

Capítulo 4

Interpolação

Neste capítulo estudaremos métodos que permitem encontrar um valor aproximado para uma função f calculada em um ponto x do intervalo I , através do conhecimento de uma coleção de pares ordenados (pontos) $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^N$ tais que $x_i \in I$. Seja P a função que aproxima f no intervalo I . Então, para o conjunto de pontos $x_i, i = 1, \dots, N$

$$P(x_i) = f(x_i),$$

dizemos que P *interpola* a função f nos valores x_1, x_2, \dots, x_N . Então podemos utilizar a função P para encontrar uma aproximação para o valor de f no ponto $x \in I$, esse procedimento é denominado *interpolação*. Se x estiver fora do intervalo I e ainda assim utilizarmos a função P para encontrar o valor aproximado de f nesse ponto, o procedimento é denominado *extrapolação*.

A escolha de polinômios para realizar essa tarefa possui os seguintes motivos: é possível aproximar uma grande variedade de funções, os polinômios são de fácil manipulação matemática (principalmente derivação e integração) e o teorema de Weierstrass

Teorema (Weierstrass)

Seja f uma função contínua definida no intervalo fechado limitado $[a, b]$ e seja δ um número positivo. Então existe um polinômio p , tal que para todo $x \in [a, b]$,

$$|f(x) - p(x)| < \delta.$$

No entanto, da mesma forma que o teorema de Weierstrass garante uma representação de f por um polinômio p tão “próximo” quanto queiramos, ele nada diz sobre o grau de p . Em algumas situações, o problema de encontrar p que desempenhe esse papel pode ser extraordinariamente difícil do ponto de vista numérico.

Antes de discutirmos o procedimento de interpolação por polinômios, vale a pena mencionar um algoritmo útil no cálculo do valor de p em um ponto x . Trata-se do algoritmo de Horner.

Algoritmo de Horner

Batizado com o nome do matemático inglês William George Horner mas já conhecido por Isaac Newton em 1669 e mesmo pelo matemático chinês Qin Jiunshao no séc. XIII, o algoritmo consiste em uma maneira otimizada de calcular $p(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots + a_1 x + a_0$ através de m multiplicações e m adições.

Basta reescrever o polinômio na forma concatenada:

$$p(x) = ((\dots((a_mx + a_{m-1})x + a_{m-2})x + \dots + a_2)x + a_1)x + a_0.$$

Assim, $p(x)$ pode ser calculado iterativamente: se denominarmos $b_m = a_m$, $a_mx + a_{m-1} = b_mx + a_{m-1} = b_{m-1}$, então obtemos uma recursão para os b_i de modo que $p(x) = b_0$. Por exemplo, o polinômio $p(x) = 3x^3 + 8x^2 - x + 1 = ((3x + 8)x - 1) + 1$. Nesse caso $b_3 = 3$, $b_2 = b_3x + 8 = 3x + 8$, $b_1 = b_2x - 1 = (3x + 8)x - 1$ e finalmente $p(x) = b_0 = b_1x + 1$.

4.1. Interpolação polinomial

Seja f_i , $i = 1, 2, \dots, n$, o valor da função f calculada nos n pontos de interpolação x_i . Encontrar o polinômio de grau m que interpola f nesses pontos consiste em resolver o sistema de equações lineares $f_i \equiv f(x_i) = p(x_i)$, ou seja o sistema

$$\begin{cases} a_mx_1^m + a_{m-1}x_1^{m-1} + \dots + a_1x_1 + a_0 = f_1 \\ a_mx_2^m + a_{m-1}x_2^{m-1} + \dots + a_1x_2 + a_0 = f_2 \\ \vdots \\ a_mx_n^m + a_{m-1}x_n^{m-1} + \dots + a_1x_n + a_0 = f_n \end{cases} \quad (4.1)$$

As $m+1$ incógnitas são os coeficientes do polinômio, a_0, a_1, \dots, a_m e o sistema possui n equações. Portanto, tipicamente, o sistema não possui solução se $m+1 < n$, possui infinitas soluções se $m+1 > n$ e será unicamente determinado se $m+1 = n$.

Observação. Vale lembrar que esse procedimento não é adequado para determinar polinômios interpolantes se os dados de entrada possuírem componentes aleatórios (medidas experimentais), ou de alguma forma, o valor da função que se quer interpolar não é conhecida exatamente ou com suficiente exatidão.

4.1.1. Interpolação pelos polinômios de Lagrange

Como veremos adiante, resolver o sistema (4.1) não é a maneira mais simples ou menos sujeita a erros de arredondamento quando desejamos determinar o polinômio interpolante. O seguinte teorema garante a unicidade do polinômio interpolante, o que nos permite buscar maneiras alternativas de construí-lo. Por ser único, o resultado será independente da construção.

Teorema (unicidade do polinômio interpolante)

Sejam x_1, \dots, x_n , pontos distintos. Para um conjunto arbitrário de valores f_1, \dots, f_n existe um e somente um polinômio p de grau menor ou igual a $n-1$ tal que

$$p(x_i) = f_i,$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

Demonstração: No caso em que temos n pontos distintos e procuramos um polinômio de grau menor ou igual a $n - 1$, a matriz quadrada dos coeficientes do sistema de equações lineares (4.1) assume a forma da seguinte matriz de Vandermonde,

$$\begin{pmatrix} x_1^{n-1} & x_1^{n-2} & \cdots & x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^{n-1} & x_2^{n-2} & \cdots & x_2^2 & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n^{n-1} & x_n^{n-2} & \cdots & x_n^2 & x_n & 1 \end{pmatrix}.$$

Por hipótese os x_i são distintos, portanto o determinante da matriz, dado por

$$\prod_{1 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i)$$

é não nulo, conseqüentemente, a solução do sistema é única e o polinômio também. ■

Vamos supor que para cada $1 \leq j \leq n$ exista um polinômio de grau $n - 1$, $l_j(x)$ tal que para cada $1 \leq k \leq n$, o valor de l_j no ponto de interpolação x_k é tal que

$$l_j(x_k) = \delta_{j,k},$$

onde $\delta_{j,k}$ é o delta de Kronecker¹. Nesse caso, os polinômios l_j permitem reescrever o polinômio interpolante $p(x)$:

$$p(x) = f_1 l_1(x) + f_2 l_2(x) + \dots + f_n l_n(x) = \sum_{j=1}^n f_j l_j(x),$$

podemos trivialmente verificar que $p(x_k) = \sum_{j=1}^n f_j l_j(x_k) = \sum_{j=1}^n f_j \delta_{j,k} = f_k$. Portanto se formos capazes de construir os polinômios l_j a interpolação estará determinada. Vamos então construí-los a partir das seguintes considerações.

Segundo a sua definição $l_j(x_k) = 0$ para todo x_k tal que $k \neq j$, então os pontos x_k são raízes de l_j , se $j \neq k$ e portanto, a menos de uma constante multiplicativa, C_j , o polinômio l_j é determinado pelo produto

$$\begin{aligned} l_j(x) &= C_j(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \dots (x - x_n) \\ &= C_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n (x - x_i). \end{aligned}$$

¹ O delta de Kronecker é definido pela expressão

$$\delta_{j,k} = \begin{cases} 0 & , \quad j \neq k \\ 1 & , \quad j = k \end{cases},$$

onde j e k são dois números inteiros.

Por fim, a constante C_j pode ser determinada através da propriedade $l_j(x_j) = 1$:

$$l_j(x_j) = 1 \quad \Rightarrow \quad C_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n (x_j - x_i) = 1,$$

ou seja

$$C_j = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{(x_j - x_i)}.$$

Dessa forma, os polinômios $l_j(x)$, denominados polinômios de Lagrange são determinados a partir do seguinte produtório

$$l_j(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{x - x_i}{x_j - x_i}$$

e a interpolação de Lagrange

$$p(x) = \sum_{j=1}^n f_j l_j(x).$$

Exemplo: Seja a função $f(x) = \text{sen}(x)$ a partir da qual construímos a interpolação nos três pontos $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ e $x_3 = 2$. Será então um polinômio de segundo grau. Os pontos de interpolação são dados por

j	x_j	$f_j = \text{sen}(x_j)$
1	0	0
2	1	$\text{sen}(1)$
3	2	$\text{sen}(2)$

os polinômios de Lagrange são então dados por

$$l_1(x) = \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)} = \frac{x^2 - 3x + 2}{2},$$

$$l_2(x) = \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)} = -x^2 + 2x$$

e

$$l_3(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)} = \frac{x^2 - x}{2}.$$

A interpolação é dada por

$$p(x) = \left(\frac{\text{sen}(2)}{2} - \text{sen}(1) \right) x^2 + \left(2\text{sen}(1) - \frac{\text{sen}(2)}{2} \right) x$$

4.1.2. Interpolação de Newton

De acordo com o teorema da unicidade do polinômio interpolante, toda interpolação de n pontos por um polinômio de grau $n - 1$ é única e pode ser obtida pelo método de Lagrange. No entanto, existem outras maneiras de construir o polinômio $p(x)$ que podem ser mais convenientes. Uma

dessas maneiras é a interpolação de Newton, que permite a inserção de pontos adicionais de maneira mais simples e menos sujeita à deterioração por erros de arredondamento.

O método consiste em determinar o polinômio

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2) + \dots + a_{n-1}(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).$$

Por construção,

$$p(x_1) = a_0$$

como $p(x)$ é o polinômio interpolante, $p(x_1) = f_1$, ou seja,

$$a_0 = f_1.$$

Da mesma forma,

$$\begin{aligned} p(x_2) &= a_0 + a_1(x_2 - x_1) = f_2 \\ &= f_1 + a_1(x_2 - x_1) = f_2, \end{aligned}$$

ou seja,

$$a_1 = \frac{f_2 - a_0}{x_2 - x_1}$$

e assim por diante, os coeficientes são determinados recursivamente e o k -ésimo coeficiente é determinado em termos dos pontos de interpolação e os coeficientes anteriores pela expressão

$$a_k = \frac{f_{k+1} - a_0 - \sum_{j=1}^{k-1} a_j(x_{k+1} - x_1) \dots (x_{k+1} - x_j)}{\prod_{j=1}^k (x_{k+1} - x_j)}. \quad (4.2)$$

A fórmula de recorrência (4.2) pode ser convenientemente descrita através da notação de **diferenças divididas**. Seja a função $f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{l+1}]$ definida pela relação de recorrência

$$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_l, x_{l+1}] = \frac{f[x_{k+1}, x_{k+1}, \dots, x_{l+1}] - f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_l]}{x_{l+1} - x_k}$$

e

$$f[x_k] = f_k \doteq f(x_k).$$

Assim, podemos verificar que

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

e

$$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}] = \frac{f[x_{k+1}, x_{k+2}] - f[x_k, x_{k+1}]}{x_{k+2} - x_k}.$$

Nessa notação, os coeficientes do polinômio são dados por

$$\begin{aligned} a_0 &= f[x_1], \\ a_1 &= f[x_1, x_2], \\ a_2 &= f[x_1, x_2, x_3], \\ &\vdots \\ a_{n-1} &= f[x_1, x_2, \dots, x_n]. \end{aligned}$$

Diagramaticamente, os coeficientes são calculados a partir da seqüência de diferenças divididas calculadas recursivamente:

$$\begin{array}{cccccccc} x_1 & \rightarrow & f[x_1] & \rightarrow & f[x_1, x_2] & \rightarrow & f[x_1, x_2, x_3] & \dots & f[x_1, \dots, x_{n-1}] & \rightarrow & f[x_1, \dots, x_n] \\ & & & \nearrow & & \nearrow & & & & \nearrow & \\ x_2 & \rightarrow & f[x_2] & \rightarrow & f[x_2, x_3] & \rightarrow & f[x_2, x_3, x_4] & \dots & f[x_2, \dots, x_n] & & \\ & & & \nearrow & & \nearrow & & & & & \\ x_3 & \rightarrow & f[x_3] & \rightarrow & f[x_3, x_4] & \rightarrow & f[x_3, x_4, x_5] & \dots & & & \\ \vdots & & & & \\ x_{n-2} & \rightarrow & f[x_{n-2}] & \rightarrow & f[x_{n-2}, x_{n-1}] & \rightarrow & f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] & \dots & & & \\ & & & \nearrow & & \nearrow & & & & & \\ x_{n-1} & \rightarrow & f[x_{n-1}] & \rightarrow & f[x_{n-1}, x_n] & & & & & & \\ & & & \nearrow & & & & & & & \\ x_n & \rightarrow & f[x_n] & & & & & & & & \end{array}$$

Exemplo: Vamos realizar a interpolação da função $\text{sen}(x)$ no intervalo $x \in [0, 2]$ através de um polinômio de segundo grau nos pontos $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ e $x_3 = 2$. Neste caso,

j	x_j	$f_j = \text{sen}(x_j)$
1	0	0
2	1	$\text{sen}(1)$
3	2	$\text{sen}(2)$

e $f[x_1] = 0$, $f[x_2] = \text{sen}(1)$ e $f[x_3] = \text{sen}(2)$. As próximas diferenças divididas são dadas por

$$f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} = \frac{\text{sen}(1) - 0}{1 - 0}$$

e

$$f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2} = \frac{\text{sen}(2) - \text{sen}(1)}{2 - 1}.$$

Finalmente,

$$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1} = \frac{\text{sen}(2) - \text{sen}(1) - \text{sen}(1)}{2 - 0}.$$

Portanto, o polinômio interpolante

$$p(x) = f[x_1] + f[x_1, x_2](x - x_1) + f[x_1, x_2, x_3](x - x_1)(x - x_2)$$

é

$$p(x) = \operatorname{sen}(1)x + \frac{\operatorname{sen}(2) - 2\operatorname{sen}(1)}{2}x(x-1)$$

Exercício. 1) Inclua o ponto $x_4 = 1/2$ na interpolação anterior e encontre o polinômio interpolante de terceiro grau.

2) Encontre o polinômio interpolante de terceiro grau nos mesmos pontos do exemplo anterior (incluindo o ponto $x_4 = 1/2$) para as funções $\cos(x)$, $x\operatorname{sen}(x)$ e $e^x - 1$.

4.1.3. Erros de truncamento na interpolação por polinômios

Seja f uma função contínua e n vezes diferenciável no intervalo (a, b) que contém os pontos x_1, x_2, \dots, x_n e seja p o polinômio de grau $n - 1$ que interpola f nesses pontos. Então é possível mostrar² que para cada $x \in (a, b)$, existe um $\zeta(x) \in (a, b)$ tal que

$$f(x) - p(x) = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\zeta) \prod_{i=1}^n (x - x_i). \quad (4.3)$$

Poderíamos supor que para uma f contínua e suficientemente suave, a seqüência de polinômios interpolantes $\{p_n\}_{n \geq 1}$ convergiria para f conforme aumentássemos o número de pontos de interpolação no intervalo (a, b) . No entanto, como o exemplo a seguir ilustra, isto nem sempre ocorre.

Fenômeno de Runge

A seguinte função, proposta por Carle D. T. Runge ao estudar o comportamento dos erros na interpolação polinomial,

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}, \quad x \in [-1, 1]$$

é tal que a seqüência de polinômios interpolantes $\{p_n\}_n$ construídos a partir de pontos de interpolação igualmente espaçados não converge³ para $f(x)$ no intervalo de valores $x \in (-1, -0.727) \cup (0.727, 1)$.

Na realidade é possível demonstrar que

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - p_n(x)| = +\infty.$$

Podemos analisar esse comportamento não regular da interpolação a partir do termo

$$\prod_{i=1}^n (x - x_i) \quad (4.4)$$

contido na expressão (4.3). Esse produto possui uma flutuação para os valores do argumento próximos à fronteira do intervalo $(-1, 1)$ que é progressivamente ampliada conforme aumentamos o número de pontos se os mesmos forem igualmente espaçados. Os gráficos seguintes ajudam a ilustrar o comportamento do produto (4.4).

² A demonstração pode ser encontrada nas referências:

Eldén, L.; Wittmeyer-Koch, L. *Numerical Analysis* (1990),

Claudio, D. M.; Marins, J. M. *Cálculo Numérico Computacional - teoria e prática* 3ª ed. (2000).

³ A demonstração pode ser encontrada na referência :

Isaacson, E. ; Keller, H. *Analysis of Numerical Methods* (1966).

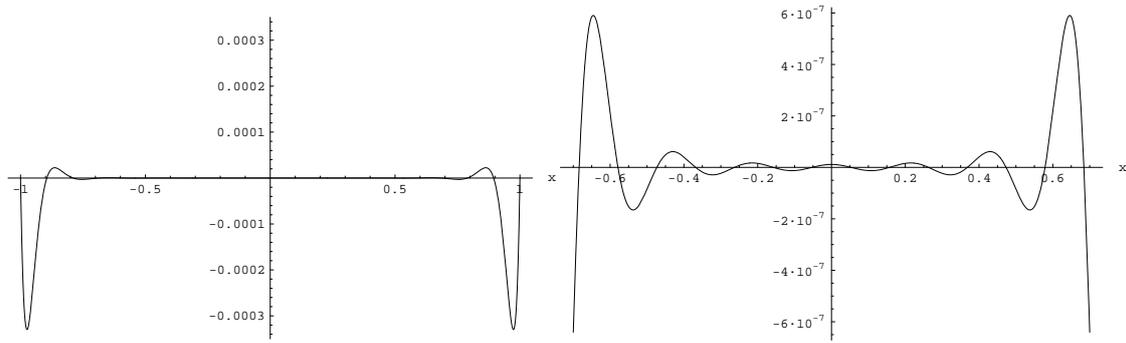


Figura 4.1. a) comportamento do produtório (4.4) com 20 pontos igualmente espaçados no intervalo $[-1, 1]$. b) recorte do mesmo produtório no intervalo $[-0.7, 0.7]$.

Esse comportamento pode ser minimizado através da escolha de pontos não igualmente espaçados. Na realidade é possível demonstrar que a variação do termo (4.4) é mínima em valor absoluto quando os pontos x_i estão espaçados em um intervalo (a, b) segundo a seguinte expressão

$$x_i = \frac{a + b}{2} + \frac{a - b}{2} \cos\left(\frac{2i - 1}{2n} \pi\right)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$. Esses pontos são denominados *pontos de Chebyshev*.

Utilizando os pontos de Chebyshev no intervalo $[-1, 1]$ podemos controlar o comportamento dos polinômios interpolantes para a função de Runge e garantir a convergência $p_{n-1}(x) \rightarrow f(x)$ quando $n \rightarrow +\infty$.

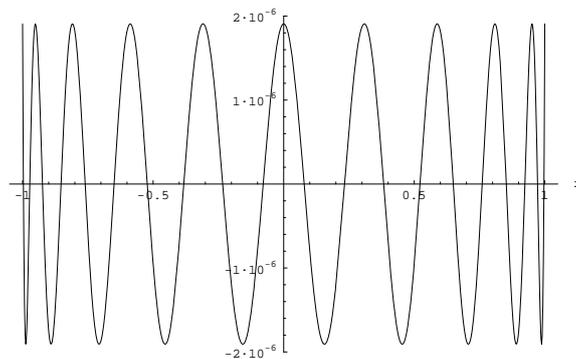


Figura 4.2. O produtório (4.4) com 20 pontos de Chebyshev

Ainda assim, existem funções contínuas que requerem um número impraticável de pontos para que a interpolação se aproxime da função original. Por exemplo, a função $\sqrt{|x|}$ no intervalo $[-1, 1]$ requer um polinômio de grau maior que 10^6 para que a interpolação seja exata até 10^{-3} .

Em geral, quando utilizamos polinômios de grau maior ou igual a 100, a maior dificuldade é lidar com os erros de arredondamento.

4.2. Interpolação spline

Splines são funções formadas por diferentes polinômios de grau menor ou igual a um m , definidos para cada intervalo entre os pontos de interpolação de modo que em cada ponto de interpolação o spline é contínuo, assim como todas as derivadas até ordem $m - 1$.

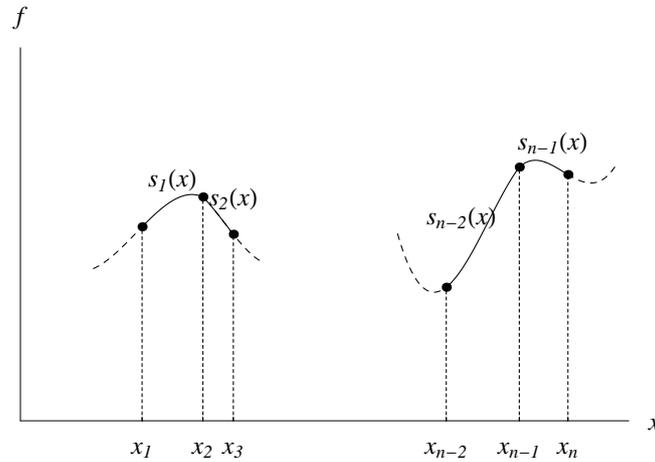


Figura 4.3. Interpolação spline

Nas situações em que o número de pontos de interpolação é grande (por exemplo, em aplicações CAD – *computer-aided design*), a inexatidão na aproximação obtida com um polinômio de grau elevado é dominada pelos erros de arredondamento. Ou então quando a função que se quer interpolar possui derivadas de valor numérico elevado em alguma região do intervalo de interpolação, a aproximação é prejudicada em todo o intervalo. Nessas situações, a interpolação por spline pode auxiliar a tarefa de interpolação.

O procedimento de construir splines é análogo qualquer que seja o grau dos polinômios utilizados, como o spline de maior interesse (veremos porque) é aquele formado por polinômios de grau 3, nos concentraremos nesse caso apenas.

4.2.1. Interpolação spline cúbica

Sejam $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ os pontos de interpolação. um spline cúbico é uma função $s(x)$, definida no intervalo $[x_1, x_n]$ com as seguintes propriedades:

1. $s(x)$, $s'(x)$ e $s''(x)$ são funções contínuas no intervalo (x_1, x_n) .
2. Em cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$, $s(x)$ é um polinômio cúbico tal que $s(x_i) = f_i \doteq f(x_i)$ para $i = 1, 2, \dots, n$.

Portanto, s é composto por $n - 1$ polinômios cúbicos, cada polinômio é determinado por 4 coeficientes (a_i, b_i, c_i e d_i) o que dá um total de $4n - 4$ coeficientes a determinar, ou seja $4n - 4$ incógnitas. Cada polinômio deve satisfazer a condição de continuidade nos pontos de interpolação além, é claro, de interpolar o ponto x_i , ou seja,

$$s_i(x_i) = f_i \quad (\text{interpolação}),$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 1$ e

$$s_{n-1}(x_n) = f_n.$$

A continuidade é satisfeita se

$$s_i(x_{i+1}) = f_{i+1} \quad (\text{continuidade de } s),$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 2$. As condições acima implicam $2(n - 1)$ equações. Faltam ainda as continuidades de $s'(x)$ e $s''(x)$:

$$s'_i(x_{i+1}) = s'_{i+1}(x_{i+1}) \quad (\text{continuidade de } s'),$$

$$s''_i(x_{i+1}) = s''_{i+1}(x_{i+1}) \quad (\text{continuidade de } s''),$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 2$. Cada condição equivale a $n - 2$ equações. Portanto temos até agora um total de $4n - 6$ equações. Restam duas equações para que seu número seja igual ao número de incógnitas. Essas duas últimas equações relacionam-se com as condições de fronteira do spline. Com relação ao comportamento de $s(x)$ no extremo do intervalo, há duas possibilidades a se considerar:

i) spline natural,

$$s''_1(x_1) = 0$$

$$s''_{n-1}(x_n) = 0$$

possui esse nome por ser a condição equivalente à aproximação por régua elástica (uso mais tradicional do spline).

ii) spline com mesmas condições de f na extremidade,

$$s'_1(x_1) = f'(x_1)$$

$$s'_{n-1}(x_n) = f'(x_n)$$

essa escolha pressupõe que a informação sobre o valor da derivada de f nos extremos do intervalo seja conhecida. A aproximação obtida com essa escolha possui uma maior exatidão do que a obtida com o spline natural.

Nos próximos parágrafos montaremos o sistema de equações lineares para determinarmos $4n - 4$ os coeficientes a_i, b_i, c_i e d_i dos $n - 1$ polinômios que compõem o spline:

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3. \quad (4.5)$$

Por ser uma interpolação, a cada x_i , temos que $s(x_i) = f_i$, ou seja, $s_i(x_i) = f_i$. Portanto, em vista da equação (4.5) a interpolação implica

$$f_i = s_i(x_i) = a_i$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 1$. O que determina o valor dos coeficientes a_i .

A continuidade do spline $s(x)$ nos pontos de interpolação implica a equação $s_i(x_{i+1}) = s_{i+1}(x_{i+1})$ para $i = 1, 2, \dots, n - 2$, ou seja,

$$\begin{aligned} a_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 &= a_{i+1}, \\ f_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 &= f_{i+1}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Para aliviar a notação, vamos introduzir a notação $h_i = (x_{i+1} - x_i)$. Dessa forma, a equação anterior (4.6) pode ser reescrita como

$$f_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = f_{i+1} \quad (4.7)$$

A continuidade na primeira e na segunda derivadas implicam

$$b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1} \quad (4.8)$$

e

$$c_i + 3d_i h_i = c_{i+1} \quad (4.9)$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 2$.

Isolando d_i na equação (4.9) e substituindo em (4.7) e (4.8) encontramos respectivamente

$$f_{i+1} = f_i + b_i h_i + \frac{h_i^2}{3}(2c_i + c_{i+1}) \quad (4.10)$$

e

$$b_{i+1} = b_i + h_i(c_i + c_{i+1}) \quad (4.11)$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 2$.

Isolando b_i na equação (4.10) podemos determiná-lo em termos dos valores conhecidos f_i, h_i e da incógnita c_i (o mesmo acontece com os coeficientes d_i , a partir da equação (4.9)),

$$b_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{h_i}{3}(2c_i + c_{i+1}), \quad (4.12)$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 2$.

A substituição de b_i e b_{i-1} dados pela equação (4.12) na equação (4.11) com os índices deslocados de uma unidade, ou seja, $b_i = b_{i-1} + h_{i-1}(c_{i-1} + c_i)$, permite encontrar uma equação para os coeficientes c_i em termos dos valores conhecidos f_i e h_i :

$$h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_i c_{i+1} = 3 \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} \right) - 3 \left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} \right), \quad (4.13)$$

para $i = 2, 3, \dots, n - 1$. A equação anterior define um sistema de equações lineares para as incógnitas c_i . Note que além dos coeficientes c_1, c_2, \dots, c_{n-1} , o sistema envolve um coeficiente c_n que não está diretamente relacionado a algum dos $n - 1$ polinômios s_i . Na realidade, c_n está relacionado às condições no extremo do intervalo de interpolação e sua determinação depende do

tipo de spline que estamos construindo, se é um spline natural ou um spline que satisfaz as mesmas condições de f nos extremos do intervalo de interpolação.

As $n - 2$ equações (4.13) envolvem n variáveis (as incógnitas c_i), para que o sistema (tipicamente) tenha solução única devemos incluir as duas últimas equações que descrevem o comportamento do spline nos extremos do intervalo de interpolação. Vamos estudar inicialmente o caso do spline natural.

Spline natural

O spline natural deve satisfazer as condições $s''(x_1) = 0$ e $s''(x_n) = 0$, estas duas equações implicam respectivamente

$$c_1 = 0$$

e

$$2c_{n-1} + 6d_{n-1}h_{n-1} = 0. \quad (4.14)$$

A equação (4.14) implica em termos da equação para os coeficientes d_i (4.9) que $c_n = 0$.

Colecionando esses resultados temos então a seguinte situação: resolvendo o sistema de equações

$$\begin{cases} c_1 & = 0 \\ h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_ic_{i+1} & = 3 \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} \right) - 3 \left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} \right), \quad i = 2, \dots, n-1 \\ c_n & = 0 \end{cases}$$

encontramos o valor dos coeficientes c_i . A partir desses coeficientes determinamos o valor dos coeficientes b_i através das equações (4.12)

$$b_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{h_i}{3}(2c_i + c_{i+1}),$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 1$; e o valor dos coeficientes d_i através da equações

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}, \quad (4.15)$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 1$, obtida a partir de (4.9). Os coeficientes $a_i = f_i$ como já havíamos determinado anteriormente.

Spline com as mesmas condições de f nos extremos

Nesse caso o spline deve satisfazer as condições $s'(x_1) = f'(x_1) \equiv f'_1$ e $s'(x_n) = f'(x_n) \equiv f'_n$. Para determinar o spline, f'_1 e f'_n devem ser valores conhecidos. As condições implicam respectivamente

$$b_1 = f'_1 \quad (4.16)$$

e

$$b_{n-1} + 2c_{n-1}h_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'_n. \quad (4.17)$$

Como os coeficientes b_i satisfazem a equação (4.12), a equação (4.16) implica

$$f'_1 = b_1 = \frac{f_2 - f_1}{h_1} - \frac{h_1}{3}(2c_1 + c_2),$$

ou seja,

$$2h_1c_1 + h_1c_2 = 3 \left(\frac{f_2 - f_1}{h_1} \right) - 3f'_1. \quad (4.18)$$

Da mesma forma, no caso da equação (4.17), as equações (4.12) e (4.15) implicam

$$h_{n-1}c_{n-1} + 2h_{n-1}c_n = -3 \left(\frac{f_n - f_{n-1}}{h_{n-1}} \right) + 3f'_n. \quad (4.19)$$

Em resumo, devemos resolver o sistema formado pelas equações (4.13), (4.18) e (4.19)

$$\begin{cases} 2h_1c_1 + h_1c_2 & = 3 \left(\frac{f_2 - f_1}{h_1} \right) - 3f'_1 \\ h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_ic_{i+1} & = 3 \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} \right) - 3 \left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} \right), \quad i = 2, \dots, n-1 \\ h_{n-1}c_{n-1} + 2h_{n-1}c_n & = -3 \left(\frac{f_n - f_{n-1}}{h_{n-1}} \right) + 3f'_n \end{cases}$$

e então determinar os coeficientes b_i e d_i através das equações (4.12) e (4.15):

$$b_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{h_i}{3}(2c_i + c_{i+1}),$$

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i},$$

para $i = 1, 2, \dots, n-1$. Naturalmente, os coeficientes $a_i = f_i$.

4.3. Exercícios

1) (Aquecimento) Cheque, indiretamente, a exatidão das bibliotecas de funções de seu computador ou calculadora científica através da análise do comportamento das seguintes identidades nos valores de $x = i \frac{\pi}{20}$, para $i = 1, 2, \dots, 9$.

1. $\text{sen}^2(x) + \text{cos}^2(x) = 1$
2. $\text{sen}(2x) = 2\text{sen}(x) \text{cos}(x)$
3. $\text{cos}(x) = \text{sen}(x + \pi/2)$
4. $\exp(x) \exp(-x) = 1$
5. $\ln(e^x) = x$
6. $\sqrt{x} \sqrt{x} = x$

2) Utilize a seguinte tabela (com valores exatos até a precisão utilizada),

x	$\text{sen}(x)$	$\text{cos}(x)$	$\text{cot}(x)$
0,001	0,001000	1,000000	1000,0
0,002	0,002000	0,999998	499,999
0,003	0,003000	0,999996	333,332
0,004	0,004000	0,999992	249,999
0,005	0,005000	0,999988	199,998

para calcular $\text{cot}(0,0015)$ com a maior precisão possível através de:

1. interpolação para $\text{cot}(x)$.
2. interpolação de $\text{sen}(x)$ e $\text{cos}(x)$.
3. estime o erro em 2). Dica: propagação de erros.
4. Explique a diferença entre os resultados em 1) e 2).

3) Compare os erros na aproximação das funções abaixo no intervalo $[0, 1]$ através de:

- i) Expansão de Taylor em torno do ponto $x_0 = 0,5$
- ii) Interpolação de Lagrange com pontos igualmente espaçados, com $x_1 = 0$ até $x_4 = 1$.
- iii) Interpolação de Lagrange utilizando os pontos de Chebyshev.

Utilize sempre polinômios de 3º grau e compare os erros em $x = 0; 0,1; 0,2; \dots; 1,0$.

1. $\text{sen}(2x)$
2. e^x
3. \sqrt{x}
4. $\frac{1}{1 + 25x^2}$
5. x^4

4) Encontre a interpolação *spline* cúbica (*spline* natural) para os dados abaixo

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

5) Decida se as seguintes funções são *splines*

1. $f(x) = \begin{cases} x & , -1 \leq x \leq 0 \\ 2x & , 0 \leq x \leq 1 \\ x + 1 & , 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$
2. $f(x) = \begin{cases} x & , -1 \leq x \leq 0 \\ 2x - 1 & , 0 \leq x \leq 1 \\ x + 1 & , 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$

$$3. f(x) = \begin{cases} 0 & , -1 \leq x \leq 0 \\ x^2 & , 0 \leq x \leq 1 \\ 2x - 1 & , 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$$

6) Determine os valores de a e b de forma que a seguinte função

$$f(x) = \begin{cases} x^3 + x & , -1 \leq x \leq 0 \\ ax^2 + bx & , 0 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

seja um *spline* cúbico.

Respostas

2) A partir dos dados da tabela encontramos as seguintes interpolações. Observação: os resultados foram obtidos a partir de operações em ponto flutuante e os primeiros sete dígitos estão representados. Se admitirmos os valores da tabela como racionais exatos, a interpolação envolverá apenas coeficientes racionais. Por exemplo, a interpolação da função seno será simplesmente $P(x) = x$; nesse caso, a diferença deve-se exclusivamente aos erros de arredondamento cometidos nas operações aritméticas.

para a função cotangente $P_{cot}(x) = 2283.332\dots - 1.874997\dots \cdot 10^6 x + 7.083307\dots \cdot 10^8 x^2 - 1.249991\dots \cdot 10^{11} x^3 + 8.33325 \cdot 10^{12} x^4$.

para a função seno $P_{sen}(x) = -3.469446\dots \cdot 10^{-18} x + 7.275957\dots \cdot 10^{-12} x^2 - 1.862451\dots \cdot 10^{-9} x^3$.

para a função cosseno $P_{cos}(x) = 1.000008\dots - 0.01399999 x + 7.833333 x^2 - 2000 x^3 + 166666.6 x^4$.

O erro cometido na aproximação do valor de $\cot(0.0015)$ por $\frac{P_{cos}(0.0015)}{P_{sen}(0.0015)}$ pode ser avaliada através da propagação de erros. De acordo com ela, o erro – vamos denominá-lo $\delta \frac{P_{cos}}{P_{sen}}(x)$ – está relacionado aos erros cometidos na aproximação do seno e do cosseno pelas respectivas interpolações⁴:

$$\delta \frac{P_{cos}}{P_{sen}}(x) \approx \left| \frac{1}{P_{sen}(x)} \right| \delta P_{cos}(x) + \left| \frac{P_{cos}(x)}{(P_{sen}(x))^2} \right| \delta P_{sen}(x),$$

7 onde os erros são dados por $\delta P_{cos}(x) = |\cos(x) - P_{cos}(x)|$ e $\delta P_{sen}(x) = |\sin(x) - P_{sen}(x)|$.

Dessa forma, $\delta P_{cos}(0.0015) = 1.5625\dots \cdot 10^{-7}$ e $\delta P_{sen}(0.0015) = 5.625\dots \cdot 10^{-10}$ que implicam a estimativa $\delta \frac{P_{cos}}{P_{sen}}(0.0015) \approx 0.0694449\dots$. Já o erro obtido a partir da interpolação direta da cotangente é $\delta P_{cot}(0.0015) = |\cos(0.0015) - P_{cot}(0.0015)| = 18.2292\dots$

A diferença entre as duas estimativas se deve ao fato de que a função cotangente varia muito rapidamente no intervalo de pontos escolhido, o que potencialmente aumenta os erros de truncamento. Por outro lado, as funções seno e cosseno variam pouco, o que permite uma interpolação com menos erro de truncamento.

⁴ Calculamos a cotangente através de uma expressão do tipo $f(z_1, z_2) = \frac{z_1}{z_2}$, portanto, de acordo com a expressão para propagação de erros, $\delta f(z_1, z_2) \approx \left| \frac{\partial f}{\partial z_1}(z_1, z_2) \right| \delta z_1 + \left| \frac{\partial f}{\partial z_2}(z_1, z_2) \right| \delta z_2$.

3) Devemos construir duas interpolações polinomiais, uma com 4 pontos igualmente espaçados, $x_j = \frac{1}{3}(j-1)$, para $j = 1, 2, 3, 4$ e a outra com pontos espaçados segundo a fórmula de Chebishev, $x_j = \frac{a+b}{2} + \frac{(a-b)}{2} \cos\left(\frac{2j-1}{2n}\pi\right)$, com $n = 4$ e $j = 1, 2, 3, 4$.

- A função $\sin(2x)$ possui expansão em série de Taylor em torno de $x = 0.5$ dada por $\sin(2x) = 0.8414709\dots + 1.080604\dots(x-0.5) - 1.682941\dots(x-0.5)^2 - 0.7204037\dots(x-0.5)^3 + O((x-0.5)^4)$. A interpolação com pontos igualmente espaçados é $P(x) = 2.10091x - 0.510277x^2 - 0.681331x^3$. A interpolação com os pontos de Chebishev é $P(x) = -0.00356134 + 2.11239x - 0.519039x^2 - 0.685124x^3$.
- A função e^x possui expansão em série de Taylor em torno de $x = 0.5$ dada por $e^x = 1.64872 + 1.64872(x-0.5) + 0.824361(x-0.5)^2 + 0.274787(x-0.5)^3 + O((x-0.5)^4)$. A interpolação com pontos igualmente espaçados é $P(x) = 1 + 1.01399x + 0.425665x^2 + 0.278626x^3$. A interpolação com os pontos de Chebishev é $P(x) = 0.999509 + 1.01563x + 0.424301x^2 - 0.27824x^3$.
- A função \sqrt{x} possui expansão em série de Taylor em torno de $x = 0.5$ dada por $\sqrt{x} = 0.707107 + 0.707107(x-0.5) + 0.353553(x-0.5)^2 + 0.353553(x-0.5)^3 + O((x-0.5)^4)$. A interpolação com pontos igualmente espaçados é $P(x) = 2.52192x - 2.79344x^2 + 1.27152x^3$. A interpolação com os pontos de Chebishev é $P(x) = 0.127449 + 1.8407x - 1.69585x^2 + 0.732394x^3$.
- A função $\frac{1}{1+25x^2}$ possui expansão em série de Taylor em torno de $x = 0.5$ dada por $\frac{1}{1+25x^2} = 0.137931 + \dots - .475624(x-0.5) + 1.16446(x-0.5)^2 - 2.37529(x-0.5)^3 + O((x-0.5)^4)$. A interpolação com pontos igualmente espaçados é $P(x) = 1 - 3.45075x + 4.35728x^2 - 1.86807x^3$. A interpolação com os pontos de Chebishev é $P(x) = 1.11311 - 4.09332x + 5.43048x^2 - 2.42567x^3$.
- A função x^4 possui expansão em série de Taylor em torno de $x = 0.5$ dada por $x^4 = -0.0625 + 0.5(x-0.5) + 1.5(x-0.5)^2 + 2(x-0.5)^3 + O((x-0.5)^4)$. A interpolação com pontos igualmente espaçados é $P(x) = 0.222222\dots x - 1.222222\dots x^2 + 2x^3$. A interpolação com os pontos de Chebishev é $P(x) = -0.0078125 + 0.25x - 1.25x^2 + 2x^3$.

4) O spline cúbico natural para o conjunto de dados formado por seis pontos é construído a partir de cinco polinômios de grau 3: $s_i(x) = a_i + b_i x + c_i x^2 + d_i x^3$, onde $i = 1, 2, \dots, 5$ mais o coeficiente acessório c_6 . Como trata-se de um spline natural $c_1 = c_6 = 0$, os demais coeficientes c_i são solução do sistema

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -6 \\ 0 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

A solução é o vetor $(0.401914, -1.60766, 0.0287081, 1.49282)^T$. Os coeficientes b_i e d_i são calculados a partir de c_1, c_2, \dots, c_5 , os coeficientes a_i são calculados a partir da relação $a_i = f_i$.

5) Para que uma função $g(x)$ seja um spline de ordem n é necessário que as derivadas de ordem $0 \leq k \leq n - 1$ dos polinômios que a constitui, $s_i(x)$, se igualem nos pontos de interpolação, ou seja $s_i^{(k)}(x_{i+1}) = s_{i+1}^{(k)}(x_{i+1})$:

$$1. f(x) = \begin{cases} x & , -1 \leq x < 0 \\ 2x & , 0 \leq x < 1 \\ x + 1 & , 1 \leq x \leq 2 \end{cases} . \text{ Os pontos de interpolação internos são } x = 0 \text{ e } x = 1,$$

de acordo com a expressão para f , os limites nesses pontos existem: $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = 0$ e

$$\lim_{x \rightarrow 1} f(x) = 2. \text{ Quanto à derivada, } f'(x) = \begin{cases} 1 & , -1 < x < 0 \\ 2 & , 0 < x < 1 \\ 1 & , 1 < x < 2 \end{cases} , \text{ ou seja, a derivada não}$$

é contínua. Portanto, como apenas f é contínua, essa função é um spline linear.

$$2. f(x) = \begin{cases} x & , -1 \leq x < 0 \\ 2x - 1 & , 0 \leq x < 1 \\ x + 1 & , 1 \leq x \leq 2 \end{cases} . \text{ Os pontos de interpolação internos são } x = 0 \text{ e } x = 1,$$

de acordo com a expressão para f , o limite no ponto $x = 0$ não existe, pois $\lim_{x \rightarrow 0^-} f(x) = 0$ e $\lim_{x \rightarrow 0^+} f(x) = -1$. Isto é o suficiente para garantir que f não é um spline.

$$3. f(x) = \begin{cases} 0 & , -1 \leq x < 0 \\ x^2 & , 0 \leq x < 1 \\ 2x - 1 & , 1 \leq x \leq 2 \end{cases} . \text{ Os pontos de interpolação internos são } x = 0 \text{ e } x = 1,$$

de acordo com a expressão para f , os limites nesses pontos existem: $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = 0$ e

$$\lim_{x \rightarrow 1} f(x) = 1. \text{ Quanto à derivada, } f'(x) = \begin{cases} 0 & , -1 < x < 0 \\ 2x & , 0 < x < 1 \\ 2 & , 1 < x < 2 \end{cases} , \text{ podemos verificar}$$

que os limites em $x = 0$ e $x = 1$ existem: $\lim_{x \rightarrow 0} f'(x) = 0$ e $\lim_{x \rightarrow 1} f'(x) = 2$. Então, como f envolve apenas polinômios de grau menor ou igual a 2, segue que f é um spline quadrático.

6) Dada a função

$$f(x) = \begin{cases} x^3 + x & , -1 \leq x \leq 0 \\ ax^2 + bx & , 0 \leq x \leq 1 \end{cases} , \tag{4.20}$$

temos que

$$f'(x) = \begin{cases} 3x^2 + 1 & , -1 < x < 0 \\ 2ax + b & , 0 < x < 1 \end{cases} \tag{4.21}$$

e

$$f''(x) = \begin{cases} 6x & , -1 < x < 0 \\ 2a & , 0 < x < 1 \end{cases} . \tag{4.22}$$

Para que f seja um spline cúbico, ela deve ser tal que os limites para f , f' e f'' devem estar bem definidos em $x = 0$. Ou seja, a partir de (4.22), devemos ter que $a = 0$; a partir de (4.21), devemos ter que $b = 1$. Quaisquer que sejam os valores de a e b , $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = 0$. Portanto, f será um spline cúbico se $a = 0$ e $b = 1$.