

Interpolação e Ajuste de Curvas

TMEC-001 Cálculo Numérico

Prof. Luciano K. Araki

Motivação

- Dados: em geral, fornecidos em um conjunto discreto de valores. Por exemplo: propriedades físicas tabeladas ou resultados experimentais.
- Muitas vezes, é necessário utilizar valores intermediários aos fornecidos.

Motivação

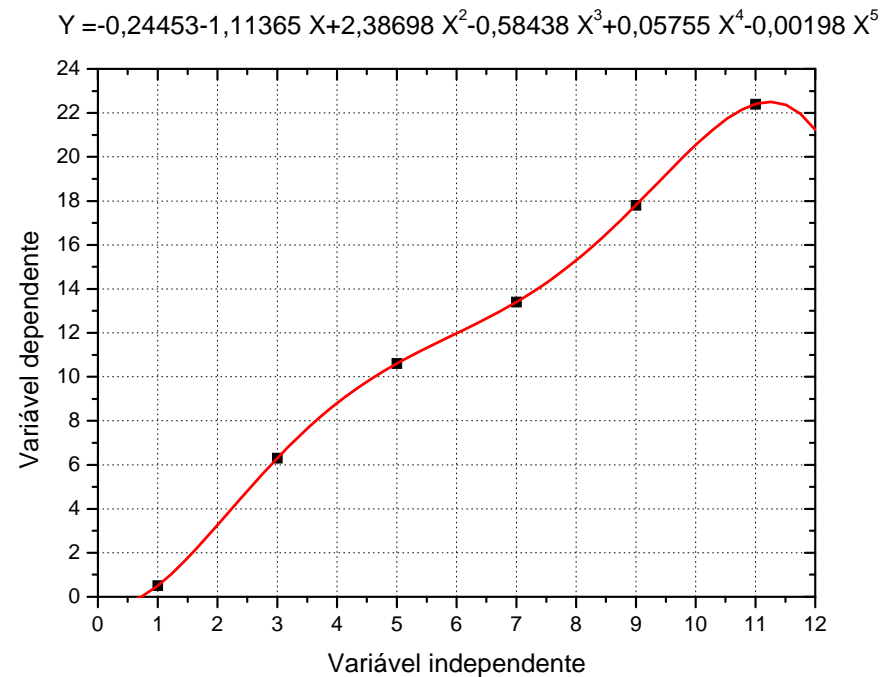
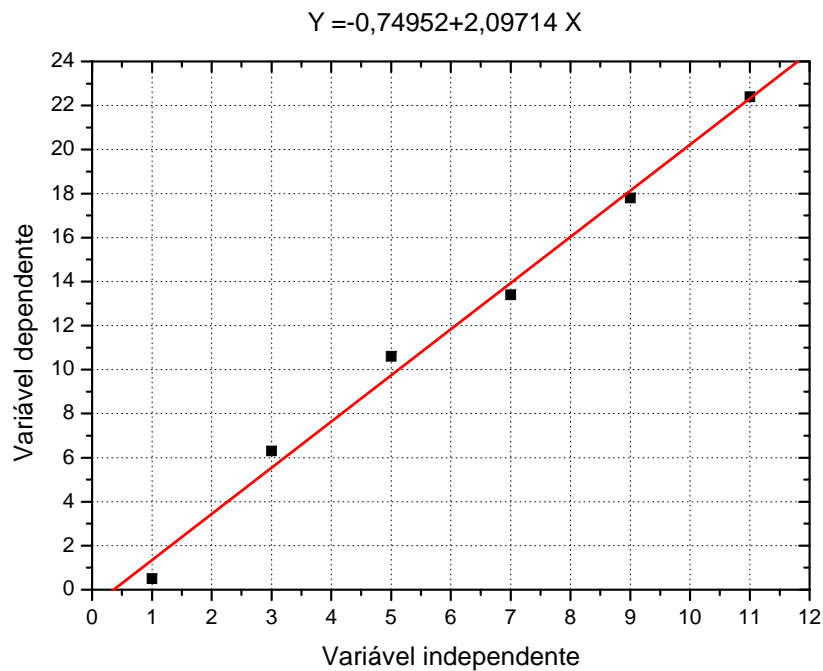
TABELA A.6 Propriedades Termofísicas da Água Saturada^a

Temperatura, T (K)	Pressão, P (bar) ^b	Volume Específico (m ³ /kg)		Calor de Vaporização h_{fg} (kJ/kg)	Calor Específico (kJ/kg · K)		Viscosidade (N · s/m ²)		Condutividade Térmica (W/m · K)		Número de Prandtl		Tensão Superficial, $\sigma_s \cdot 10^3$ (N/m)	Coeficiente de $\beta_f \cdot 10^6$ (K ⁻¹)	Temperatura, T (K)
		$v_f \cdot 10^3$	v_g		$c_{p,f}$	$c_{p,g}$	$\mu_f \cdot 10^6$	$\mu_g \cdot 10^6$	$k_f \cdot 10^3$	$k_g \cdot 10^3$	Pr_f	Pr_g			
273,15	0,00611	1,000	206,3	2,502	4,217	1,854	1,750	8,02	569	18,2	12,99	0,815	75,5	-68,05	273,15
275	0,00697	1,000	181,7	2,497	4,211	1,855	1,652	8,09	574	18,3	12,22	0,817	75,3	-32,74	275
280	0,00990	1,000	130,4	2,485	4,198	1,858	1,422	8,29	582	18,6	10,26	0,825	74,8	46,04	280
285	0,01387	1,000	99,4	2,473	4,189	1,861	1,225	8,49	590	18,9	8,81	0,833	74,3	114,1	285
290	0,01917	1,001	69,7	2,461	4,184	1,864	1,080	8,69	598	19,3	7,56	0,841	73,7	174,0	290
295	0,02617	1,002	51,94	2,449	4,181	1,868	959	8,89	606	19,5	6,62	0,849	72,7	227,5	295
300	0,03531	1,003	39,13	2,438	4,179	1,872	855	9,09	613	19,6	5,83	0,857	71,7	276,1	300
305	0,04712	1,005	29,74	2,426	4,178	1,877	769	9,29	620	20,1	5,20	0,865	70,9	320,6	305
310	0,06221	1,007	22,93	2,414	4,178	1,882	695	9,49	628	20,4	4,62	0,873	70,0	361,9	310
315	0,08132	1,009	17,82	2,402	4,179	1,888	631	9,69	634	20,7	4,16	0,883	69,2	400,4	315
320	0,1053	1,011	13,98	2,390	4,180	1,895	577	9,89	640	21,0	3,77	0,894	68,3	436,7	320
325	0,1351	1,013	11,06	2,378	4,182	1,903	528	10,09	645	21,3	3,42	0,901	67,5	471,2	325
330	0,1719	1,016	8,82	2,366	4,184	1,911	489	10,29	650	21,7	3,15	0,908	66,6	504,0	330
335	0,2167	1,018	7,09	2,354	4,186	1,920	453	10,49	656	22,0	2,88	0,916	65,8	535,5	335
340	0,2713	1,021	5,74	2,342	4,188	1,930	420	10,69	660	22,3	2,66	0,925	64,9	566,0	340
345	0,3372	1,024	4,683	2,329	4,191	1,941	389	10,89	668	22,6	2,45	0,933	64,1	595,4	345
350	0,4163	1,027	3,846	2,317	4,195	1,954	365	11,09	668	23,0	2,29	0,942	63,2	624,2	350
355	0,5100	1,030	3,180	2,304	4,199	1,968	343	11,29	671	23,3	2,14	0,951	62,3	652,3	355
360	0,6209	1,034	2,645	2,291	4,203	1,983	324	11,49	674	23,7	2,02	0,960	61,4	697,9	360
365	0,7514	1,038	2,212	2,278	4,209	1,999	306	11,69	677	24,1	1,91	0,969	60,5	707,1	365
370	0,9040	1,041	1,861	2,265	4,214	2,017	289	11,89	679	24,5	1,80	0,978	59,5	728,7	370
373,15	1,0133	1,044	1,679	2,257	4,217	2,029	279	12,02	680	24,8	1,76	0,984	58,9	750,1	373,15
375	1,0815	1,045	1,574	2,252	4,220	2,036	274	12,09	681	24,9	1,70	0,987	58,6	761	375
380	1,2869	1,049	1,337	2,239	4,226	2,057	260	12,29	683	25,4	1,61	0,999	57,6	788	380
385	1,5233	1,053	1,142	2,225	4,232	2,080	248	12,49	685	25,8	1,53	1,004	56,6	814	385
390	1,794	1,058	0,980	2,212	4,239	2,104	237	12,69	686	26,3	1,47	1,013	55,6	841	390
400	2,455	1,067	0,731	2,183	4,256	2,158	217	13,05	688	27,2	1,34	1,033	53,6	896	400
410	3,302	1,077	0,553	2,153	4,278	2,221	200	13,42	688	28,2	1,24	1,054	51,5	952	410
420	4,370	1,088	0,425	2,123	4,302	2,291	185	13,79	688	29,8	1,16	1,075	49,4	1.010	420
430	5,699	1,099	0,331	2,091	4,331	2,369	173	14,14	685	30,4	1,09	1,10	47,2		430

Fonte: Incropera et al., "Fundamentos Transferência de Calor e de Massa", 6 ed., LTC Editora, 2008.

Motivação

➤ Qual curva é a mais adequada?



Motivação

- Aproximação: os dados exibem um grau significativo de erro ou “ruído”. A curva ajustada representa a tendência geral dos dados.
- Interpolação: os dados são muito precisos e, assim, o ajuste de curvas deve passar diretamente por cada um dos pontos.

Motivação

- Fundamentação matemática:
- Interpolação \rightarrow expansões em séries de Taylor e diferenças finitas divididas.
- Aproximação \rightarrow estatística básica (conceitos de média aritmética, desvio padrão, distribuição normal, intervalos de confiança).

Técnicas de aproximação

- Mínimos Quadrados Discretos.
- Polinômios Ortogonais e Aproximação por Mínimos Quadrados.
- Polinômios de Chebyshev e Economia na Série de Potências.
- Aproximação por Função Racional.
- Aproximação por Polinômios Trigonométricos.
- Transformadas Rápidas de Fourier (FFT).

Mínimos Quadrados Discretos

- Normalmente, empregada para prever valores intermediários para dados experimentais.
- Apresenta uma tendência geral dos dados.
- Minimização a discrepância entre os dados e os pontos da curva obtida, através da minimização da soma dos quadrados dos resíduos entre valores medidos e valores calculados.

Mínimos Quadrados Discretos

- Hipóteses estatísticas:
 - Cada x tem um valor fixo; ele não é aleatório e é conhecido sem erros.
 - Os valores de y são variáveis aleatórias independentes e têm todos a mesma variância.
 - Os valores de y para um dado x devem estar normalmente distribuídos.

Mínimos Quadrados Discretos

- Modelo linear:

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,\text{medido}} - y_{i,\text{modelo}})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

- Determinação dos coeficientes:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n [(y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i] = 0$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Coeficientes:

$$a_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x}$$

- Quantificação do erro na regressão linear:
 - Erro padrão da estimativa:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}}$$

Mínimos Quadrados Discretos

– Coeficiente de determinação:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \quad S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

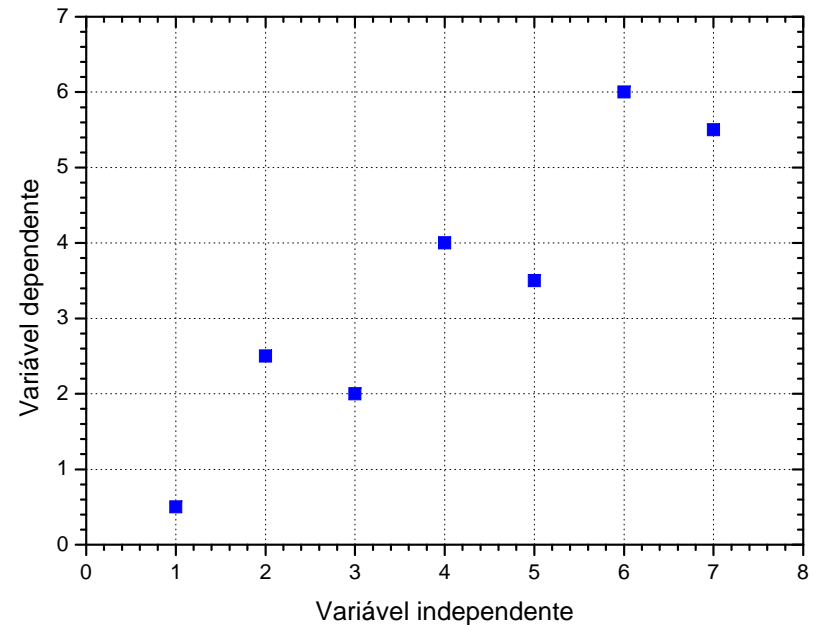
– Coeficiente de correlação:

$$r = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{\sqrt{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \sqrt{n \sum_{i=1}^n y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2}}$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Exemplo 01: Ajuste uma reta aos valores de x e y para os dados apresentados na tabela a seguir:

x_i	y_i
1	0,5
2	2,5
3	2,0
4	4,0
5	3,5
6	6,0
7	5,5



Mínimos Quadrados Discretos

- Solução: $n = 7$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	0,5	1,0	0,5
2	2,5	4,0	5,0
3	2,0	9,0	6,0
4	4,0	16,0	16,0
5	3,5	25,0	17,5
6	6,0	36,0	36,0
7	5,5	49,0	38,5

$\sum_{i=1}^n x_i = 28$	$\sum_{i=1}^n y_i = 24$	$\sum_{i=1}^n x_i^2 = 140,0$	$\sum_{i=1}^n x_i y_i = 119,5$
$\bar{x} = 4$	$\bar{y} = 3,428571$		

Mínimos Quadrados Discretos

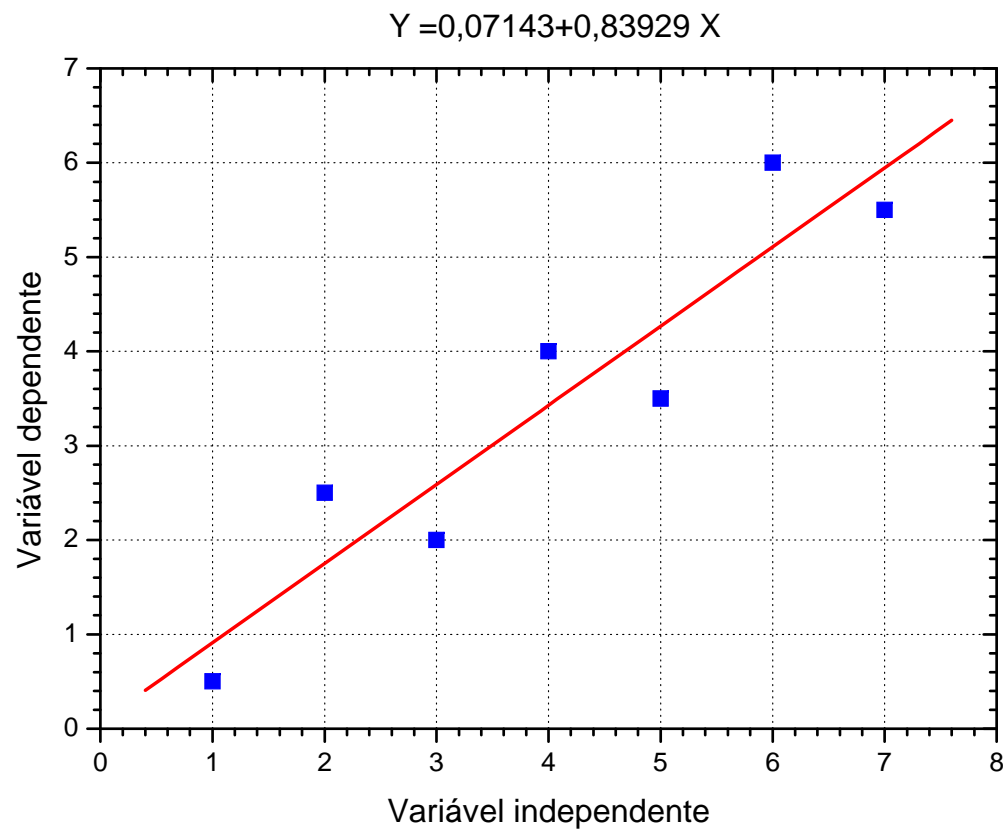
- Solução:

$$a_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = \frac{7(119,5) - 28(24)}{7(140) - (28)^2} = 0,8392857$$

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x} = 3,428571 - 0,8392857(4) = 0,07142857$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:



Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

x_i	y_i	$(y_i - \bar{y})^2$	$(y_i - a_0 - a_1 x)^2$
1	0,5	8,576531	0,168686
2	2,5	0,862245	0,562500
3	2,0	2,040816	0,347258
4	4,0	0,326531	0,326531
5	3,5	0,005102	0,589605
6	6,0	6,612245	0,797194
7	5,5	4,290816	0,199298

$$\sum_{i=1}^n x_i = 28 \quad \sum_{i=1}^n y_i = 24 \quad S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = 22,7143 \quad S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x)^2 = 2,9911$$

$$\bar{x} = 4 \quad \bar{y} = 3,428571$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

- Desvio padrão:

$$s_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{22,7143}{7-1}} = 1,9457$$

- Erro padrão da estimativa:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} = \sqrt{\frac{2,9911}{7-2}} = 0,7735$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

- Coeficiente de determinação:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{22,7143 - 2,9911}{22,7143} = 0,868$$

- Coeficiente de correlação:

$$r = \sqrt{0,868} = 0,932$$

- Conclusão: 86,8% da incerteza original é explicada pelo modelo linear.

Mínimos Quadrados Discretos

- Linearização de relações não-lineares:
 - Modelo exponencial;
 - Modelo potência simples;
 - Modelo da taxa de crescimento da saturação.
- Emprego de manipulações matemáticas simples transformando-os em modelos lineares.

Mínimos Quadrados Discretos

- Uma função do tipo exponencial:

$$y = \alpha_1 e^{\beta_1 x}$$

- Pode ser linearizada empregando-se:

$$\ln y = \ln \alpha_1 + \beta_1 x \ln e$$

$$\ln y = \ln \alpha_1 + \beta_1 x$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Uma função do tipo potência:

$$y = \alpha_2 x^{\beta_2}$$

- Pode ser linearizada empregando-se:

$$\log y = \beta_2 \log x + \log \alpha_2$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Uma função do tipo taxa de crescimento da saturação:

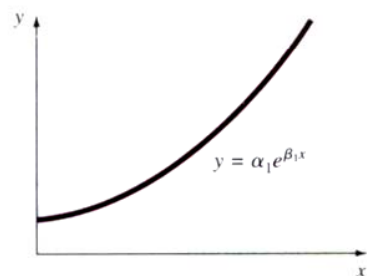
$$y = \alpha_3 \frac{x}{\beta_3 + x}$$

- Pode ser linearizada empregando-se:

$$\frac{1}{y} = \frac{\beta_3}{\alpha_3} \frac{1}{x} + \frac{1}{\alpha_3}$$

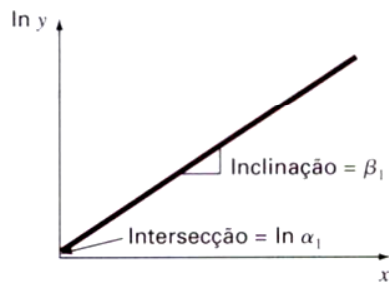
Mínimos Quadrados Discretos

- Gráficos:

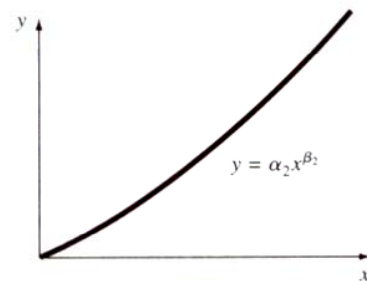


(a)

Linearização

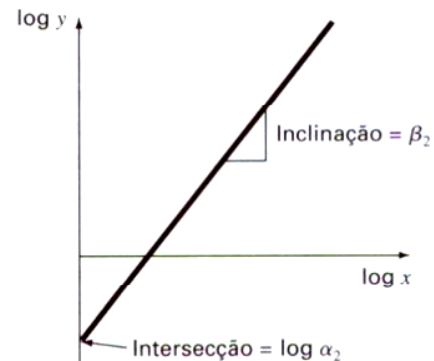


(d)

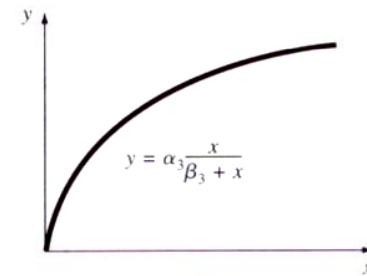


(b)

Linearização

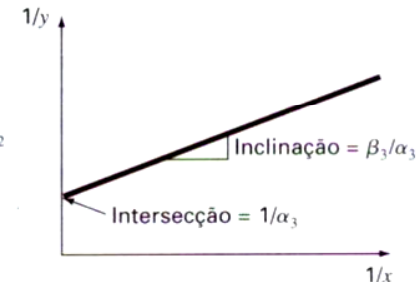


(e)



(c)

Linearização

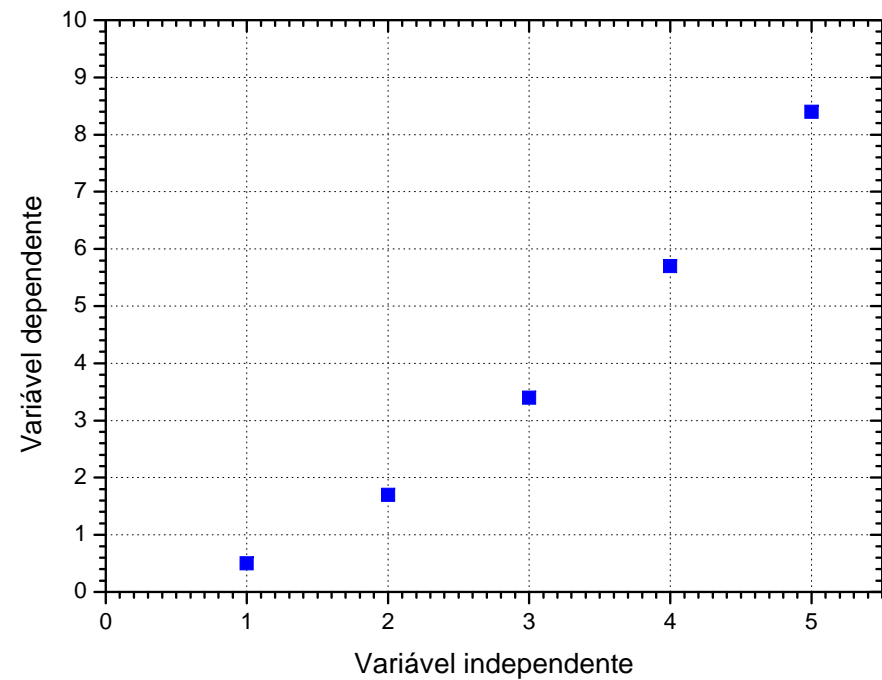


(f)

Mínimos Quadrados Discretos

- Exemplo 02: Ajustar os dados da seguinte tabela empregando-se uma função do tipo potência.

x_i	y_i
1	0,5
2	1,7
3	3,4
4	5,7
5	8,4



Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

x_i	y_i	$w_i = \log x_i$	$z_i = \log y_i$	w_i^2	$w_i z_i$
1	0,5	0,000000	-0,301030	0,000000	0,000000
2	1,7	0,301030	0,230449	0,090619	0,069372
3	3,4	0,477121	0,531479	0,227645	0,253580
4	5,7	0,602060	0,755875	0,362476	0,455082
5	8,4	0,698970	0,924279	0,488559	0,646043

$\sum_{i=1}^n w_i = 2,079181$	$\sum_{i=1}^n z_i = 2,141052$	$\sum_{i=1}^n w_i^2 = 1,169299$	$\sum_{i=1}^n w_i z_i = 1,424077$
$\bar{w} = 0,415836$	$\bar{z} = 0,428210$		

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

$$a_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n w_i z_i - \sum_{i=1}^n w_i \sum_{i=1}^n z_i}{n \sum_{i=1}^n w_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n z_i \right)^2} = \frac{5(1,424077) - (2,079181)(2,141052)}{5(1,169299) - (2,141052)^2} = 1,75172365$$

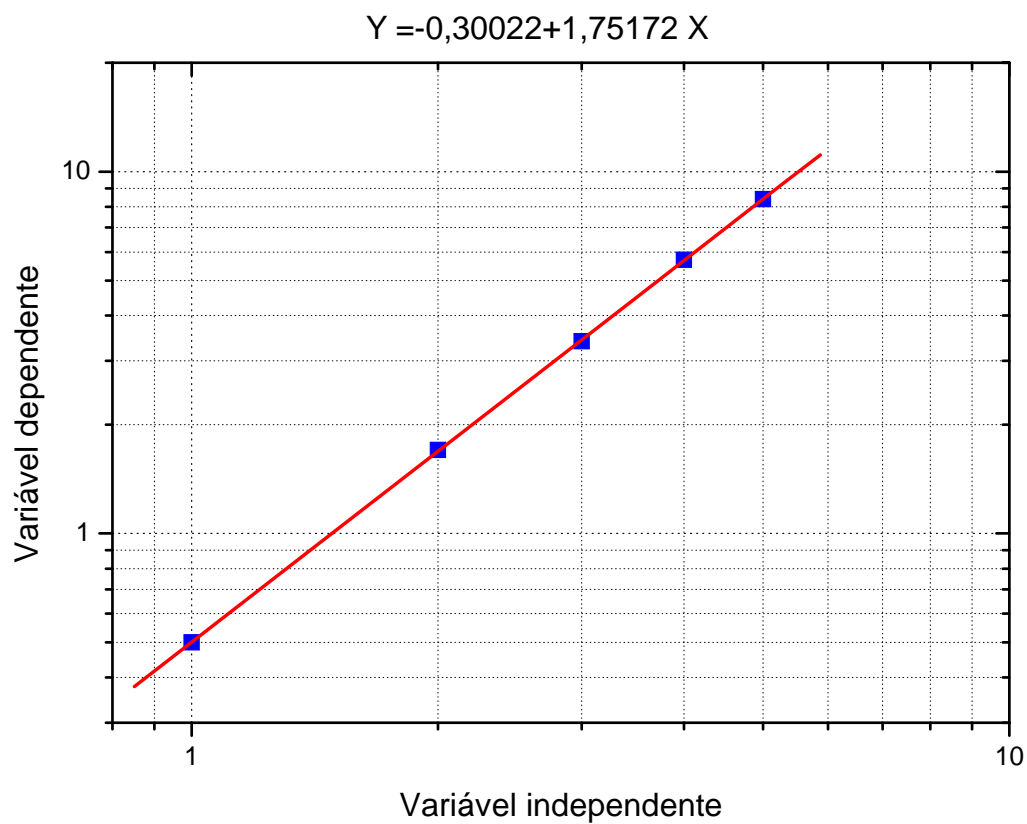
$$a_0 = \bar{z} - a_1 \bar{w} = 0,428210 - 1,75172365(0,415836) = -0,30021979$$

- Logo:

$$\alpha_2 = 10^{-0,30021979} = 0,500934; \quad \beta_2 = 1,75172365$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução: $y = 0,500934x^{1,75172365}$



Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

w_i	z_i	$(z_i - \bar{z})^2$	$(z_i - a_0 - a_1 w)^2$
0,000000	-0,301030	0,531792	6,5643E-07
0,301030	0,230449	0,039110	1,1205E-05
0,477121	0,531479	0,010664	1,6694E-05
0,602060	0,755875	0,107364	2,1081E-06
0,698970	0,924279	0,246084	9,3692E-09
$\sum_{i=1}^n w_i = 2,079181$ $\bar{w} = 0,415836$	$\sum_{i=1}^n z_i = 2,141052$ $\bar{z} = 0,428210$	$S_t = \sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z})^2 = 0,935014$	$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x)^2 = 3,0673 \times 10^{-5}$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

- Desvio padrão:

$$s_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{0,935014}{5-1}} = 0,483481$$

- Erro padrão da estimativa:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} = \sqrt{\frac{3,0673 \times 10^{-5}}{5-2}} = 5,5884 \times 10^{-5}$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

- Coeficiente de determinação:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{0,435014 - 3,0673 \times 10^{-5}}{0,435014} = 0,999967$$

- Coeficiente de correlação:

$$r = \sqrt{0,999967} = 0,999984$$

- Conclusão: 99,9967% da incerteza original é explicada pela função do tipo potência.

Mínimos Quadrados Discretos

- Regressão polinomial: o procedimento de mínimos quadrados para ajustes lineares pode ser estendido para polinômios de grau mais elevado.
- Supondo-se um polinômio de segundo grau ou quadrático:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + e$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Soma dos quadrados dos resíduos:

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

- Determinação dos coeficientes:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2 \sum_{i=1}^n x_i^2 (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Sistema de equações normais:

$$(n)a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) a_2 = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^3 \right) a_2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^3 \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^4 \right) a_2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Polinômio de grau m :

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m + e$$

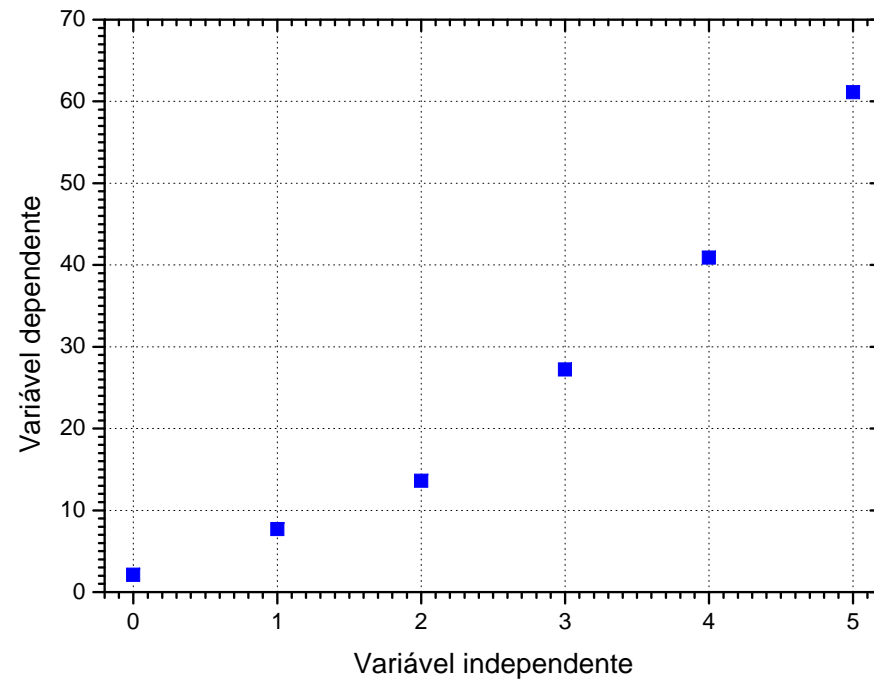
- Erro padrão:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}}$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Exemplo 03: Ajustar um polinômio de segundo grau aos dados apresentados na tabela a seguir.

x_i	y_i
0	2,1
1	7,7
2	13,6
3	27,2
4	40,9
5	61,1



Mínimos Quadrados Discretos

- Solução: $n = 6$
 $m = 2$

x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
0	2,1	0	0	0	0,0	0,0
1	7,7	1	1	1	7,7	7,7
2	13,6	4	8	16	27,2	54,4
3	27,2	9	27	81	81,6	244,8
4	40,9	16	64	256	163,6	654,4
5	61,1	25	125	625	305,5	1527,5
$\sum_{i=1}^n x_i = 15$ $\bar{x} = 2,5$	$\sum_{i=1}^n y_i = 152,6$ $\bar{y} = 25,433333$	$\sum_{i=1}^n x_i^2 = 55$	$\sum_{i=1}^n x_i^3 = 225$	$\sum_{i=1}^n x_i^4 = 979$	$\sum_{i=1}^n x_i y_i = 585,6$	$\sum_{i=1}^n x_i^2 y_i = 2488,8$

Mínimos Quadrados Discretos

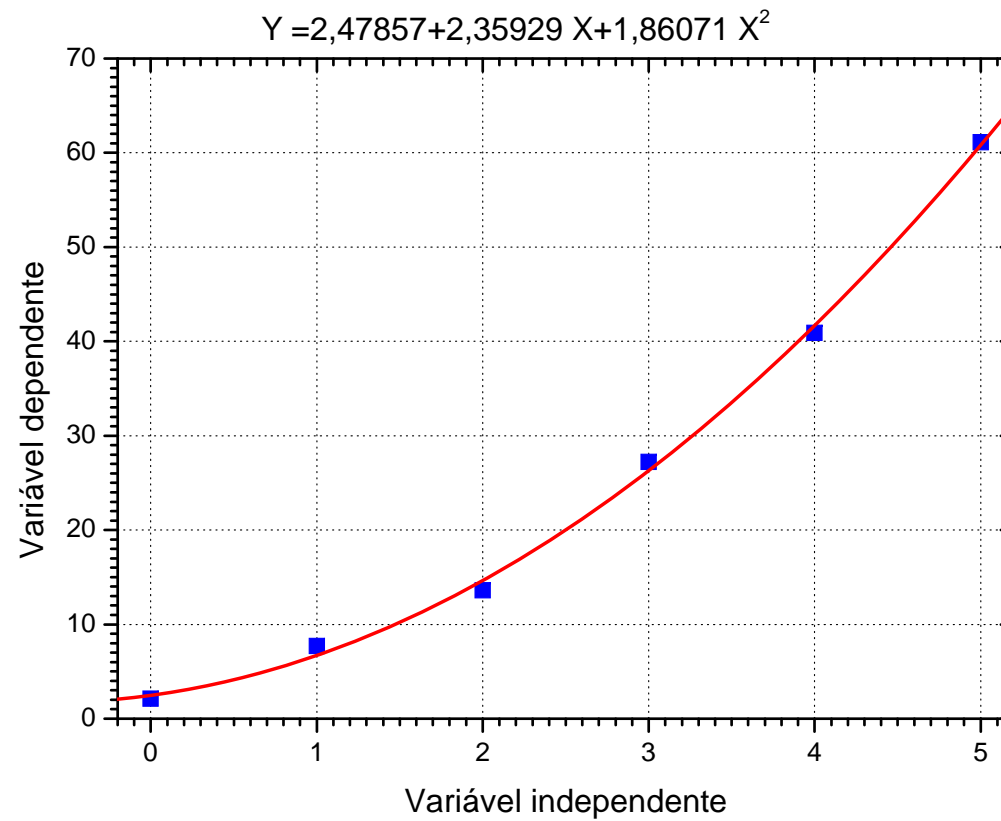
- Solução:

$$\begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 152,6 \\ 585,6 \\ 2488,8 \end{Bmatrix} \quad \therefore \quad \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2,47857 \\ 2,35929 \\ 1,86071 \end{Bmatrix}$$

$$y = 2,47857 + 2,35929x + 1,86071x^2$$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:



Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

x_i	y_i	$(y_i - \bar{y})^2$	$(y_i - a_0 - a_1x - a_2x^2)^2$
0	2,1	544,44	0,14332
1	7,7	314,47	1,00286
2	13,6	140,03	1,08160
3	27,2	3,12	0,80487
4	40,9	239,22	0,61959
5	61,1	1272,11	0,09434
$\sum_{i=1}^n x_i = 15$ $\bar{x} = 2,5$	$\sum_{i=1}^n y_i = 152,6$ $\bar{y} = 25,433333$	$S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = 2513,39$	$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x - a_2x^2)^2 = 3,74657$

Mínimos Quadrados Discretos

- Solução:

- Erro padrão da estimativa:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}} = \sqrt{\frac{3,74657}{6 - (2 + 1)}} = 1,12$$

- Coeficiente de determinação:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = \frac{2513,39 - 3,74657}{2513,39} = 0,99851$$

- Conclusão: 99,851% da incerteza original foi explicada pelo modelo quadrático.

Interpolação Polinomial

- Consiste em determinar um único polinômio de grau n que passa pelos $n+1$ pontos fornecidos.
- Embora exista um único polinômio de grau n que passa por $n+1$ pontos, há diversas fórmulas matemáticas para expressá-lo.
- Formas adequadas para implementação computacional: Newton e Lagrange.

Interpolação Polinomial

- Diferenças Divididas de Newton:
- Interpolação linear:

$$\frac{f_1(x) - f(x_0)}{x - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

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

Interpolação Polinomial

- Exemplo 04: Faça uma estimativa do logaritmo natural de 2, utilizando uma interpolação linear. Faça o cálculo utilizando dois intervalos:
 - o primeiro, empregando $\ln(1)=0$ e $\ln(6)=1,791759$;
 - e o segundo, utilizando $\ln(1) = 0$ e $\ln(4)=1,386294$.
- Valor real: $\ln(2)=0,6931472$

Interpolação Polinomial

- Solução:

- (a) $x_0 = 1; \quad x_1 = 6$

$$f(x_0) = f(1) = 0; \quad f(x_1) = f(6) = 1,791759$$

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0) = 0 + \frac{1,791759 - 0}{6 - 1} (2 - 1)$$

$$f_1(2) = 0,3583519$$

Interpolação Polinomial

- Solução:

- (b) $x_0 = 1; \quad x_1 = 4$

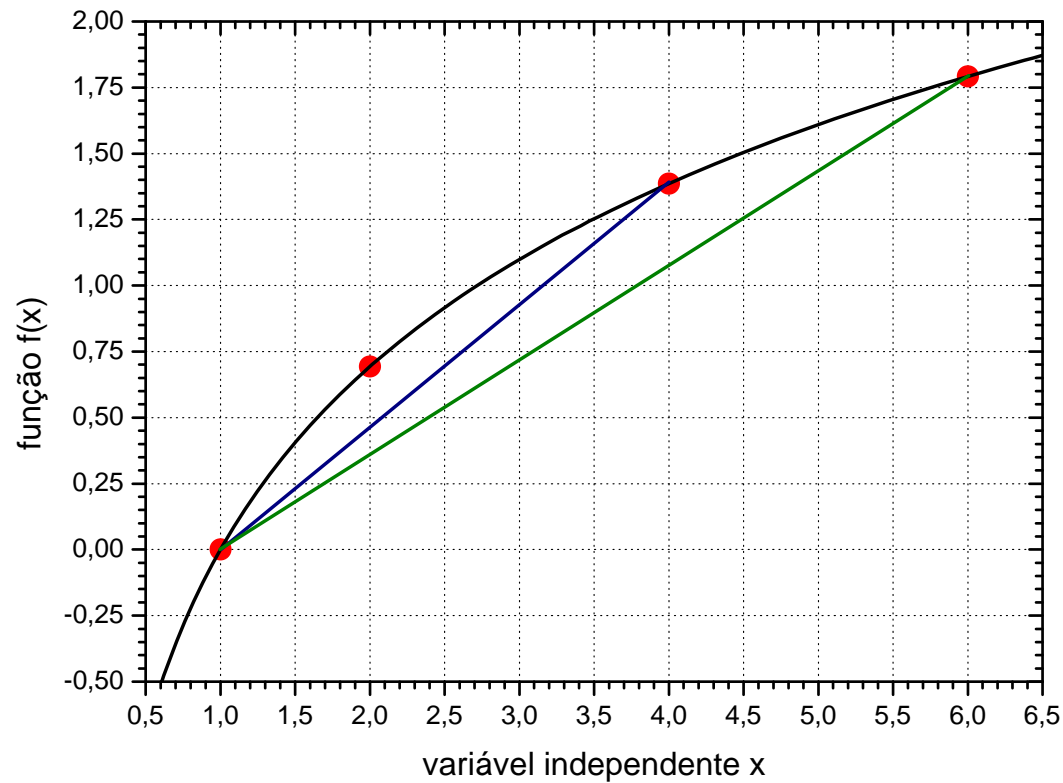
$$f(x_0) = f(1) = 0; \quad f(x_1) = f(4) = 1,386294$$

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0) = 0 + \frac{1,386294 - 0}{4 - 1} (2 - 1)$$

$$f_1(2) = 0,4620981$$

Interpolação Polinomial

- Solução



Erros relativos:

(a) 48,3%

(b) 33,3%

Interpolação Polinomial

- Diferenças Divididas de Newton:
- Interpolação Quadrática:

$$f_2(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1)$$

– que pode ser reescrita como:

$$f_2(x) = b_0 + b_1x - b_1x_0 + b_2x^2 + b_2x_0x_1 - b_2xx_0 - b_2xx_1$$

Interpolação Polinomial

- Interpolação Quadrática:

$$f_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

– sendo:

$$a_0 = b_0 - b_1x_0 + b_2x_0x_1$$

$$a_1 = b_1 - b_2x_0 - b_2x_1$$

$$a_2 = b_2$$

Interpolação Polinomial

- Interpolação Quadrática:
 - Determinação dos coeficientes:

$$b_0 = f(x_0)$$

$$b_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

$$b_2 = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}$$

Interpolação Polinomial

- Exemplo 05: Ajuste um polinômio quadrático aos três pontos seguintes:

$$x_0 = 1; \quad f(x_0) = 0;$$

$$x_1 = 4; \quad f(x_1) = 1,386294$$

$$x_2 = 6; \quad f(x_2) = 1,791759$$

- Utilize o polinômio obtido para calcular $\ln(2)$, cujo valor verdadeiro é 0,6931472.

Interpolação Polinomial

- Solução:

$$b_0 = f(x_0) = 0$$

$$b_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{1,386294 - 0}{4 - 1} = 0,4620981$$

$$b_2 = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0} =$$
$$= \frac{\frac{1,791759 - 1,386294}{6 - 4} - 0,4620981}{6 - 1} = -0,0518731$$

Interpolação Polinomial

- Solução:
 - Logo, o polinômio interpolador é:

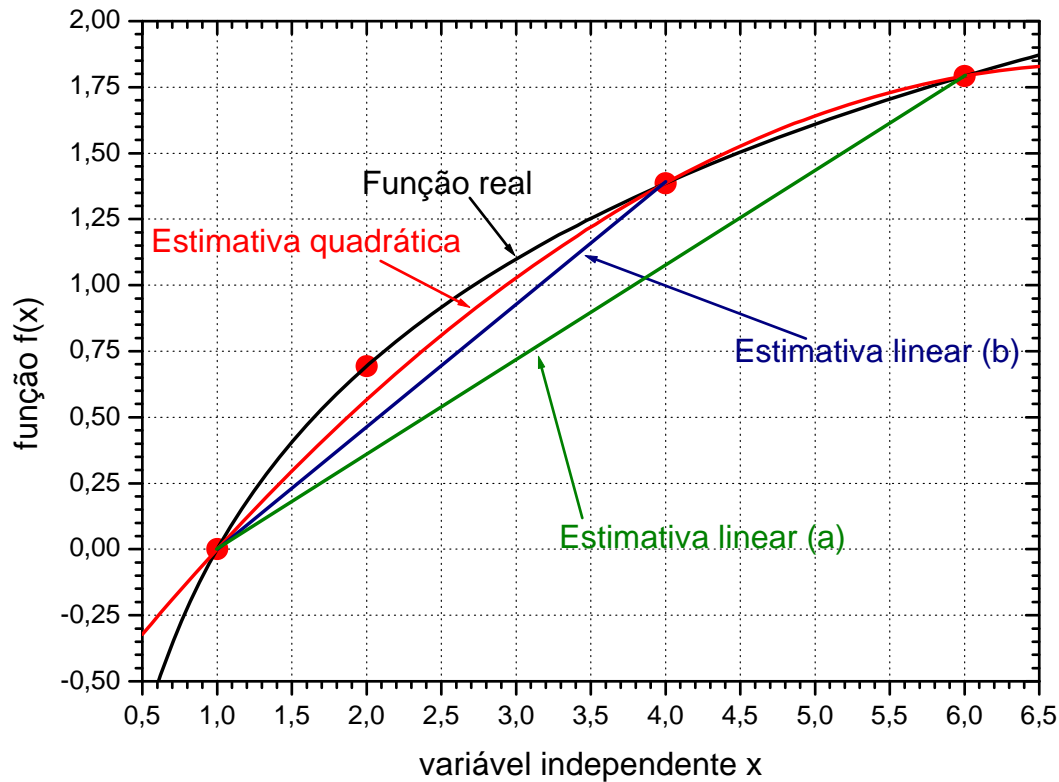
$$f_2(x) = 0 + 0,4620981(x-1) - 0,0518731(x-1)(x-4)$$

- E o valor aproximado de $\ln(2)$ é:

$$f_2(2) = 0,5658444$$

Interpolação Polinomial

- Solução:



Erros relativos (lineares):

(a) 48,3%

(b) 33,3%

Erro relativo (quadrática):

18,4%

Interpolação Polinomial

- Forma Geral dos Polinômios Interpoladores de Newton:

- Deseja-se ajustar um polinômio de grau n a $n+1$ pontos fornecidos, obtendo-se:

$$f_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + \dots + b_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})$$

- Coeficientes:

$$b_0 = f(x_0)$$

$$b_1 = f[x_1, x_0]$$

$$b_2 = f[x_2, x_1, x_0]$$

⋮

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

Interpolação Polinomial

- Forma Geral dos Polinômios Interpoladores de Newton:
 - Os colchetes representam a valores de funções calculados através de diferenças divididas.
 - Primeira diferença dividida:

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$$

Interpolação Polinomial

- Forma Geral dos Polinômios Interpoladores de Newton:

- Segunda diferença dividida:

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$$

- N-ésima diferença dividida:

$$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1] - f[x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0]}{x_n - x_0}$$

Interpolação Polinomial

Tabela 3.7

x	$f(x)$	Primeira diferença dividida	Segunda diferença dividida	Terceira diferença dividida
x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$	
		$f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1}$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0}$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}$	
		$f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2}$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_2, x_3, x_4] - f[x_1, x_2, x_3]}{x_4 - x_1}$
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_3, x_4] - f[x_2, x_3]}{x_4 - x_2}$	
		$f[x_3, x_4] = \frac{f[x_4] - f[x_3]}{x_4 - x_3}$		$f[x_2, x_3, x_4, x_5] = \frac{f[x_3, x_4, x_5] - f[x_2, x_3, x_4]}{x_5 - x_2}$
x_4	$f[x_4]$		$f[x_3, x_4, x_5] = \frac{f[x_4, x_5] - f[x_3, x_4]}{x_5 - x_3}$	
		$f[x_4, x_5] = \frac{f[x_5] - f[x_4]}{x_5 - x_4}$		
x_5	$f[x_5]$			

Interpolação Polinomial

- Forma Geral dos Polinômios Interpoladores de Newton:

$$f_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \\ + \dots + (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_0]$$

- Não é necessário que os dados sejam igualmente espaçados ou que os valores das abscissas estejam necessariamente em ordem crescente.

Interpolação Polinomial

- Exemplo 06: Faça uma estimativa de $\ln(2)$ empregando um polinômio interpolador de Newton de terceiro grau utilizando os seguintes pontos:

$$x_0 = 1; \quad f(x_0) = 0;$$

$$x_1 = 4; \quad f(x_1) = 1,386294$$

$$x_2 = 6; \quad f(x_2) = 1,791759$$

$$x_3 = 5; \quad f(x_3) = 1,609438$$

Interpolação Polinomial

- Solução:
 - O polinômio de terceiro grau a ser obtido possui a forma:

$$f_3(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + b_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

- As primeiras diferenças divididas para o problema são:

$$f[x_1, x_0] = \frac{1,386294 - 0}{4 - 1} = 0,4620981$$

Interpolação Polinomial

- Solução:

$$f[x_2, x_1] = \frac{1,791759 - 1,386294}{6 - 4} = 0,2027326$$

$$f[x_3, x_2] = \frac{1,609438 - 1,791759}{5 - 6} = 0,1823216$$

- As segundas diferenças divididas para o problema são:

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{0,2027326 - 0,4620981}{6 - 1} = -0,05187311$$

$$f[x_3, x_2, x_1] = \frac{0,1823216 - 0,2027326}{5 - 4} = -0,02041100$$

Interpolação Polinomial

- Solução

- A terceira diferença dividida é:

$$f[x_3, x_2, x_1, x_0] = \frac{-0,02041100}{5-1} = 0,007865529$$

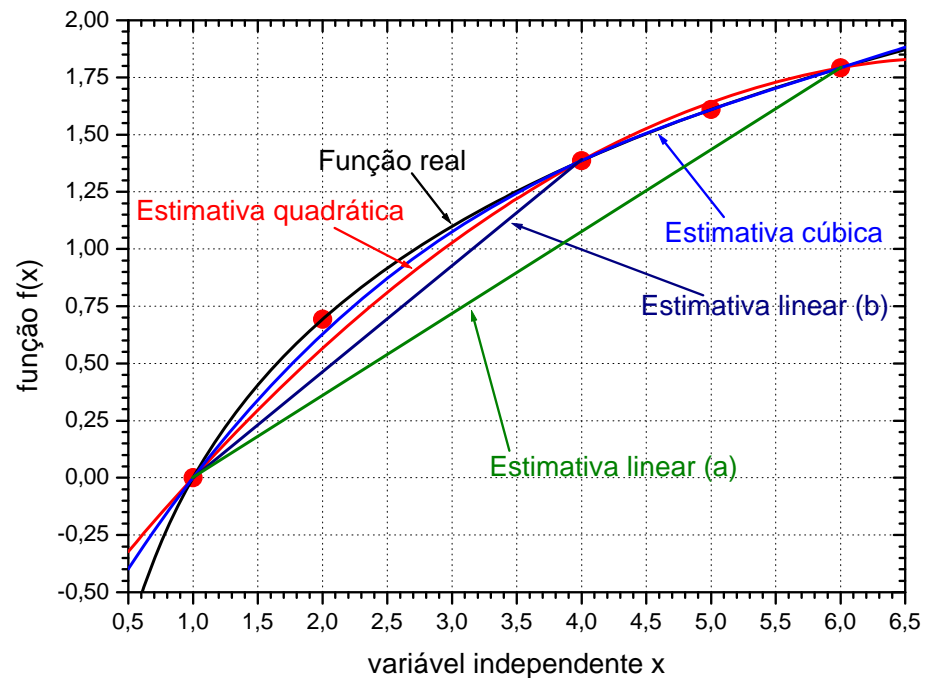
- Polinômio interpolador de Newton:

$$\begin{aligned} f_3(x) = & 0 + 0,4620981(x-1) - 0,05187311(x-1)(x-4) \\ & + 0,007865529(x-1)(x-4)(x-6) \end{aligned}$$

Interpolação Polinomial

- Solução:

- Valor aproximado para $\ln(2)=0,6287686$



Erros relativos (lineares):

(a) 48,3%

(b) 33,3%

Erro relativo (quadrática):

18,4%

Erro relativo (cúbica):

9,3%

Interpolação Polinomial

- Erros nos Polinômios Interpoladores de Newton
 - Erro de truncamento da série de Taylor:

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x_{i+1} - x_i)^{n+1}$$

- onde ξ é algum ponto do intervalo fornecido. Para um polinômio interpolador de grau n , analogamente, o erro é dado por

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$$

Interpolação Polinomial

- Erros nos Polinômios Interpoladores de Newton
 - Utilizando diferenças divididas e um ponto adicional:

$$R_n \approx f[x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots, x_0](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

Interpolação Polinomial

- Exemplo 07: Estimar o erro para o polinômio interpolador de segundo grau do Exemplo 05. Utilize o ponto adicional $f(5)=1.609438$ para obter os resultados.
- Solução:
 - Do Exemplo 05, tem-se que:

$$f_2(2) = 0,5658444$$

Interpolação Polinomial

- Solução:
 - E o erro verdadeiro é igual a

$$E = 0,6931472 - 0,5658444 = 0,1273028$$

- A estimativa do erro pode ser feita através de:

$$R_2 \approx f[x_3, x_2, x_1, x_0](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

Interpolação Polinomial

- Solução:

- Substituindo valores:

$$R_2 \approx 0,007865529(x-1)(x-4)(x-6)$$

- E, no caso de $x=2$, tem-se:

$$R_2 \approx 0,007865529(2-1)(2-4)(2-6) = 0,0629242$$

- Que possui a mesma ordem de grandeza do erro verdadeiro.

Interpolação Polinomial

- Polinômios Interpoladores de Lagrange:
 - Reformulação do polinômio de Newton, que evita o cálculo de diferenças divididas.
 - Representação:

$$f_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i)$$

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Interpolação Polinomial

- Polinômios Interpoladores de Lagrange:

– Versão linear:

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

– Versão quadrática:

$$f_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2)$$

Interpolação Polinomial

- Exemplo: Empregar o polinômio interpolador de Lagrange de primeiro e de segundo graus para calcular $\ln(2)$ com base nos seguintes dados:

$$x_0 = 1; \quad f(x_0) = 0;$$

$$x_1 = 4; \quad f(x_1) = 1,386294$$

$$x_2 = 6; \quad f(x_2) = 1,791759$$

Interpolação Polinomial

- Solução:
 - Polinômio de primeiro grau:

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

$$f_1(2) = \frac{2 - 4}{1 - 4} (0) + \frac{2 - 1}{4 - 1} (1,386294) = 0,4620981$$

Interpolação Polinomial

- Solução:

- Polinômio de segundo grau:

$$\begin{aligned} f_2(2) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) \\ &\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \\ &= \frac{(2-4)(2-6)}{(1-4)(1-6)} (0) + \frac{(2-1)(2-6)}{(4-1)(4-6)} (1,386294) \\ &\quad + \frac{(2-1)(2-4)}{(6-1)(6-4)} (1,791760) = 0,5658444 \end{aligned}$$

Interpolação Polinomial

- Estimativa do erro para o polinômio interpolador de Lagrange:

$$R_n \approx f[x, x_n, x_{n-1}, \dots, x_0] \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

- Se um ponto adicional estiver disponível, nota-se que é possível fazer uma estimativa do erro do polinômio de Lagrange. Isso, contudo, raramente é feito, uma vez que as diferenças divididas não são calculadas como parte do algoritmo de Lagrange.

Interpolação Polinomial

- Casos em que o grau do polinômio é desconhecido: preferível utilizar o método de Newton (vantagens na percepção do comportamento das fórmulas para diferentes ordens).
- Casos em que o grau do polinômio é conhecido *a priori*: preferível empregar o método de Lagrange (um pouco mais fácil de programar).

Interpolação por Splines

- A natureza oscilatória dos polinômios de alto grau e a propriedade que uma flutuação sobre uma pequena parte do intervalo pode induzir grandes flutuações sobre todo o intervalo restringe seu uso.
- Uma abordagem alternativa é dividir o intervalo em uma coleção de subintervalos e construir um polinômio aproximador (geralmente) diferente em cada subintervalo.

Interpolação por Splines

- A aproximação por funções desse tipo é chamada aproximação polinomial por partes.
- A aproximação polinomial por partes mais simples é a interpolação linear por partes, que consiste em unir um conjunto de pontos dados

$$\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))\}$$

por uma série de retas.

Interpolação por Splines

- Uma desvantagem da aproximação por função linear é a possibilidade de que não haja diferenciabilidade nas extremidades dos subintervalos.
- Um procedimento alternativo é a utilização de um polinômio por partes do tipo Hermite.
- Por exemplo, se os valores de f e f' forem conhecidos em cada um dos pontos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, um polinômio cúbico de Hermite pode ser usado em cada um dos subintervalos.

Interpolação por Splines

- O tipo mais simples de função polinomial por partes diferenciável em todo um intervalo $[x_0, x_n]$ é aquele obtido ajustando um polinômio quadrático entre cada par sucessivo de nós.
- A dificuldade surge quando existe a necessidade de especificar condições acerca da derivada da função interpoladora nas extremidades x_0 e x_n . Não há número suficiente de constantes para garantir que as condições serão satisfeitas.

Interpolação por Splines

- A aproximação polinomial por partes mais comum usa polinômios cúbicos entre cada par de nós sucessivos e é chamada interpolação por spline cúbico.
- Um polinômio cúbico geral envolve quatro constantes; logo, existe flexibilidade suficiente no procedimento de splines cúbicos para assegurar que a função interpoladora seja não somente continuamente diferenciável no intervalo, mas também tenha uma segunda derivada contínua.

Interpolação por Splines

- A construção do spline cúbico, entretanto, não supõe que as derivadas da função interpoladora coincidam com aquelas da função que está sendo aproximada, mesmo nos nós.
- O objetivo básico ao empregar splines cúbicas é, assim, encontrar um polinômio de terceira ordem em cada intervalo entre nós tal que

$$f_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i$$

Interpolação por Splines

- Dessa forma, para $n + 1$ pontos ($i = 0, 1, 2, \dots, n$), existem n intervalos e, conseqüentemente, $4n$ constantes a determinar. Tem-se, assim, as seguintes condições que devem ser satisfeitas:
 - Os valores da função precisam ser iguais aos pontos interiores ($2n - 2$ condições).
 - A primeira e a última funções precisam passar pelos pontos das extremidades (2 condições).
 - As primeiras derivadas no interior dos nós devem ser iguais ($n - 1$ condições).

Interpolação por Splines

- As segundas derivadas no interior dos nós devem ser iguais ($n - 1$ condições).
- As segundas derivadas nas extremidades são nulas (2 condições). Neste caso, tem-se as chamadas condições de contorno livres ou naturais. Alternativamente, podem ser definidos os valores das primeiras derivadas nas extremidades (suprindo as 2 condições necessárias). Nesse caso, tem-se as chamadas condições de contorno fixas.
- Obtém-se, assim, as $4n$ condições necessárias para a determinação das splines cúbicas.

Interpolação por Splines

- O primeiro passo para a determinação das splines é baseado na observação de que, pelo fato de cada par de pontos ser conectado por um polinômio cúbico, a segunda derivada entre cada intervalo deve ser um segmento de reta. Obtém-se, assim

$$f_i''(x) = f_i''(x_{i-1}) \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} + f_i''(x_i) \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

- A expressão anterior pode então ser integrada para fornecer $f_i(x)$

Interpolação por Splines

- Tem-se, nesse caso, a seguinte expressão

$$\begin{aligned} f_i(x) = & \frac{f_i''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1})} (x_i - x)^3 + \frac{f_i''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1})} (x - x_{i-1})^3 \\ & + \left[\frac{f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f''(x_{i-1})(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x_i - x) \\ & + \left[\frac{f(x_i)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f''(x_i)(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x - x_{i-1}) \end{aligned}$$

- Nesse caso, as segundas derivadas nas extremidades do intervalo são incógnitas.

Interpolação por Splines

- As segundas derivadas podem ser avaliadas considerando-se o fato de que as primeiras derivadas nos nós devem ser contínuas

$$f'_i(x_i) = f'_{i+1}(x_i)$$

- Obtém-se então a seguinte expressão

$$\begin{aligned} & (x_i - x_{i-1})f''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1})f''(x_i) + (x_{i+1} - x_i)f''(x_{i+1}) = \\ & = \frac{6}{x_{i+1} - x_i} [f(x_{i+1}) - f(x_i)] + \frac{6}{x_i - x_{i-1}} [f(x_{i-1}) - f(x_i)] \end{aligned}$$

Interpolação por Splines

- Nota-se que, ao se empregar os nós internos, obtém-se $n - 1$ equações simultâneas envolvendo $n + 1$ incógnitas (segundas derivadas). Ao se empregar condições de contorno naturais, as segundas derivadas nas extremidades são nulas e o sistema a ser resolvido apresenta $n - 1$ equações.
- Obtém-se, assim, um sistema de equações lineares tridiagonal a ser resolvido.

Interpolação por Splines

- Exemplo: Determine o spline cúbico livre que interpola os seguintes dados:

i	x_i	$f(x_i)$
0	0	1,000000
1	1	2,718282
2	2	7,389056
3	3	20,085537

Interpolação por Splines

- Solução: Para as condições de contorno livres, tem-se os seguintes valores conhecidos:

$$i = 0, \quad f''(x_0) = 0$$

$$i = 3, \quad f''(x_3) = 0$$

Para os demais pontos, utiliza-se:

$$\begin{aligned} & (x_i - x_{i-1})f''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1})f''(x_i) + (x_{i+1} - x_i)f''(x_{i+1}) = \\ & = \frac{6}{x_{i+1} - x_i} [f(x_{i+1}) - f(x_i)] + \frac{6}{x_i - x_{i-1}} [f(x_{i-1}) - f(x_i)] \end{aligned}$$

Interpolação por Splines

Assim, para $i = 1$:

$$\begin{aligned} & (x_1 - x_0)f''(x_0) + 2(x_2 - x_0)f''(x_1) + (x_2 - x_1)f''(x_2) = \\ & = \frac{6}{x_2 - x_1} [f(x_2) - f(x_1)] + \frac{6}{x_1 - x_0} [f(x_0) - f(x_1)] \end{aligned}$$

Para $i = 2$:

$$\begin{aligned} & (x_2 - x_1)f''(x_1) + 2(x_3 - x_1)f''(x_2) + (x_3 - x_2)f''(x_3) = \\ & = \frac{6}{x_3 - x_2} [f(x_3) - f(x_2)] + \frac{6}{x_2 - x_1} [f(x_1) - f(x_2)] \end{aligned}$$

Interpolação por Splines

Obtém-se, assim, as equações

$$f''(x_0) = 0; \quad f''(x_3) = 0$$

$$\begin{aligned} (1-0)f''(x_0) + 2(2-0)f''(x_1) + (2-1)f''(x_2) &= \\ = \frac{6}{2-1}[7,389056 - 2,718282] + \frac{6}{1-0}[1,000000 - 2,718282] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2-1)f''(x_1) + 2(3-1)f''(x_2) + (3-2)f''(x_3) &= \\ = \frac{6}{3-2}[20,085537 - 7,389056] + \frac{6}{2-1}[2,718282 - 7,389056] \end{aligned}$$

Interpolação por Splines

O sistema a ser resolvido, então, é escrito como

$$f''(x_0) = 0$$

$$f''(x_0) + 4f''(x_1) + f''(x_2) = 17,714920$$

$$f''(x_1) + 4f''(x_2) + f''(x_3) = 48,154242$$

$$f''(x_3) = 0$$

Cuja solução é dada por

$$f''(x_0) = 0; \quad f''(x_1) = 1,513696$$

$$f''(x_2) = 11,66014; \quad f''(x_3) = 0$$

Interpolação por Splines

Pode-se, então, empregar a equação geral

$$\begin{aligned} f_i(x) = & \frac{f''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1})} (x_i - x)^3 + \frac{f''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1})} (x - x_{i-1})^3 \\ & + \left[\frac{f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f''(x_{i-1})(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x_i - x) \\ & + \left[\frac{f(x_i)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f''(x_i)(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x - x_{i-1}) \end{aligned}$$

para se obter cada um dos polinômios, trecho a trecho.

Interpolação por Splines

Por exemplo, para $i = 1$, tem-se

$$\begin{aligned} f_1(x) = & \frac{f''(x_i)}{6(x_1 - x_0)}(x_1 - x)^3 + \frac{f''(x_1)}{6(x_1 - x_0)}(x - x_0)^3 \\ & + \left[\frac{f(x_0)}{x_1 - x_0} - \frac{f''(x_0)(x_1 - x_0)}{6} \right] (x_1 - x) \\ & + \left[\frac{f(x_1)}{x_1 - x_0} - \frac{f''(x_1)(x_1 - x_0)}{6} \right] (x - x_0) \end{aligned}$$

que é válida para o primeiro intervalo, $0 \leq x_i \leq 1$.

Interpolação por Splines

Obtém-se, dessa forma, as equações

$$f_1(x) = 0,252283x^3 + 1,466000x + 1, \quad 0 \leq x \leq 1$$

$$f_2(x) = 1,691074x^3 - 5,325505x^2 + 2,280032x + 3,063550, \quad 1 \leq x \leq 2$$

$$f_3(x) = -1,943357x^3 + 5,830071x^2 - 37,830801x + 28,636665, \quad 2 \leq x \leq 3$$