

Equipe de Cálculo Numérico do MAP/IME/USP

Nestas notas desenvolveremos a teoria da parte final do curso, escolhendo alguns caminhos alternativos à referência principal, que já são adotados nas aulas por alguns professores da disciplina de Cálculo Numérico da Poli. Na primeira parte desenvolvemos o núcleo básico previsto habitualmente no programa do curso. Depois desenvolvemos alguns complementos, que podem ou não ser aproveitados durante o curso.

1 Polinômios interpoladores

Diremos que um polinômio p de uma variável real tem grau n se p for a soma de termos $a_k x^k$ com $k \leq n$ (mesmo que a_n seja zero). O conjunto de polinômios de grau n , munido da soma e da multiplicação por número real habituais, é um espaço vetorial, que denotaremos por \mathcal{P}_n .

Começamos pela seguinte proposição.

Proposição 1. *Para todo $n \geq 0$ vale: todo polinômio de grau n que se anula em $n + 1$ pontos distintos é nulo.*

Demonstração. É imediato que todo polinômio de grau 0 que se anula em 1 ponto é nulo. Portanto a afirmação é válida para $n = 0$. Agora vamos provar que se $n \geq 1$ e a afirmação é válida para $n - 1$ então ela tem que ser válida para n (método de indução). Ou seja, vamos admitir, por hipótese de indução, que todo polinômio de grau $n - 1$ que se anula em n pontos distintos é necessariamente nulo.

Tomemos um polinômio p de grau n que se anula em $n + 1$ pontos distintos. Pelo Teorema de Rolle, entre dois pontos de anulamento de p existe um ponto crítico de p , isto é, um ponto de anulamento de p' . Então p' se anula, necessariamente, em n pontos. Pela hipótese de indução, p' é nulo. Logo p é constante. Se essa constante é não nula, p não teria nenhum ponto de anulamento. Então p tem que ser nulo. \square

Teorema 1. *Dados x_0, x_1, \dots, x_n pontos da reta real distintos entre si e uma função f definida nesses pontos existe um único polinômio p de grau n que realiza a interpolação desses dados, isto é, tal que $p(x_i) = f(x_i)$, para todo $i = 0, 1, \dots, n$.*

Demonstração. A unicidade da interpolação é imediata da proposição anterior. Se p e q realizam a mesma interpolação, então $p - q$ é um polinômio de grau n que se anula nos $n + 1$ pontos x_0, x_1, \dots, x_n . Pela proposição, $p - q$ é nulo, isto é, $p = q$.

A questão da existência pode ser demonstrada com os recursos da álgebra linear. Definimos a aplicação linear $T : \mathcal{P}_n \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$ que toma um polinômio $p \in \mathcal{P}_n$ e leva em $T(p) = (p(x_0), p(x_1), \dots, p(x_n)) \in \mathbb{R}^{n+1}$. A proposição anterior mostra que essa transformação é injetiva, pois diz que se $T(p) = 0$ então $p = 0$. Como domínio e contradomínio têm a mesma dimensão, segue que T é sobrejetiva. Ou seja, dado qualquer vetor $(f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)) \in \mathbb{R}^{n+1}$ existe p tal que $T(p)$ é igual a esse vetor. Ou seja, p interpola os valores dados. \square

Vamos usar a notação

$$p_f[x_0, \dots, x_n]$$

para denotar o polinômio interpolador de grau n dos pontos x_0, x_1, \dots, x_n com valores dados pela função f . Note que o grau do polinômio está implícito no número de pontos entre os colchetes (um a menos do que o número de pontos). Quando quisermos explicitar a dependência em x , escreveremos

$$p_f[x_0, \dots, x_n](x).$$

Observe que a ordem dos pontos não importa. Por exemplo, $p_f[x_0, x_1, x_2] = p_f[x_1, x_0, x_2] = p_f[x_2, x_0, x_1]$ etc.

Uma consequência do teorema de existência e unicidade da interpolação é a seguinte proposição.

Proposição 2. *Suponha que p tem grau n e se anula nos n pontos distintos w_1, \dots, w_n . Então existe $a \in \mathbb{R}$ tal que*

$$p(x) = a(x - w_1)(x - w_2) \cdots (x - w_n).$$

Demonstração. Tome um ponto u qualquer, diferente de qualquer dos w_i 's, e seja $q(x) = a(x - w_1)(x - w_2) \cdots (x - w_n)$, com

$$a = \frac{p(u)}{(u - w_1) \cdots (u - w_n)}.$$

Veja que q tem grau n e interpola os $n + 1$ pontos u, w_1, \dots, w_n com valores $p(u), 0, 0, \dots, 0$. Mas p também tem grau n e interpola os mesmos dados. Logo $p = q$, pela unicidade do polinômio interpolador. \square

2 Métodos

Discutiremos, de forma heterogênea, três métodos para determinar $p_f[x_0, x_1, \dots, x_n]$. Todos eles se baseiam em escrever o polinômio como combinação linear de elementos de uma determinada base de \mathcal{P}_n .

Por exemplo, se escrevermos

$$p_f[x_0, x_1, \dots, x_n](x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

então é porque estamos adotando a base $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$. Os $n + 1$ coeficientes a_0, a_1, \dots, a_n são as incógnitas das $n + 1$ equações $p(x_i) = f(x_i)$. O custo de se resolver esse sistema é da ordem de n^3 .

Os outros dois métodos permitem chegar ao polinômio interpolador com ordem de n^2 operações. Eles usam outras bases de \mathcal{P}_n .

O segundo método, chamado de *interpolação de Lagrange*, usa a base $\{L_0, L_1, \dots, L_n\}$, onde cada polinômio L_j tem grau n e satisfaz $L_j(x_j) = 1$ e $L_j(x_i) = 0$ se $i \neq j$. Essa propriedade determina univocamente L_j , porque se trata de uma interpolação de grau n para $n + 1$ pontos. De fato, L_j é dado explicitamente por

$$L_j(x) = \prod_{i \neq j} \frac{x - x_i}{x_j - x_i}.$$

Com isso, se

$$p(x) = \alpha_0 L_0(x) + \dots + \alpha_n L_n(x)$$

então

$$p(x_i) = \alpha_i L_i(x_i) = \alpha_i,$$

de forma que, para se resolver o problema da interpolação, basta tomar $\alpha_i = f(x_i)$. Em conclusão, na base de polinômios de Lagrange, os coeficientes da combinação linear que forma o polinômio interpolador são os próprios valores de f .

O terceiro método é a *forma de Newton*, que usa a base $\{1, (x - x_0), (x - x_0)(x - x_1), (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2), \dots, (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})\}$. É fácil ver que se trata de uma base porque o grau (exato) dos polinômios aumenta de um em um (fica para o leitor mostrar que isso já é suficiente para garantir que é uma base).

Suponha que a combinação linear

$$p(x) = \beta_0 + \beta_1(x - x_0) + \beta_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + \beta_n(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$$

seja o polinômio interpolador procurado, isto é,

$$p = p_f[x_0, x_1, \dots, x_n].$$

Como p é interpolador, então $p(x_0) = f(x_0)$. Como todos os termos de β_1 a β_n são nulos em x_0 , então $p(x_0) = \beta_0$. Em outras palavras, o polinômio interpolador de grau zero do ponto x_0 é

$$p_f[x_0] = \beta_0 = f(x_0).$$

Observe, de forma análoga, que de β_2 a β_n , todos os termos se anulam em x_0 e em x_1 . Como $p(x_0) = f(x_0)$ e $p(x_1) = f(x_1)$, segue que

$$p_f[x_0, x_1] = \beta_0 + \beta_1(x - x_0).$$

O mesmo raciocínio pode ser feito interrompendo-se a sequência de pontos em qualquer lugar. Conclui-se que

$$p_f[x_0, x_1, \dots, x_k](x) = \beta_0 + \beta_1(x - x_0) + \beta_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + \beta_k(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1}),$$

para qualquer $k = 1, \dots, n$.

Se aplicada essa conclusão a $k = n - 1$, tiramos a seguinte relação de recorrência:

$$p_f[x_0, x_1, \dots, x_n](x) = p_f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}](x) + \beta_n(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}). \quad (1)$$

Portanto essa base traz a vantagem de carregar explicitamente as interpolações parciais, na ordem em que são apresentados os pontos. Isso implica também em certa vantagem de acrescentar um ponto, pois será necessário apenas somar um termo ao final da interpolação já construída.

Até agora, no entanto, não esclarecemos como iremos calcular os coeficientes β_i . Isso será feito na próxima seção.

3 Diferenças divididas

Definiremos, sem ambiguidade,

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n]$$

como sendo o coeficiente de x^n no polinômio interpolador $p_f[x_0, x_1, \dots, x_n]$, que tem grau n (mesmo que seja zero).

Observe que na forma de Newton esse termo é facilmente reconhecível. Veja que apenas o último termo, $\beta_n(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$, tem grau n , e o único termo em x^n tem coeficiente β_n . Portanto

$$\beta_n = f[x_0, x_1, \dots, x_n].$$

Além disso, em vista do que foi observado em relação às interpolações parciais,

$$\beta_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k]$$

para todo $k = 0, 1, \dots, n$.

Vale a pena reescrever a fórmula de recorrência e o polinômio interpolador na forma de Newton, incorporando essa notação, para uso futuro:

$$p_f[x_0, x_1, \dots, x_n](x) = p_f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}](x) + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) \quad (2)$$

e

$$\begin{aligned} p_f[x_0, x_1, \dots, x_n](x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) \\ &+ f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}). \end{aligned} \quad (3)$$

Uma observação importante é que a ordem dos pontos não importa, uma vez que essa ordem já não importa para a definição de $p_f[x_0, x_1, \dots, x_n]$. Por exemplo, se acrescentarmos um ponto a poderemos tanto falar de $f[a, x_0, x_1, \dots, x_n]$ como de $f[x_0, x_1, \dots, x_n, a]$, pois trata-se do mesmo valor.

No fundo, apenas demos um nome mais pomposo para os β_i 's, mas ainda falta saber calculá-los. Começemos pelos casos mais simples, para $i = 0$ e $i = 1$.

O polinômio interpolador de x_0 é

$$p_f[x_0](x) = f(x_0)x^0.$$

Como o coeficiente de x^0 é $f(x_0)$, então $f[x_0] = f(x_0)$, pela definição de $f[x_0]$ (ver acima). Quando acrescentamos o ponto x_1 passamos a ter o polinômio interpolador

$$p_f[x_0, x_1](x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0).$$

Ora, sendo esse polinômio de grau 1, $f[x_0, x_1]$ nada mais é do que o coeficiente angular de seu gráfico. Portanto

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

Para além da interpretação dada pela expressão intermediária, a última expressão sugere a possibilidade de obtermos $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ por recorrência, aumentando um a um o número de pontos. De fato, essa fórmula da segunda linha pode ser generalizada. Por exemplo,

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0}.$$

A fórmula geral de recorrência é dada pela seguinte proposição.

Proposição 3. Para $k \geq 2$, vale

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}. \quad (4)$$

Demonstração. A prova é feita subtraindo-se $p_f[x_0, \dots, x_{k-1}]$ de $p_f[x_1, \dots, x_k]$ de dois jeitos diferentes, para colocá-los em igualdade. Os dois jeitos são: (i) olhar esses dois polinômios a partir de $p_f[x_0, \dots, x_k]$, em que se retira um dos pontos extremos, x_k ou x_0 , respectivamente; (ii) olhar esses dois polinômios a partir de $p_f[x_1, \dots, x_{k-1}]$, em que se acrescenta um ponto, x_0 ou x_k , respectivamente.

Ou seja, trabalharemos com as seguintes expressões, todas derivadas de (2):

$$p_f[x_0, \dots, x_{k-1}](x) = p_f[x_0, \dots, x_k](x) - f[x_0, \dots, x_k](x - x_0) \cdots (x - x_{k-1}) \quad (5)$$

$$p_f[x_0, \dots, x_{k-1}](x) = p_f[x_1, \dots, x_{k-1}](x) + f[x_0, \dots, x_{k-1}](x - x_1) \cdots (x - x_{k-1}) \quad (6)$$

$$p_f[x_1, \dots, x_k](x) = p_f[x_0, \dots, x_k](x) - f[x_0, \dots, x_k](x - x_1) \cdots (x - x_k) \quad (7)$$

$$p_f[x_1, \dots, x_k](x) = p_f[x_1, \dots, x_{k-1}](x) + f[x_1, \dots, x_k](x - x_1) \cdots (x - x_{k-1}) \quad (8)$$

Fazendo (7) menos (5), e depois (8) menos (6), obtemos duas expressões para $p_f[x_1, \dots, x_k](x) - p_f[x_0, \dots, x_{k-1}](x)$:

$$(x_k - x_0)f[x_0, \dots, x_k](x - x_1) \cdots (x - x_{k-1}) \quad (9)$$

e

$$(f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}])(x - x_1) \cdots (x - x_{k-1}). \quad (10)$$

Igualando-se (9) com (10) para qualquer x diferente de x_1, \dots, x_{k-1} , segue (4). \square

A expressão (4) explica por que esses coeficientes da forma de Newton são chamados de *diferenças divididas*. Seus valores podem ser obtidos a partir dos valores $f(x_0), \dots, f(x_n)$, por recorrência. A montagem de uma tabela facilita esse trabalho. Por exemplo, para uma interpolação de grau 4, com pontos x_0, x_1, x_2, x_3, x_4 , basta preencher a seguinte tabela, da esquerda para a direita.

x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_1]$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$	
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$	
		$f[x_3, x_4]$		
x_4	$f[x_4]$			

4 Diferenças divididas e derivadas: uma generalização do TVM

Observemos que, pelo Teorema do Valor Médio,

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

para algum $c \in [x_0, x_1]$. Essa relação entre a diferença dividida de primeira ordem e uma derivada se generaliza para qualquer ordem, desde que a função f seja suficientemente diferenciável (hipótese que assumiremos por default).

Seja $[a, b]$ o menor intervalo que contém os pontos x_0, x_1, \dots, x_n (se a ordem de apresentação dos pontos respeitar a ordem da reta, então $[a, b] = [x_0, x_n]$). Esse intervalo é conhecido como a *envoltória convexa* dos pontos x_0, x_1, \dots, x_n . Admitiremos que f está definida e que é n vezes diferenciável em $[a, b]$.

Mostraremos que existe c em $[a, b]$ tal que

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(c)}{n!}. \quad (11)$$

Tome a *função erro* $E(x)$ da interpolação, que é a diferença entre a função $f(x)$ e o polinômio interpolador:

$$E(x) = f(x) - p_f[x_0, x_1, \dots, x_n](x).$$

Essa função se anula nos $n + 1$ nós da interpolação. Usando o Teorema de Rolle de forma recursiva, concluímos que $E^{(n)}(x)$ tem (pelo menos) um ponto de anulamento c em $[a, b]$. Sendo o polinômio interpolador de grau n , com o coeficiente de x^n igual a $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$, isto implica que

$$E^{(n)}(c) = f^{(n)}(c) - n!f[x_0, x_1, \dots, x_n] = 0,$$

ou seja, a fórmula (11).

Veja que isso permite relacionar polinômios interpoladores com polinômios de Taylor. Pois, aplicando (11), podemos escrever $p_f[x_0, x_1, \dots, x_n](x)$ como

$$f(x_0) + f'(c_1)(x - x_0) + \frac{f''(c_2)}{2!}(x - x_0)(x - x_1) + \dots + \frac{f^{(n)}(c_n)}{n!}(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}).$$

Quando todos os pontos tendem a x_0 , essa expressão converge para

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n,$$

que é o polinômio de Taylor de f no ponto x_0 .

5 Estimativa de erro da interpolação polinomial

É a relação entre diferenças divididas e derivadas que permite estimar o erro da interpolação polinomial, em cada ponto. Espera-se que uma tal estimativa dê erro nulo para os pontos interpolados, e é exatamente o que teremos.

Como mais acima, definimos a função erro

$$E(x) = f(x) - p_f[x_0, \dots, x_n](x).$$

Para estimar $|E(x)|$, escreveremos $f(x)$ como um polinômio interpolador em que acrescentamos o próprio ponto x :

$$f(x) = p_f[x_0, \dots, x_n, x](x).$$

Usando (2) e essa forma de escrever $f(x)$, ficamos com

$$E(x) = f[x_0, \dots, x_n, x](x - x_0) \cdots (x - x_n).$$

Agora usamos (11), substituindo a diferença dividida. Existe c (que depende de x) tal que

$$E(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x - x_0) \cdots (x - x_n).$$

Essa fórmula é exata mas é impraticável, porque não sabemos como c é obtido de x . Mas ela implica que

$$|E(x)| \leq \frac{\max |f^{(n+1)}|}{(n+1)!} |(x-x_0) \cdots (x-x_n)|, \quad (12)$$

em que $\max |f^{(n+1)}|$ é tomado na envoltória convexa dos pontos x_0, \dots, x_n .

6 Aplicações à integração

Uma aplicação da interpolação é para a aproximação de integrais. Dentro de um certo intervalo $[a, b]$ onde está definida a função f que pretendemos integrar, escolhemos um conjunto de pontos distintos x_0, \dots, x_n , trocamos f pelo polinômio interpolador $p_f[x_0, \dots, x_n]$, integramos o polinômio interpolador em $[a, b]$ e essa é a aproximação da integral que obtemos. O erro

$$\epsilon = \int_a^b f(x) dx - \int_a^b p_f[x_0, \dots, x_n](x) dx$$

cometido nesse procedimento é estimado assim:

$$\begin{aligned} |\epsilon| &= \left| \int_a^b (f(x) - p_f[x_0, \dots, x_n](x)) dx \right| \\ &\leq \int_a^b |f(x) - p_f[x_0, \dots, x_n](x)| dx \\ &\leq \frac{\max |f^{(n+1)}|}{(n+1)!} \int_a^b |(x-x_0) \cdots (x-x_n)| dx \end{aligned} \quad (13)$$

Sigamos esse programa em duas situações, que logo adiante serão exploradas pelos métodos dos Trapézios e de Simpson. Na primeira, escolhemos como pontos de interpolação os dois extremos do intervalo, para obter um polinômio de grau 1. Na segunda, escolhemos os dois pontos extremos mais o ponto médio, para obter um polinômio de grau 2. Por conveniência (que pode ser justificada por uma mudança de variáveis), usamos o intervalo $[0, h]$ no primeiro caso e o intervalo $[-h, h]$ no segundo caso (para que o ponto médio esteja na origem).

6.1 Integração com interpolação de grau 1 em $[0, h]$

Neste caso, usamos $p_f[0, h]$ para aproximar a integral de f em $[0, h]$. Como

$$p_f[0, h](x) = f(0) + f[0, h]x,$$

temos

$$\begin{aligned}
 \int_0^h f(x)dx &\approx \int_0^h f(0) + f[0, h]x dx \\
 &= f(0)h + f[0, h]\frac{h^2}{2} \\
 &= f(0)h + \frac{f(h) - f(0)}{h} \cdot \frac{h^2}{2} \\
 &= \frac{h}{2} (f(0) + f(h)) .
 \end{aligned} \tag{14}$$

No caso em que $f(0)$ e $f(h)$ são positivos essa é exatamente a área do trapézio com vértices em $(0, 0)$, $(0, f(0))$, $(h, f(h))$, $(h, 0)$.

Vejam como fica a estimativa do erro cometido nesse procedimento. Usando (13) com $n = 1$, ficamos com

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f''|}{2} \int_0^h |x(x-h)| dx .$$

Como $|x(x-h)| = x(h-x)$ para $x \in [0, h]$, a integral vale $\frac{h^3}{6}$. Então

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f''|}{12} h^3 \tag{15}$$

6.2 Integração com interpolação de grau 2 em $[-h, h]$, usando o ponto médio

Assim como no caso anterior, começamos calculando o polinômio interpolador relativo aos pontos $-h, 0, h$. Para facilitar as contas, adotamos a ordem $0, -h, h$. Então

$$p_f[-h, 0, h](x) = p_f[0, -h, h](x) = f(0) + f[0, -h]x + f[0, -h, h]x(x+h) ,$$

lembrando que $f[0, -h, h] = f[-h, 0, h]$. Então

$$\begin{aligned}
 \int_{-h}^h f(x)dx &\approx \int_{-h}^h f(0) + f[0, -h]x + f[-h, 0, h]x(x+h)dx \\
 &= \int_{-h}^h f(0) + f[-h, 0, h]x^2 dx \\
 &= 2hf(0) + \frac{2h^3}{3}f[-h, 0, h] ,
 \end{aligned}$$

em que na primeira passagem usamos o fato de que x é uma função ímpar. Como

$$f[-h, 0, h] = \frac{f(-h) + f(h) - 2f(0)}{2h^2} ,$$

resulta

$$\int_{-h}^h f(x)dx \approx \frac{h}{3} (f(-h) + 4f(0) + f(h)) . \tag{16}$$

Para estimar o erro dessa aproximação usamos novamente (13). Neste caso, $n = 2$, que é o grau da interpolação. Então

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f'''|}{3!} \int_{-h}^h |(x+h)x(x-h)| dx.$$

O integrando é uma função par, e entre 0 e h vale $x(h^2 - x^2)$. Disso resulta

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f'''|}{12} h^4. \quad (17)$$

Isso representa uma ordem de grandeza a mais do que o erro cometido com a interpolação de grau 1. De fato, como veremos a seguir, podemos melhorar essa estimativa, ganhando ainda mais uma ordem de grandeza.

6.3 Uma estimativa de erro melhor para a interpolação de grau 2 usando o ponto médio

O ganho ao se trocar interpolação de grau 1 por interpolação de grau 2 (usando ponto médio) é maior do que o esperado por causa do seguinte fato.

Proposição 4. *Se g é cúbica em $[-h, h]$ então*

$$\int_{-h}^h g(x) dx = \int_{-h}^h p_g[-h, 0, h](x) dx.$$

Em outras palavras, funções cúbicas podem ser integradas com exatidão com o polinômio interpolador de grau 2, desde que seja usado o ponto médio.

Demonstração. Primeiro escolhemos um ponto a arbitrário em $[-h, h]$, distinto dos pontos $-h, 0$ e h , e tomamos o polinômio interpolador $p_g[-h, 0, h, a]$, que tem grau 3. Como esse polinômio coincide com g em quatro pontos distintos, e g também é um polinômio cúbico, pela unicidade de interpolação (Teorema 1) trata-se do mesmo polinômio:

$$g(x) = p_g[-h, 0, h, a](x).$$

Usando (2),

$$g(x) = p_g[-h, 0, h, a](x) = p_g[-h, 0, h](x) + g[-h, 0, h, a](x+h)x(x-h),$$

de onde concluímos que g e $p_g[-h, 0, h]$ diferem entre si apenas por um múltiplo da função $x(x^2 - h^2)$. Mas essa função é ímpar e sua integral em $[-h, h]$ é nula. Portanto g e $p_g[-h, 0, h]$ têm a mesma integral em $[-h, h]$. (Observe que $g[-h, 0, h, a]$ não depende de a , pois é a derivada terceira de g em algum ponto c , e a derivada terceira de g é constante. Ainda bem!) \square

Agora exploraremos a Proposição 4 para melhorar a estimativa de erro da integração com interpolação de grau 2. De novo tomemos um ponto $a \in (-h, h) \setminus \{0\}$. Então

$$\begin{aligned}\epsilon &= \int_{-h}^h f(x) - p_f[-h, 0, h](x) dx \\ &= \int_{-h}^h f(x) - p_f[-h, 0, h, a](x) dx,\end{aligned}$$

em que na primeira igualdade temos a definição do erro de integração ϵ e na segunda igualdade usamos a Proposição 4 com $g = p_f[-h, 0, h, a]$. Então, usando (13)

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f^{(4)}|}{4!} \int_{-h}^h |(x+h)x(x-h)(x-a)| dx.$$

A integral depende continuamente em a , com $a \in [-h, h]$, e a estimativa vale para qualquer $a \neq 0$ (com $|a| < h$). Então a estimativa vale para $a = 0$:

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f^{(4)}|}{4!} \int_{-h}^h |(x+h)x^2(x-h)| dx.$$

O integrando é uma função par e igual a $x^2(h^2 - x^2)$ em $[0, h]$. Disso resulta

$$|\epsilon| \leq \frac{\max |f^{(4)}|}{90} h^5. \quad (18)$$

É essa estimativa que usaremos no método de Simpson.

7 Métodos de integração por repetição

A ideia de interpolar uma função para obter uma estimativa de sua integral pode ser melhor aproveitada se for repetida ao longo de uma série de pequenos trechos. De forma geral, se f é uma função a valores reais definidas no intervalo $[a, b]$,

- (i) define-se uma partição $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$, em que o intervalo $[x_{i-1}, x_i]$ da partição é denominado a i -ésima *célula* ou *repetição*, $i = 1, \dots, n$;
- (ii) na célula i , escolhem-se alguns pontos, que definirão um polinômio interpolador p_i ;
- (iii) integra-se p_i ao longo da célula i , como aproximação da integral de f ao longo da mesma célula;
- (iv) somam-se os resultados da integração dos p_i 's, com i variando de 1 a n .

As etapas (ii) e (iii) foram desenvolvidas nas seções anteriores em dois casos: primeiro, quando são escolhidos os pontos extremos da célula, e o polinômio interpolador tem grau 1 – trata-se do Método dos Trapézios; segundo, quando são escolhidos os pontos extremos e o ponto médio, e

o polinômio interpolador tem grau 2 – trata-se do Método de Simpson. O que faremos aqui é desenvolver fórmulas para esses dois métodos em que n seja um parâmetro a escolher, supondo que todas as células tenham o mesmo tamanho. Além disso, obteremos as estimativas de erro nos dois casos.

7.1 Método dos Trapézios

Vamos supor que todas as n células têm mesmo tamanho, e chamemos de h esse tamanho. Evidentemente,

$$h = \frac{b - a}{n} .$$

Na célula i , trocamos f pelo interpolador $p_f[x_{i-1}, x_i]$, que tem integral (ao longo da célula) igual a

$$\frac{h}{2} (f(x_{i-1}) + f(x_i)) ,$$

segundo (14). A fórmula (14) pode ser usada na célula i após uma translação das coordenadas que leve x_{i-1} em 0 e x_i em h . Somando ao longo de todas as células, obtemos

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} (f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)) , \quad (19)$$

que é a conhecida *fórmula dos Trapézios*.

O erro que se comete nesse procedimento de integração pode ser estimado pela soma das estimativas de erro em cada célula. Usando (15), e agora utilizando o máximo de $|f''|$ em todo o intervalo $[a, b]$, ficamos com a estimativa

$$\frac{\max |f''|}{12} h^3 \cdot n .$$

Como $n = (b - a)/h$, a estimativa de erro resulta em

$$\frac{\max |f''|}{12} (b - a)h^2 . \quad (20)$$

Alternativamente, podemos colocar h em função de n , para obter

$$\frac{\max |f''|}{12} (b - a)^3 \frac{1}{n^2} . \quad (21)$$

7.2 Método de Simpson

De novo iremos supor que todas as células têm o mesmo tamanho, mas em cada célula $[x_{i-1}, x_i]$ usamos os pontos x_{i-1} , x_i e $\bar{x}_i = \frac{1}{2}(x_{i-1} + x_i)$ para determinar um polinômio interpolador de grau 2. Agora definimos h como sendo *metade do tamanho da célula*, de forma que podemos transladar coordenadas e usar os resultados acima calculados na célula $[-h, h]$.

De (16), obtemos a aproximação

$$\frac{h}{3} (f(x_{i-1}) + 4f(\bar{x}_i) + f(x_i))$$

para a integral de f na célula i . Somando de $i = 1$ até $i = n$ obtemos a *fórmula de Simpson*:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(\bar{x}_1) + 2f(x_1) + 4f(\bar{x}_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + 4f(\bar{x}_n) + f(x_n)) . \quad (22)$$

Para estimar o erro cometido nessa fórmula, usamos o erro estimado em cada célula, em (18).

Como

$$n = \frac{b-a}{2h}$$

a soma dos erros pode ser estimada por

$$\frac{\max |f^{(4)}|}{180} (b-a)h^4 \quad (23)$$

Alternativamente, deixando a estimativa apenas em função de n ,

$$\frac{\max |f^{(4)}|}{2880} (b-a)^5 \cdot \frac{1}{n^4} . \quad (24)$$

8 Complementos

8.1 Espaçamentos regulares e as diferenças simples

Agora consideraremos o caso em que os pontos da interpolação estão igualmente espaçados, isto é, existe $h > 0$ tal que

$$x_k = x_0 + hk ,$$

para qualquer $j = 0, 1, \dots, n$. Neste caso, poderíamos denotar a diferença dividida de maneira mais compacta, por exemplo

$$f_h^k[x_0] = f[x_0, x_0 + h, \dots, x_0 + hk] .$$

Neste caso, a relação de recorrência (4) fica assim expressa:

$$f_h^k[x_0] = \frac{f_h^{k-1}[x_1] - f_h^{k-1}[x_0]}{hk} . \quad (25)$$

Mais ainda, o denominador em cada etapa da recorrência sendo conhecido, pode-se definir outra grandeza, também por recorrência, sem porém a divisão. Essa grandeza será denominada *diferença simples* e será denotada por $\Delta f_h^k[x_0]$. Para $k = 0$ ela coincide, por definição, com a diferença dividida:

$$\Delta f_h^0[x_0] = f_h^0[x_0] = f[x_0] = f(x_0) .$$

Depois define-se, para $k \geq 1$,

$$\Delta f_h^k[x_0] = \Delta f_h^{k-1}[x_1] - \Delta f_h^{k-1}[x_0]. \quad (26)$$

Deixamos ao leitor a tarefa de mostrar que

$$f_h^k[x_0] = \frac{\Delta f_h^k[x_0]}{k!h^k}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} p_f[x_0, x_0 + h, \dots, x_0 + nh](x) &= p_f[x_0, x_0 + h, \dots, x_0 + (n-1)h](x) \\ &+ \frac{\Delta f_h^n[x_0]}{n!h^n} (x - x_0)(x - x_0 - h) \cdots (x - x_0 - (n-1)h) \end{aligned} \quad (27)$$

e

$$\begin{aligned} p_f[x_0, x_0 + h, \dots, x_0 + nh](x) &= \Delta f_h^0[x_0] + \frac{\Delta f_h^1[x_0]}{h} (x - x_0) \\ &+ \frac{\Delta f_h^2[x_0]}{2!h^2} (x - x_0)(x - x_0 - h) + \dots + \frac{\Delta f_h^n[x_0]}{n!h^n} (x - x_0) \cdots (x - x_0 - (n-1)h). \end{aligned} \quad (28)$$

8.2 Derivadas aproximadas por diferenças divididas simétricas

A discussão acima sugere que as derivadas de qualquer ordem de f podem ser aproximadas com diferenças divididas de pontos próximos a x_0 . Evidentemente é importante se analisar o erro dessa aproximação, em particular se a escolha desses pontos pode minimizá-lo.

Por exemplo, analisemos a derivada $f'(x_0)$, que gostaríamos de aproximar por uma diferença dividida. O natural é tomar

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

pois é esse quociente, que tomado ao limite, usualmente define a derivada de f em x_0 .

Para medir o erro cometido em relação a $f'(x_0)$, escrevemos a expansão de f até primeira ordem

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \mathcal{O}(h^2)$$

e a substituímos na fórmula da diferença dividida, obtendo

$$f[x_0, x_0 + h] = f'(x_0) + \mathcal{O}(h).$$

Acontece que essa não é a melhor maneira de se obter a aproximação de $f'(x_0)$. Podemos expandir f com os incrementos $+h$ e $-h$, desta vez até segunda ordem:

$$\begin{aligned} f(x_0 + h) &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ f(x_0 - h) &= f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Então

$$f[x_0 - h, x_0 + h] = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = f'(x_0) + \mathcal{O}(h^2).$$

Veja que foi importante expandir até segunda ordem, porque a simetria dos incrementos acaba cancelando os termos de potência par, em particular o termo em h^2 . Concluimos que $f[x_0 - h, x_0 + h]$ é uma aproximação mais eficiente que $f[x_0, x_0 + h]$ para $f'(x_0)$.

Da mesma forma pode-se mostrar que

$$f[x_0 - h, x_0, x_0 + h] = \frac{f''(x_0)}{2!} + \mathcal{O}(h^2),$$

$$f[x_0 - 3h, x_0 - h, x_0 + h, x_0 + 3h] = \frac{f'''(x_0)}{3!} + \mathcal{O}(h^2),$$

etc.

8.3 Interpolação de Hermite

8.4 Spline cúbico

8.5 Integrações à la Riemann: estimativas de erro

8.6 Estimativa de erro assintótica para Trapézios e Simpson

8.7 Integração gaussiana