ,

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m$$

por forma a **minimizar o erro quadrático total**,

$$E(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n (y_i - p_m(x_i))^2$$

- Tal como nos casos anteriores, para que ocorra o **mínimo** é necessário (e prova-se que também suficiente) que,

$$\nabla E(a_0, a_1, \dots, a_m) = 0$$

- Desta condição, obtém-se um **sistema linear** de $m + 1$ equações com $m + 1$ incógnitas, também chamadas equações normais.

Também se prova que este sistema tem uma única solução.

- Contudo, particularmente no caso de polinómios de grau elevado, este sistema tende a ser **mal condicionado**. Por isso são utilizados **polinómios de baixo grau**, ou técnicas mais complexas de reformulação.

- Por vezes é mesmo necessário procurar funções aproximantes que **não são polinómios**, como por exemplo,

$$y = b e^{ax}$$

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

$$y = b x^a$$

$$y = \frac{a}{x} + b$$

$$y = \frac{a}{x + b}$$

- O problema continua a ser a determinação dos parâmetros a e b .

Contudo, a **aplicação directa** do Método dos Mínimos Quadrados a estas classes de funções traduz-se pela resolução de **Sistemas de Equações Não Lineares**, cujas soluções são obtidas apenas de forma aproximada.

- Em alternativa, é usual efectuar uma **linearização do problema** (ou **linearização do modelo**).

exemplo: Aproximar por uma função da forma $y = a x^b$ os pontos,

x	1	1.2	1.6	2
y	1	1.3	1.4	1.7

Aplicando uma **transformação logarítmica** à fórmula original,

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

e efectuando uma **mudança de variáveis**,

$$Y = \ln y$$

$$A = \ln a$$

$$X = \ln x$$

obtemos uma **relação linear**,

$$Y = A + b X$$

que aproximamos pelo método do mínimos quadrados.

Construída a tabela, obtemos o sistema,

$$\begin{cases} 4 A + 1.34547 b = 1.12946 \\ 1.34547 A + 0.73460 b = 0.57378 \end{cases}$$

cujas **solução** é, $A = 0.05144 \Rightarrow a = e^A = 1.05247$

$$b = 0.68741$$

Portanto, a **função aproximante** é,

$$y = 1.05247 x^{0.68741}$$

- Note-se que, os parâmetros assim obtidos **não são óptimos dentro do critério dos mínimos quadrados**. Isto acontece porque eles, de facto, **ajustam o problema linearizado** e não o problema original.

exercício (4):

Considere a seguinte tabela de valores exactos de uma função f ,

x	0	1	2
$f(x)$	3	1	4

Sabendo-se que $f'''(x) = 12$ para todo o x , determine o polinómio de grau três interpolador de f .

o problema:

Pretende-se um **polinómio interpolador de grau 3**,

mas apenas são dados **3 nós de interpolação**.

Por outro lado, sabemos que $f'''(x) = 12$ para todo o X .

Como utilizar esta informação?

uma abordagem ingénua:

Se $f'''(x) = 12$ para todo o X , podemos deduzir que,

$$f(x) = 2x^3 + g(x)$$

onde $g(x)$ tem terceira derivada nula e portanto pode ser aproximada por um **polinómio de grau 2**.

De $g(x) = f(x) - 2x^3$ calculamos:

x	0	1	2
$f(x)$	3	1	4
$g(x)$	3	-1	-12

e construímos:

x_i	$g(x_i)$	D^1	D^2
0	3		
		-4	
1	-1		-7/2
		-11	
2	-12		

donde obtemos o polinómio interpolador de grau 2 para $g(x)$,

$$\begin{aligned} p_2(x) &= 3 - 4(x-0) - 7/2(x-0)(x-1) \\ &= -7/2 x^2 - 1/2 x + 3 \end{aligned}$$

e portanto para $f(x)$ temos o **polinómio de grau 3**,

$$p_3(x) = 2x^3 - 7/2 x^2 - 1/2 x + 3$$

uma abordagem mais elegante:

Sabemos que (pp. 20-21) existe **pelo menos um ponto** ξ onde,

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)$$

Mas neste caso **sabemos também que** $f'''(x) = 12$ **para todo o X.**

Portanto, **para todo o x,**

$$D^3 = f[x_0, x_1, x_2, x_3] = 12 / 3! = \mathbf{2}$$

e podemos efectivamente construir a tabela:

x_i	$f(x_i)$	D^1	D^2	D^3
0	3			
		-2		
1	1		5/2	
		3		2 
2	4		.	
		.		
.	.			

e obter o **polinómio interpolador de grau 3** para $f(x)$,

$$\begin{aligned} p_3(x) &= 3 - 2(x-0) + 5/2(x-0)(x-1) + 2(x-0)(x-1)(x-2) \\ &= 2x^3 - 7/2x^2 - 1/2x + 3 \end{aligned}$$

exercício (9):

Seja f uma função definida num intervalo $[a, b]$.

- (a) Mostre que as diferenças divididas de 1ª ordem $f[x_0, x_1]$ relativas a quaisquer dois pontos distintos $x_0, x_1 \in [a, b]$ são independentes de x_0 e de x_1 se, e só se, f é um polinómio de grau um.
- (b) Mostre que se $f(x) = u(x)v(x)$ onde u e v são duas funções definidas em $[a, b]$, então
- $$f[x_0, x_1] = u(x_0)v[x_0, x_1] + u[x_0, x_1]v(x_1), \quad x_0, x_1 \in [a, b], \quad x_0 \neq x_1.$$
- (c) Supondo que f é um polinómio de 2º grau com duas raízes reais, deduza das alíneas anteriores o valor das diferenças divididas $f[x_0, x_1]$, $x_0 \neq x_1$.

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

- (a) Se $f(x)$ for um **polinómio de grau 1**

uma resposta: $\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$ é o **declive da recta** que passa pelos dois pontos $(x_0, f(x_0))$ e $(x_1, f(x_1))$.

Será **independente dos pontos** se e só se $f(x)$ for uma **recta**.

outra resposta: Sabemos que existe pelo menos um ponto ξ onde,

$$f[x_0, x_1] = f'(\xi)$$

Por isso, $f[x_0, x_1]$ poderá ser **independente dos pontos** x_0 e x_1 considerados apenas quando a **derivada** $f'(x)$ for **constante**, ou seja se e só se $f(x)$ for um **polinómio do 1º grau**.

(b) Se $f(x)=u(x).v(x)$

provemos que $f[x_0, x_1] = u(x_0) \cdot v[x_0, x_1] + u[x_0, x_1] \cdot v(x_1)$

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

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

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

$$= \frac{u(x_1).v(x_1) - u(x_0).v(x_0) + u(x_0).v(x_1) - u(x_0).v(x_1)}{x_1 - x_0}$$

$$= \frac{-u(x_0).v(x_0) + u(x_0).v(x_1)}{x_1 - x_0} + \frac{u(x_1).v(x_1) - u(x_0).v(x_1)}{x_1 - x_0}$$

$$= u(x_0) \cdot \frac{v(x_1) - v(x_0)}{x_1 - x_0} + v(x_1) \cdot \frac{u(x_1) - u(x_0)}{x_1 - x_0}$$

$$= u(x_0) v[x_0, x_1] + u[x_0, x_1] v(x_1)$$

{ ou vice versa ...}

- (c) Se $f(x)$ for um **polinómio do 2º grau** com **duas raízes reais** α e β , então podemos escrever,

$$f(x) = c \underbrace{(x - \alpha)}_{u(x)} \underbrace{(x - \beta)}_{v(x)}$$

e considerar,

de modo a poder utilizar o resultado de (b),

$$f[x_0, x_1] = u(x_0) \cdot v[x_0, x_1] + u[x_0, x_1] \cdot v(x_1)$$

Por outro lado $u(x)$ e $v(x)$ são **polinómios de grau 1** portanto, por (a),

$u[x_0, x_1]$ e $v[x_0, x_1]$ são **independentes** da escolha de pontos x_0 e x_1 .

Então podemos calculá-las nas raízes, isto é, fazer $x_0 = \alpha$ e $x_1 = \beta$.

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

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

Facilmente verificamos que $u[\alpha, \beta] = c$

$$v[\alpha, \beta] = 1$$

E assim, $f[x_0, x_1] = u(x_0) \cdot v[\alpha, \beta] + u[\alpha, \beta] \cdot v(x_1)$

$$= c(x_0 - \alpha) + c(x_1 - \beta)$$

por exemplo: Para $f(x) = 3(x-1)(x-2)$

x_i	$f(x_i)$	D^1	D^2	D^3
0	6	-6		
1	0	0	3	0
2	0	6	3	0
3	6	12	3	0
4	18	21	3	
6	60			
...				

verifique que, para todo o $k = 0, 1, 2, \dots$

$$D^1 f(x_k) = f[x_k, x_{k+1}] = 3(x_k - 1) + 3(x_{k+1} - 2)$$

Note ainda que,

$$D^2 f(x_k) = c \quad \text{para todo o } k = 0, 1, 2, \dots$$

Porquê?

e que,

$$D^3 f(x_k) = 0 \quad \text{para todo o } k = 0, 1, 2, \dots$$

Porquê?