Interpolação

Introdução

Suponhamos o conjunto de n pontos com duas coordenadas x e y, conhecidos por um processo qualquer (experimentos, cálculos numéricos, etc.)

$$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$$

onde

$$x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n$$

O problema da **interpolação** consiste em achar, para um determinado valor de x, $x \neq x_i$, um valor **razoável** (?) para y. Já a **extrapolação** consiste em estimar y para valores de x fora do intervalo $[x_0, x_n]$.

Determina-se uma função interpolante $y = f(x)$, a partir das coordenadas conhecidas.

Duas situações distintas:

1. Se o conjunto de coordenadas existente tem **alta precisão** -> pode-se exigir que a função interpolante satisfaça $y_i = f(x_i)$

2. Caso contrário, em geral faz-se $y_i \neq f(x_i)$, o que poderá inclusive **corrigir valores obtidos imprecisamente**.

Introdução

Conceitualmente, há duas etapas:

1) ajusta-se (uma vez) uma função interpolante para os pontos fornecidos;

2) avalia-se (tantas vezes quantas forem necessárias) a função interpolante para os valores de x desejados.

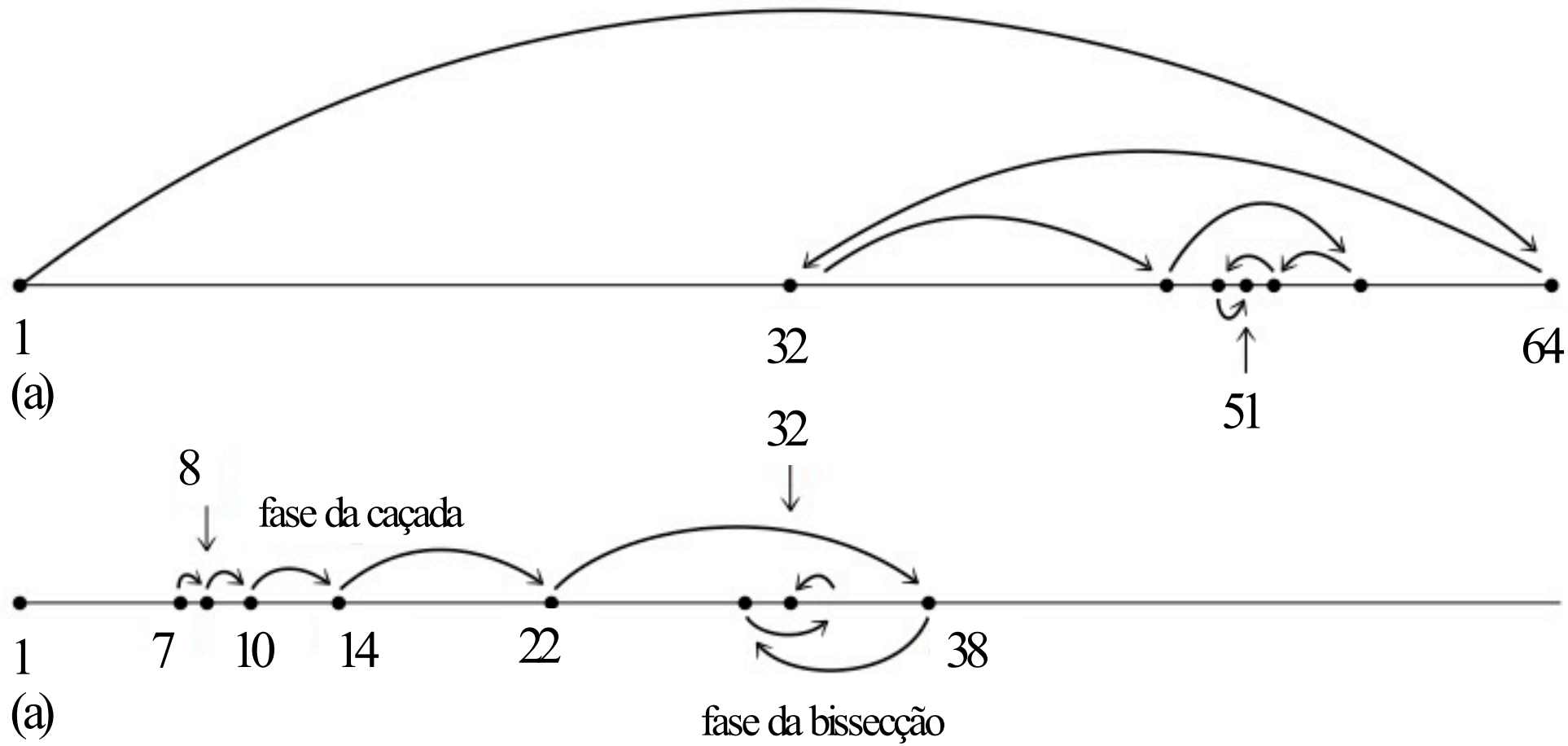
Ineficiente!

Na prática, em geral inicia-se com o valor tabulado mais próximo ao valor de x desejado e realiza-se uma **sequência de correções à medida que outros pontos próximos são considerados -> interpolação local**

O procedimento tipicamente toma $O(m^2)$ operações, onde $m << n$ é o **número de pontos efetivamente usados**.

Se tudo correr bem, a última correção será a menor de todas, e seu valor pode ser usado como uma **estimativa informal** (mas não rigorosa) do erro.

Passo preliminar: buscando em uma tabela ordenada



Interpolação linear

Dado um conjunto de pontos , $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$
a interpolação linear para x, $x_i < x < x_{i+1}$ é

$$y = (1 - f)y_i + f y_{i+1}$$

onde

$$f \equiv \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Conceitualmente, pode ser interpretada como uma **média ponderada** de y_i e y_{i+1} com peso f, onde f é a distância relativa de x com respeito a x_i.

Esta formulação para a interpolação linear ser-nos-á útil mais adiante, por pode ser **facilmente estendida para interpolação linear em duas dimensões** (dita bilinear) e dimensões maiores.

A interpolação acima é chamada ***piecewise***, pois apenas os extremos de um certo subintervalo são usados na interpolação. Como vimos acima, este tipo de função interpolante é contínua mas possui arestas, ou seja, não possui uma derivada primeira contínua nos pontos x_i.

Interpolação polinomial

Consiste em utilizar-se um polinômio de certo grau como função interpolante (interp. linear é caso particular)

Para um polinômio de ordem n, descrito por

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n$$

as incógnitas são os coeficientes $a_0, a_1, a_2, \ldots, a_n$.

Um **polinômio interpolante** pode ser utilizado quando os dados são **precisos o suficiente**, caso em que podemos impor que $P_n(x_i) = y_i$.

Podemos fazer uso de um bem-conhecido teorema da Álgebra:

> Existe **um e só um polinômio de grau *n* ou menor** que assume valores específicos para n+1 valores de x.

Este teorema assegura que existe **apenas um polinômio interpolante de ordem *n* ou menor, que passa por um conjunto de *n*+1 pontos**. Entretanto, nada garante que o polinômio interpolante seja uma boa aproximação para $x \neq x_i$

Polinômio interpolante

Existem vários métodos para se determinar o polinômio interpolante.

Estes métodos encaixam-se basicamente em duas categorias:

1) **Métodos para calcular os coeficientes do polinômio interpolante**

2) **Métodos para avaliar o polinômio em um ponto *x***

Importante: em geral os coeficientes podem ser determinados com muito menos precisão do que o valor do polinômio para uma certa abcissa!

Assim, os métodos da categoria 2 acima seve ser preferidos, a não ser que avaliar os coeficientes seja realmente necessário.

Um uso válido destes coeficientes poderia ser, por exemplo, avaliar simultâneamente o valor interpolado da função e de algumas das suas derivadas.

Sistemas de Equacões

Seja uma tabela de n+1 pontos, (x_i, y_i), $i = 0, ...,n$.

Para determinar os coeficientes do polinômio P_n(x) que passa por estes pontos, montamos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \ldots + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \ldots + a_nx_1^n = y_1 \\ \vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \ldots + a_nx_n^n = y_n \end{cases}$$

Para calcular os coeficientes, basta resolver o sistema linear abaixo:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^n \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Sistemas de Equacões

A matriz acima é conhecida como matriz de **Vandermonde**.

A existência de várias potências de x numa mesma linha desta matriz tende a tornar o sistema **desbalanceado**, ou seja, haverá um grande intervalo dinâmico entre a segunda e a última coluna de cada linha.

Exemplo: se $x_i = 0.1$ e $n = 10 \rightarrow x_i^{10} = 10^{-10}$.

Isso pode causar problemas sérios de arredondamento, que comprometerão a acurácia na determinação dos coeficientes.

Existem métodos específicos para a resolução deste tipo de sistema, que são descritos na seção 2.8 do Numerical Recipes.

Polinômios de Lagrange

Seja uma função tabelada em n+1 pontos: (x_i, y_i), $i = 0, ...,n$.

Sejam os polinômios de grau n definidos como

$$L_i(x) \equiv \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}$$

$L_i(x)$ são conhecidos com **polinômios de Lagrange**. Em uma forma mais compacta:

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

É fácil ver que

$$L_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \qquad \textbf{(1)}$$

Polinômios de Lagrange

Desta forma, podemos determinar o polinômio interpolador de y relativamente aos pontos x_i, $i = 1, ..., n$, utilizando os polinômios de Lagrange. da seguinte maneira

$$P_n(x) = L_0(x)y_0 + L_1(x)y_1 + ... + L_n(x)y_n = \sum_{i=0}^{n} L_i(x)f(x_i)$$

Como os polinômios de Lagrange satisfazem as condições (1), é evidente que

$$P_n(x_i) = y_i, i = 1, \ldots, n$$

Além disso, o grau de P_n é menor ou igual a n.

Segue-se, portanto, que o P_n é o **único polinômio interpolador** que passa pelos $n + 1$ pontos!

Polinômios de Lagrange

Observações importantes:

- Na prática, as fórmulas de Lagrange **não são usadas para determinar os coeficientes do polinômio interpolante**, devido à complexidade dos cálculos e do algoritmo necessário;

- Estas fórmulas são usadas diretamente para interpolar $y = P_n(x)$;

- O polinômio é o mesmo que aquele calculado por um sistema de equações, pois ele é único;

- Com dois *loops*, um para o cálculo dos L_i e outro para o cálculo de $P_n(x)$, obtém-se o valor de $y = \mathrm{P}_n(x)$ interpolado.

Falhas do Polinômio Interpolante

Não funciona indiscriminadamente para todas as funções e em todo o intervalo!

Particularmente problemático quando a tabela interpolada tem os pontos da abcissa igualmente espaçados

Exemplo clássico: **Fenômeno de Runge**

Consideremos a seguinte função geradora dos pontos da tabela

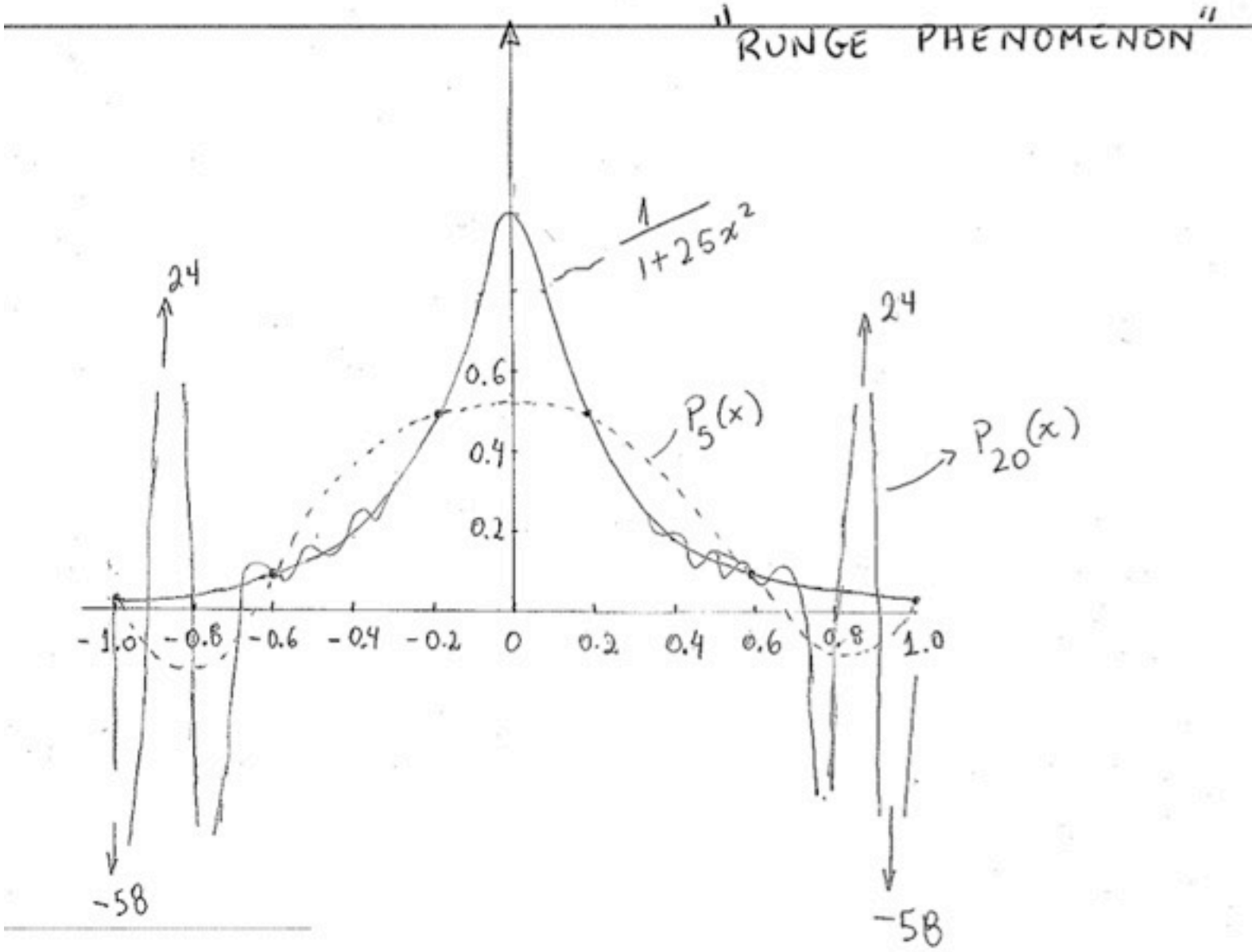
$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}$$

Vamos gerar aproximações a esta função a partir de conjuntos de abcissas igualmente espaçadas no intervalo [-1, 1]:

$$x_i = -1 + (i - 1)\frac{2}{n}, i = 1, \ldots, n$$

Falhas do Polinômio Interpolante

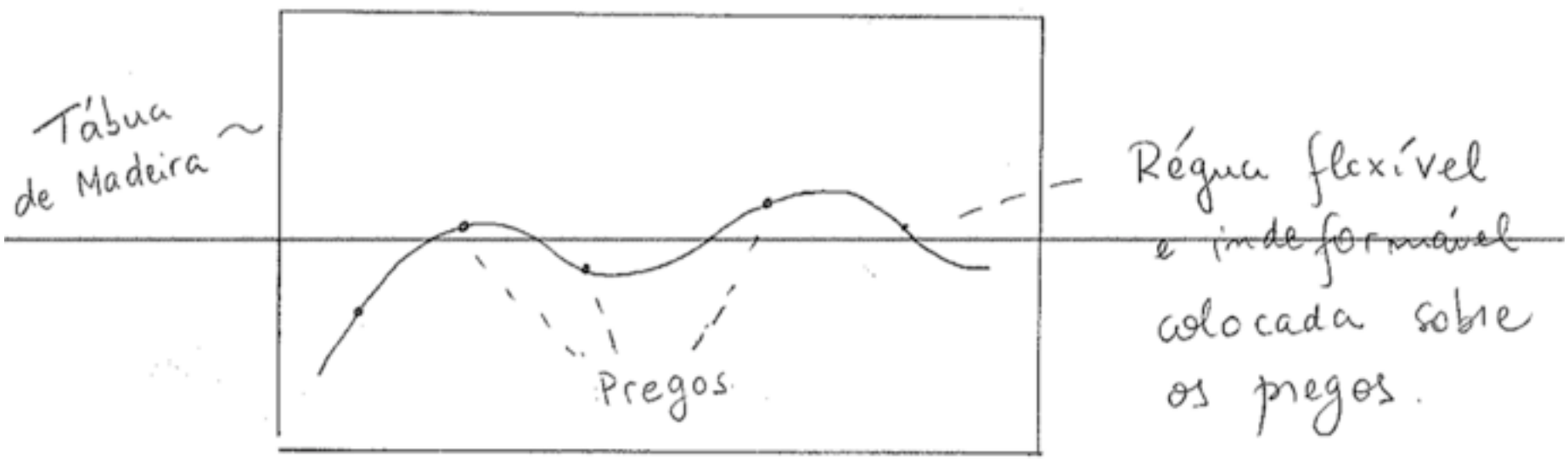
Resultado:



Interpolação por Spline Cúbica

Em matemática, uma **spline** é uma função polinomial suave que é **definida por partes** (piecewise) e possui uma **alta suavidade nos locais onde as diferentes partes se conectam** (conhecidas como nós).

O termo spline vem do técnica empregada por desenhistas para traçarem curvas suaves: imagine uma régua flexível e indeformável, que é presa na superfície de desenho em alguns pontos -> **forma de energia mínima armazenada**



Interpolação por Spline Cúbica

Splines cúbicas são frequentemente empregadas em interpolação com a finalidade de garantir a suavidade da função interpolante. **Solução muito eficiente para o fenômeno de Runge visto anteriormente.**

Matematicamente, o método consiste na definição de um **polinômio de 3º grau para cada par de pontos consecutivos**.

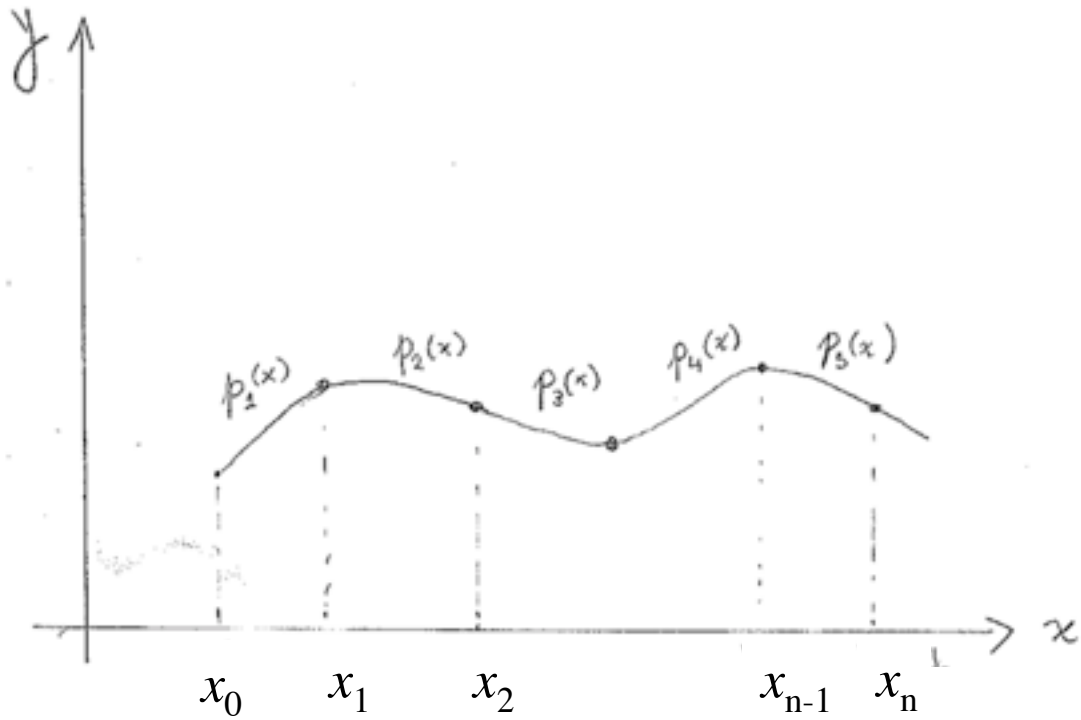
Ou seja, dados os pontos $y_i = y(x_i)$, $i = 0, \ldots, n$, define-se:

- $p_1(x)$: polinômio cúbico para o intervalo $[x_0, x_1]$;

- $p_2(x)$: polinômio cúbico para o intervalo $[x_1, x_2]$;

- e assim por diante.

Para n+1 pontos, temos assim n polinômios.



Interpolação por Spline Cúbica

Como construir a função spline? Basta considerar os requerimentos necessários:

1) Os polinômios devem ser tais que a função seja **contínua nos nós**.

2) Além disso, para que a **variação do raio de curvatura seja contínua** (ou seja, função suave), em cada nó a 2ª derivada do polinômio anterior deve ser igual à do polinômio posterior. O mesmo se dá com a 1ª derivada.

Raio de curvatura: $$\kappa = \frac{y''}{(1+y'^2)^{3/2}}$$

Equações	Condições
n	$p_i(x_i) = y_i$
n	$p_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$
$n-1$	$p_i''(x_i) = p_{i-1}''(x_i)$
$n-1$	$p_i'(x_i) = p_{i-1}'(x_i)$
$4n-2$	

Exemplo: função spline passando por 4 pontos.

Dedução das fórmulas de spline

Expressão para $p_i(x)$, que representa cada uma das partes da função spline

$$p_i(x) = \frac{\phi_i}{6h_i}(x_{i+1}-x)^3 + \frac{\phi_{i+1}}{6h_i}(x-x_i)^3 + \left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i\phi_i}{6}\right)(x_{i+1}-x) + \left(\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i\phi_{i+1}}{6}\right)(x-x_i)$$

Dedução das fórmulas de spline

$$\boxed{h_{i-1}\phi_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)\phi_i + h_i\phi_{i+1} = 6\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}\right)}$$

As equações acimas podem ser escritas em forma matricial da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & h_{n-3} & 2(h_{n-3} - h_{n-2}) & h_{n-2} & \\ & & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{n-2} \\ \phi_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 - e_0 \\ e_2 - e_1 \\ \vdots \\ e_{n-2} - e_{n-3} \\ e_{n-1} - e_{n-2} \end{bmatrix}$$

onde definiu-se

$$e_i = 6\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}\right)$$

Sistema n -1 x n - 1 com matriz tridiagonal.

Basta resolver este sistema para encontrar os coeficientes ϕ_i e então avaliar os polinômios.

Dedução das fórmulas de spline

$$\begin{bmatrix} 2(h_1+h_2) & h_2 & & & \\ h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & h_{n-2} & 2(h_{n-2}-h_{n-1}) & h_{n-1} & \\ & & h_{n-1} & 2(h_{n-1}+h_n) & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_2 - e_1 \\ e_3 - e_2 \\ \vdots \\ e_{n-1} - e_{n-2} \\ e_n - e_{n-1} \end{bmatrix}$$

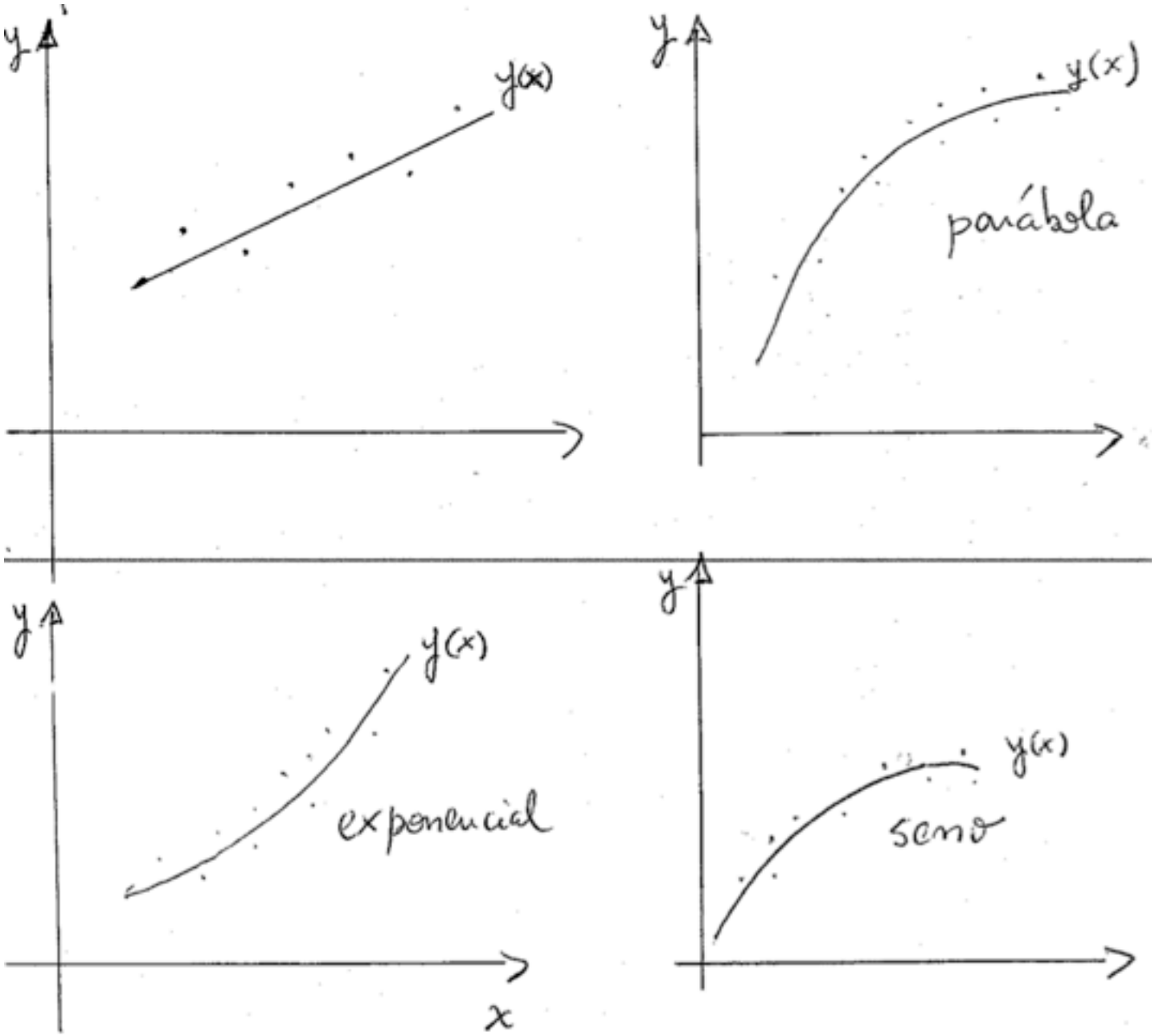
O sistema acima é resolvido de forma muito eficiente pela decomposição LU:

$$\begin{cases} u_1 = 2(h_0 + h_1) \\ l_j = \frac{h_{j-1}}{u_{j-1}}, \ j = 2, \ldots, n-1 \\ u_j = 2(h_{j-1} + h_j) - \frac{h_{j-1}^2}{u_{j-1}}, \ j = 2, \ldots, n-1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y_1 = e_1 - e_0 \\ y_j = (e_j - e_{j-1}) - l_j y_{j-1}, \ j = 2, \ldots, n-1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \phi_{n-1} = \frac{y_{n-1}}{u_{n-1}} \\ \phi_j = \frac{y_j - h_j \phi_{j+1}}{u_j}, \ j = n-2, \ldots, 1 \end{cases}$$

Modelagem de dados



Como aproximar uma função (modelo) a um conjunto de pontos?

Suponhamos um conjunto de m pontos (x_i, y_i), que desejamos **aproximar** por uma função $y = f(x)$, escrita como uma **combinação linear** de uma família de funções, f_i

$$y(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)_+ \ldots + c_n f_n(x)$$

onde os c_i, $i = 1, ..., n$ são os parâmetros livres do problema.

Note que:

$n \leq m$

Escolha da família de funções depende da natureza do problema.

A aproximação consiste em achar os parâmetros livres que minimizem uma **função de mérito.**

Critério dos Mínimos Quadrados

$$\sum_{i=1}^{n} r_i^2 = \sum_{i=1}^{n} [y(x_i) - y_i]^2$$

Critério dos Mínimos Quadrados (sem pesos)

Objetivo: aproximar a função geral

$$y(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)_+ \ldots + c_n f_n(x)$$

Com *n* parâmetros livres, a um conjunto de *m* pontos usando-se o critério dos mínimos quadrados como função de mérito.

Faremos isso minimizando a quantidade

$$\begin{aligned}\chi^2 &\equiv \sum_{i=1}^{m} [y(x_i) - y_i]^2 \\ &= \sum_{i=1}^{m} [c_1 f_1(x_i) + c_2 f_2(x_i) + \ldots + c_n f_n(x_i) - y_i]^2\end{aligned}$$

chamada de **qui-quadrado**.

Critério dos Mínimos Quadrados (sem pesos)

O qui-quadrado será mínimo quando as n derivadas parciais

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c_1}, \frac{\partial \chi^2}{\partial c_2}, \ldots, \frac{\partial \chi^2}{\partial c_n}$$

se anularem simultaneamente.

Vamos escrever de forma explícita a condição acima para o j-ésimo coeficiente

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c_j} = 2 \sum_{i=1}^{m} \left[(y(x_i) - y_i) \frac{\partial y(x_i)}{\partial c_j} \right] = 0$$

Mas

$$\frac{\partial y(x_i)}{\partial c_j} = f_j(x_i)$$

Portanto

$$\sum_{i=1}^{m} [(c_1 f_1(x_i) + c_2 f_2(x_i) + \ldots + c_n f_n(x_i) - y_i) f_j(x_i)] = 0$$

Critério dos Mínimos Quadrados (sem pesos)

Fazendo a multiplicação e separando os somatórios, temos a seguinte expressão para o j-ésimo coeficiente

$$c_1 \sum_{i=1}^{m} f_1(x_i) f_j(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^{m} f_2(x_i) f_j(x_i) + \ldots + c_n \sum_{i=1}^{m} f_n(x_i) f_j(x_i) = \sum_{i=1}^{m} f_j(x_i) y_i$$

que, vale lembrar, vem do fato de termos imposto que a derivada parcial do chi-quadrado com relação a c_j deve ser zero.

Considerando todos os coeficientes, temos o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} (f_1(x_i))^2 & \sum_{i=1}^{m} f_1(x_i) f_2(x_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{m} f_1(x_i) f_n(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} f_2(x_i) f_1(x_i) & \sum_{i=1}^{m} (f_2(x_i))^2 & \ldots & \sum_{i=1}^{m} f_2(x_i) f_n(x_i) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} f_n(x_i) f_1(x_i) & \sum_{i=1}^{m} f_n(x_i) f_2(x_i) & \ldots & \sum_{i=1}^{m} (f_n(x_i))^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} f_1(x_i) y_i \\ \sum_{i=1}^{m} f_2(x_i) y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} f_n(x_i) y_i \end{bmatrix}$$

Sistema padrão do problema dos mínimos quadrados.

Pode-se mostrar que tal sistema tem determinante não nulo, mas ele pode ser (e frequentemente o é) mal-condicionado.

Exemplo 1: ajuste de uma reta

Se a função a ser ajustada for uma reta, temos que

$$y(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)$$

Onde $f_1(x) = 1$ e $f_2(x) = x$.

Os coeficientes serão dados pelo sistema de ordem 2 abaixo

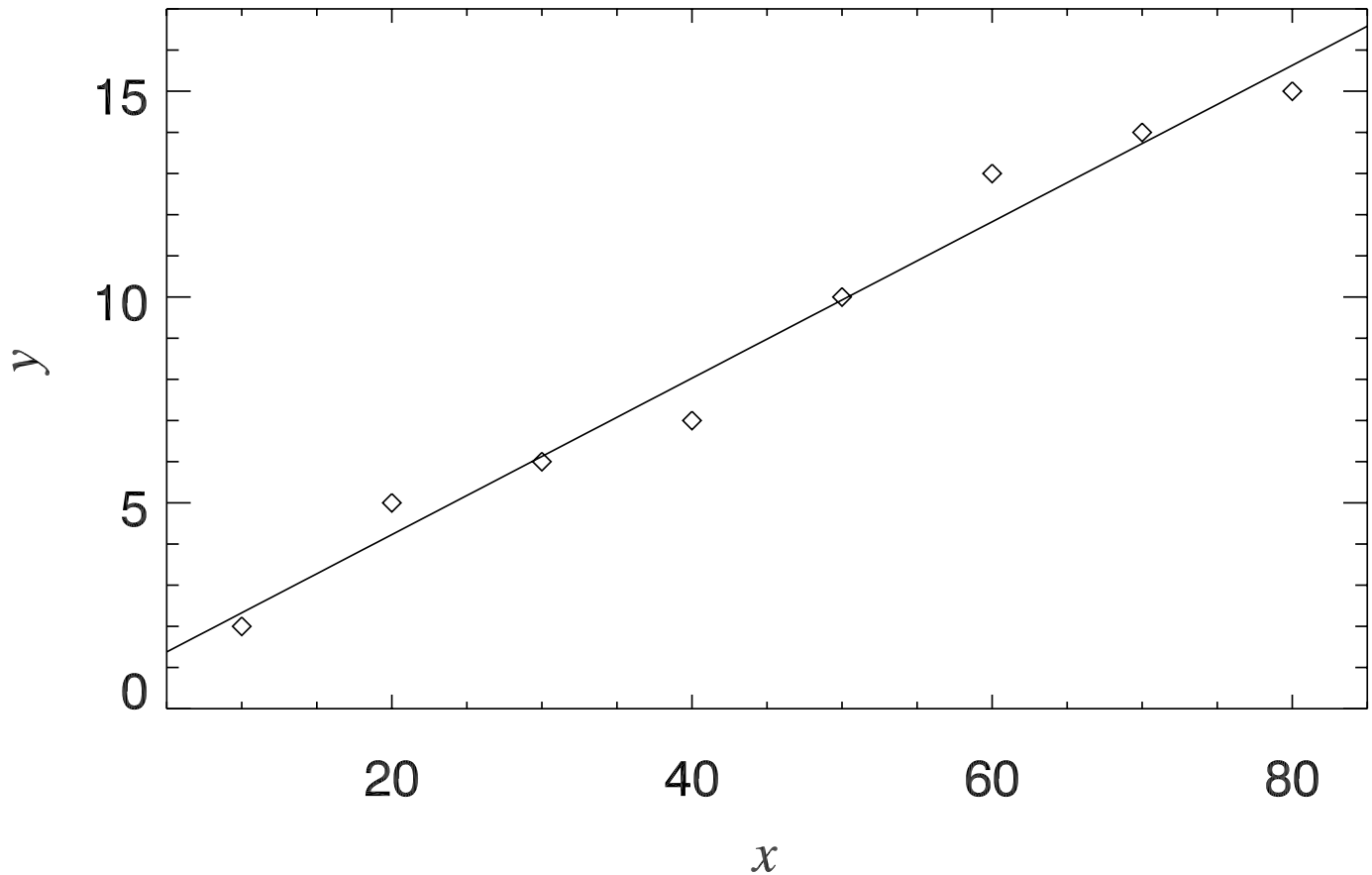
$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} 1 & \sum_{i=1}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{bmatrix}$$

Exemplo em sala: ajustar uma reta aos pontos

x	10	20	30	40	50	60	70	80
y	2	5	6	7	10	13	14	15

Exemplo 1: ajuste de uma reta

Resultado:



$c_1 = 0.428$

$c_2 = 0.190\,.$ $\qquad y(x) = 0.428 + 0.190x$

Exemplo 2: ajuste de uma exponencial

Como ajustar uma função não linear, por exemplo

$$y = ae^{-bx}$$

Algumas funções podem ser reescritas, resultando em uma função linear. No exemplo acima, basta tirar o log:

$$log(y) = log(a) - bx$$

Exemplo em sala

Preste muita atenção aos "não-parâmetros". Por exemplo, na função

$$y(x) = ae^{-bx+c}$$

os parâmetros a e c são indistinguíveis.

Critério dos Mínimos Quadrados (com pesos)

Vamos novamente considerar o caso em que estamos ajustando m pontos observacionais (x_i, y_i) com um modelo que tem n parâmetros ajustáveis.

Consideremos a questão:

> "*Para um determinado conjunto de parâmetros, qual a probabilidade de que aqueles pontos observacionais em particular tivessem ocorrido?*"

Se os valores y_i pertencem ao domínio dos reais, estão esta probabilidade é **nula**, a não ser que tivéssemos adicionado a seguinte frase

> "*mais ou menos algum* Δy*, pequeno e fixo*'".

Vamos sempre considerar tal frase implicitamente!

Se a probabilidade de se obter o conjunto de parâmetros for **pequena**, então podemos concluir que os parâmetros são "**improváveis**".

Ao contrário, intuitivamente sabemos que o conjunto de parâmetros não deveria ser improvável se a escolha tiver sido correta.

Critério dos Mínimos Quadrados (com pesos)

Para sermos mais quantitativos, suponhamos que cada ponto y_i tenha um **erro observacional** (ou de medida) que

1. seja independente das outras observações;
2. possua uma distribuição Gaussiana (normal) em torno do modelo verdadeiro $y(x)$, com um dado desvio padrão, σ_i

A probabilidade de, em um determinado experimento, se fazer uma medida de valor y_i com desvio padrão $\sigma_{i,}$ para um dado x_i

$$P_i(c_1, ..., c_n) = \frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right]^2\right)$$

onde o termo $1/\sigma_i\sqrt{2\pi}$ vem do fato de que a probabilidade deve ser normalizada entre 0 e 1.

Na expressão acima, $y(x_i)$ representa o valor verdadeiro, ou esperado, para a observação.

Critério dos Mínimos Quadrados (com pesos)

Qual a probabilidade de se obter um conjunto de *m* pontos observacionais?

R: produto das probabilidades de cada observação:

$$P(c_1, ..., c_n) = \prod_{i=1}^{m} P_i(c_1, ..., c_n) = \left[\prod_{i=1}^{m} \left(\frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}}\right)\right] \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left[\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right]^2\right)$$

onde o produto de exponenciais foi expresso como a soma dos argumentos.

Nesses produtos e somas quantidades como $1/\sigma_i^2$ atuam como pesos, expressando a **contribuição relativa** de cada ponto observacional para o resultado final:

quando menor for o erro maior a importância do dado para o resultado do ajuste.

Critério dos Mínimos Quadrados (com pesos)

$$P(c_1, ..., c_n) = \left[\prod_{i=1}^{m}\left(\frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}}\right)\right]\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left[\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right]^2\right)$$

Vamos assumir que os **dados observados são mais prováveis de serem obtidos a partir da distribuição verdadeira do que qualquer outra distribuição semelhante com diferentes parâmetros c_j**

Portanto, a probabilidade acima deve ser máxima!

Assim a estimativa de **máxima verossimilhança** (*maximum likehood*) para os c_j são os valores que **maximizam a probabilidade acima**.

Maximizar a probabilidade $P(c_1, ..., c_n)$ é equivalente a minimizar a soma do argumento da exponencial, ou seja, devemos minimizar o chi-quadrado, definido como

$$\boxed{\chi^2 = \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right]^2}$$

Critério dos Mínimos Quadrados (com pesos)

Lembrando que $y(x)$ é escrito de forma geral como

$$y(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)_+ \ldots + c_n f_n(x)$$

Temos

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{m} \left[\frac{y_i - c_1 f_1(x) - c_2 f_2(x) - \ldots - c_n f_n(x)}{\sigma_i} \right]^2$$

Assim, a tarefa de ajuste dos dados será a de encontrar valores c_j que **minimizam a soma ponderada** dos quadrados dos termos do chi-quadrado.

De forma geral, os valores do chi-quadrado são afetados por:

Flutuação nos valores medidos y_i.

Valores das incertezas σ_i^2: valores incorretos de σ_i^2 levarão a valores incorretos do chi-quadrado

A seleção da função analítica $y(x)$

Caso particular: ajuste de uma reta

$$y(x) = c_1 + c_2 x$$

Como feito na anteriormente, para encontrar os parâmetros c_1 e c_2 que fornecem o mínimo valor para qui-quadrado, igualamos a zero as derivadas parciais de qui-quadrado com respeito a cada um deles

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c_1} = \frac{\partial}{\partial c_1} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - c_1 - c_2 x_i)^2 \right] = -2 \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - c_1 - c_2 x_i) \right] = 0$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c_2} = \frac{\partial}{\partial c_2} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - c_1 - c_2 x_i)^2 \right] = -2 \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{x_i}{\sigma_i^2} (y_i - c_1 - c_2 x_i) \right] = 0$$

Caso particular: ajuste de uma reta

Essas equações podem ser rearranjadas como sistema de equações lineares

$$c_1 \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} + c_2 \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{\sigma_i^2}$$

$$c_1 \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{\sigma_i^2} + c_2 \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}$$

que é facilmente resolvido pela regra de Cramer.

As incertezas nos parâmetros são dadas por

$$\sigma_{c_1}^2 = \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$$

$$\sigma_{c_2}^2 = \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} \, .$$

Caso particular: ajuste de uma reta

Solução:

$$c_1 = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{m} \frac{y_i}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta}\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{x_i}{\sigma_i^2}\sum_{i=1}^{m}\frac{y_i}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^{m}\frac{x_i}{\sigma_i^2}\sum_{i=1}^{m}\frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}\right)$$

$$c_2 = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^{m} \frac{y_i}{\sigma_i^2} \\ \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta}\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{\sigma_i^2}\sum_{i=1}^{m}\frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^{m}\frac{x_i}{\sigma_i^2}\sum_{i=1}^{m}\frac{y_i}{\sigma_i^2}\right)$$

onde

$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \sum_{i=1}^{m} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \sum_{i=1}^{m}\frac{1}{\sigma_i^2}\sum_{i=1}^{m}\frac{x_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum_{i=1}^{m}\frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)^2 .$$

As incertezas nos parâmetros são dadas por

$$\sigma_{c_1}^2 = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$$

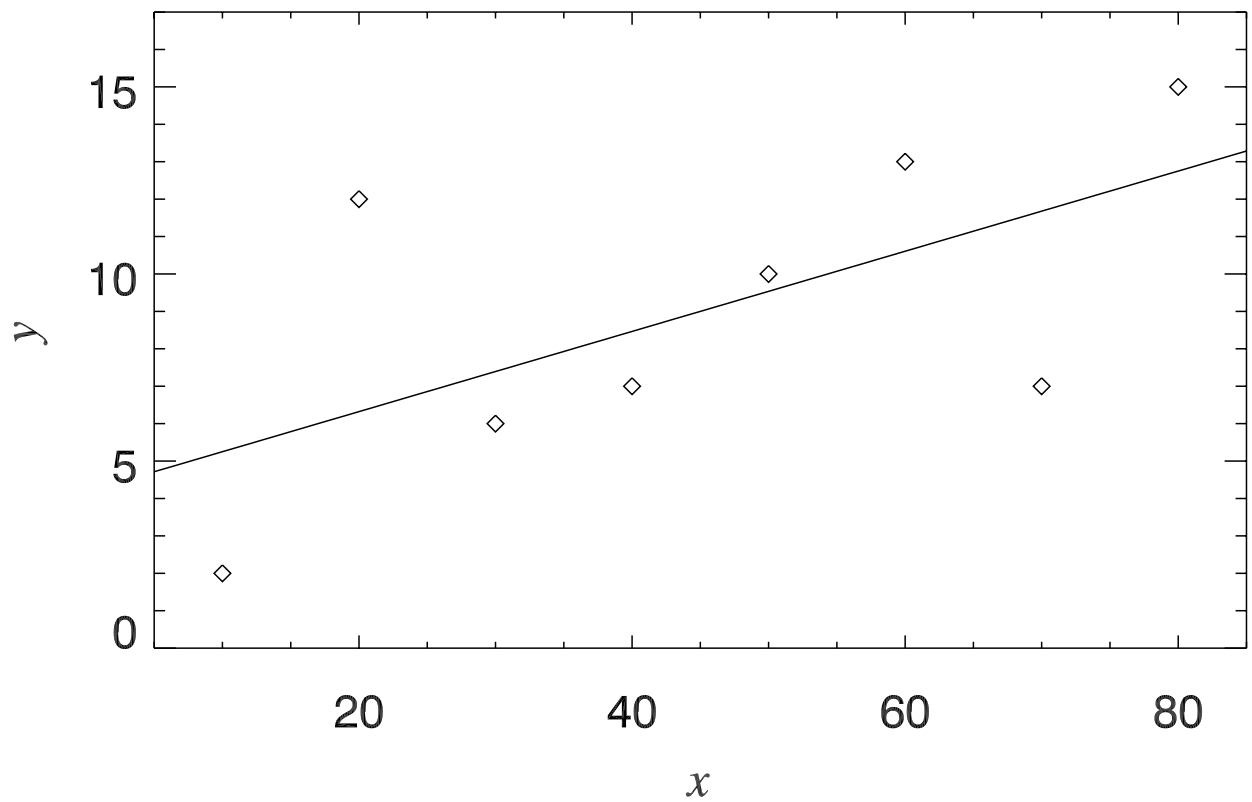
$$\sigma_{c_2}^2 = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\sigma_i^2} .$$

Exemplo

Vamos ajustar uma reta que passa pelos pontos ao lado.

x	10	20	30	40	50	60	70	80
y	2	12	6	7	10	13	7	15
σ_y	0.5	2.8	0.4	0.6	0.6	0.6	3.5	0.7

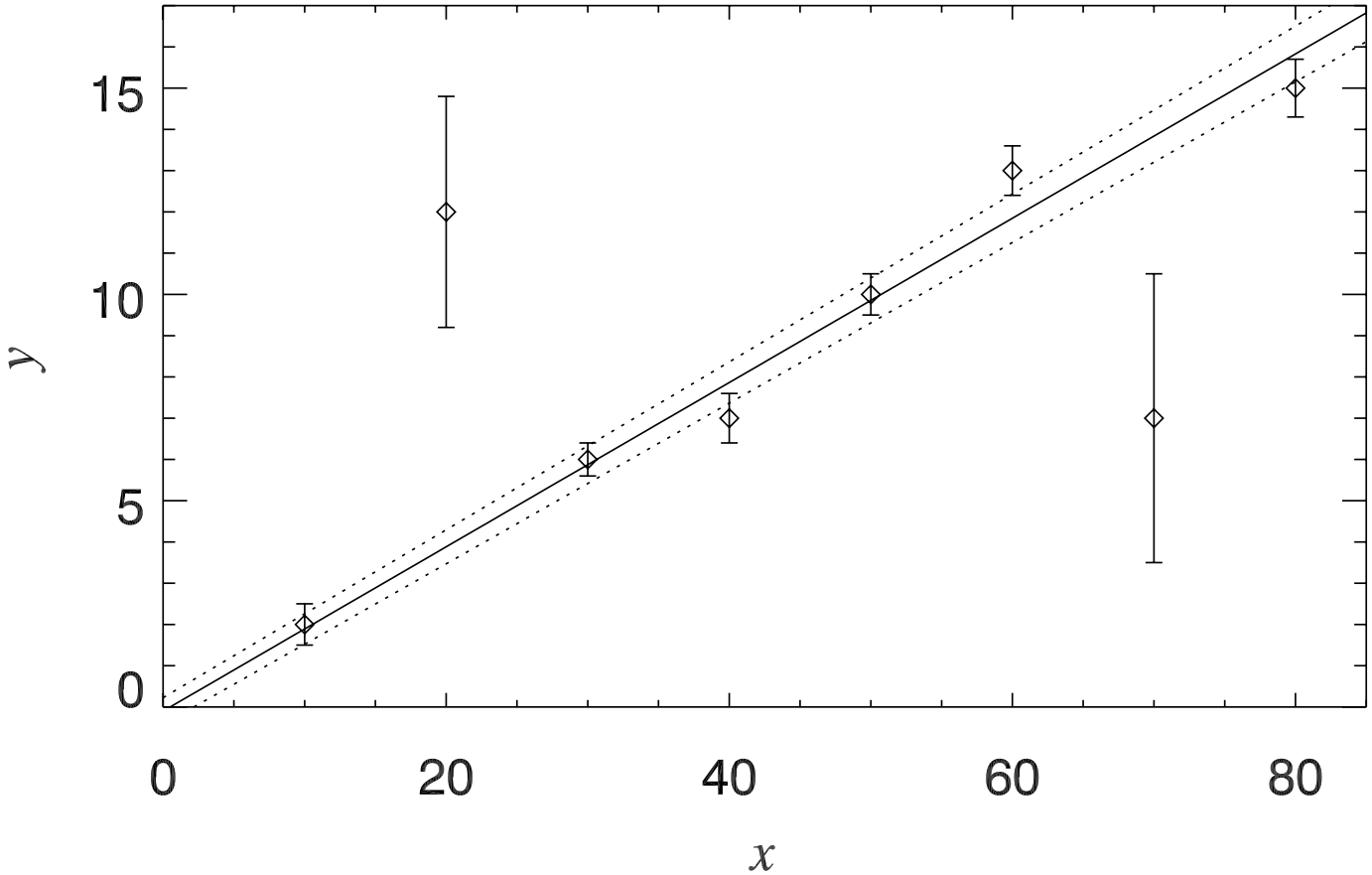
Note os dois *outliers*, eles estão fora da tendência geral indicada pelo outros pontos.
Se fizermos um ajuste sem considerar os erros, obtemos:



Exemplo

Fazendo o ajuste com os erros, obtemos:

x	10	20	30	40	50	60	70	80
y	2	12	6	7	10	13	7	15
σ_y	0.5	2.8	0.4	0.6	0.6	0.6	3.5	0.7



$$c_1 = -0.10 \pm 0.32$$

$$c_2 = 0.199 + / - 0.004$$

Integração

Fórmulas clássicas para abcissas igualmente espaçadas

Alguns dos métodos que usaremos originam-se das chamadas **fórmulas clássicas de quadratura**

Essas fórmulas procuravam aproximar integral a partir de alguns poucos pontos do integrando (muito úteis se as contas são feitas todas com lápis e papel!).

Hoje boa parte destas fórmulas são peças de museu, e têm pouca utilidade prática. Exceções são a **regra do trapézio** e a **regra de Simpson**.

Regra do trapézio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_1)\right] - \frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

onde $h = x_1 - x_0$ e ξ é um número no intervalo $[x_0, x_1]$.

O termo à direita permite estimar o erro cometido na estimativa da integral.

Como não se sabe o ξ para o qual se deve avaliar a segunda derivada, o termo é na verdade desconhecido e por esse motivo é frequentemente escrito como

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_1)\right] + \mathcal{O}(h^3 f'')$$

O símbolo $\mathcal{O}$ - **ordem** - é comumente empregado em matemática para se referir à ordem de grandeza de um termo em uma equação.

Regra de Simpson

A regra de Simpson usa três pontos do intervalo [x_0, x_2] separados por uma distância h:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = h\left[\frac{1}{3}f(x_0) + \frac{4}{3}f(x_1) + \frac{1}{3}f(x_2)\right] + \mathcal{O}(h^5 f^{(4)})$$

onde $f^{(4)}$ é a quarta derivada da função f calculada em um ponto desconhecido do intervalo.

Apesar de ser uma fórmula com 3 pontos, que deveria em princípio ser exata para polinômios de ordem 2, a regra de Simpson é exata para qualquer polinômio de ordem 3 (ou menos).

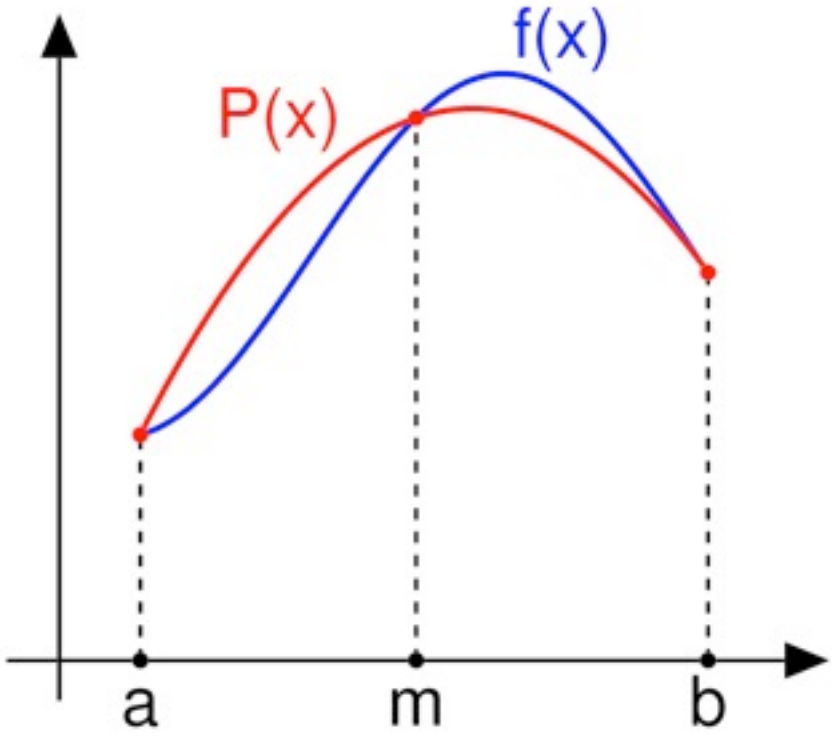
Isso é fácil de ser verificado pelo termo do erro, que depende da quarta derivada da função: a quarta derivada de um polinômio de ordem 3 ou menos é zero.

Exercício: determinar o termo do erro da regra de Simpson, usando o mesmo procedimento anterior.

Regra de Simpson

A Regra de Simpson é fácil de ser derivada, apesar de ser um pouco trabalhosa algebricamente

Matematicamente, ela se origina do ajuste da função $f(x)$ por um polinômio de ordem 2 $P(x)$.



Integração por retângulos

A forma mais simples de estimarmos a integral de uma função $f(x)$ no intervalo $[x_0, x_n]$ é aproximarmos a integral (área sob a curva) por soma de retângulos. Vamos dividir o intervalo em n subintervalos iguais. Seja $h = (x_n - x_0)/n$, temos

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

A integral será simplesmente

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)$$

Essa expressão pode facilmente ser generalizada para um conjunto de n pontos não igualmente espaçados:

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} h_i f(x_i)$$

onde $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Fórmula semi-aberta!

Integração por retângulos

Assim, o erro na integral por um retângulo é

$$I_i - R_i \approx \mathcal{O}(h^2)$$

Vamos agora estimar o erro para uma integral efetuada pela soma de *n* retângulos. Nesse caso o erro total será aproximadamente a soma dos erros cometidos em cada subintervalo

$$I - R \approx \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(nh^2)$$

Como $h = (x_n - x_0)/n$, temos que o erro total será

$$\boxed{I - R \approx \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{O}\left[\frac{(x_n - x_0)^2}{n}\right]}$$

Ou seja, o erro cai de forma linear à medida que aumentamos o número *n* de intervalos, e tende a 0 quando *n* vai a infinito.

Ordem do método: 1

Regra do ponto médio

Este método corresponde a uma melhoria simples e eficiente do método dos retângulos.

Consideremos um subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ e seu ponto médio

$$\bar{x}_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$$

Neste caso, a integral da função $f(x)$ neste subintervalo pode ser aproximada por

$$M_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = h_i f(\bar{x}_i)$$

e a integral no intervalo $[x_0, x_n]$ será simplesmente

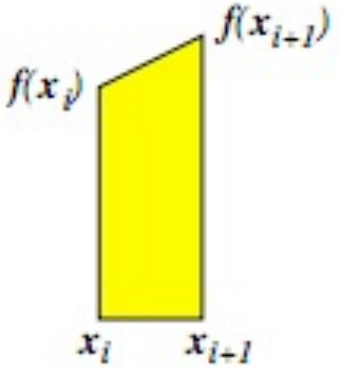
$$I \approx M = \sum_{i=1}^{n} M_i = \sum_{i=1}^{n} h_i f(\bar{x}_i)$$

Erro: $$\boxed{I_i = M_i + \frac{1}{24} h_i^3 f''(\bar{x}_i) + \ldots}$$

Regra do ponto médio é de ordem 2!

Regra do trapézio estendida

Vamos estender a regra dos trapézios para avaliarmos a integral de uma função calculada em n+1 pontos dentro do intervalo $[x_0, x_n]$. Inicialmente aplicamos a regra do trapézio ao subintervalo i



$$T_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_i) + f(x_{i+1})\right] - \frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

e em seguida somamos para todos os subintervalos

$$I \approx T = \sum_{i=1}^{n} T_i = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(n-1) + \frac{1}{2}f(n)\right] + \mathcal{O}\left(\frac{(x_n - x_0)^3}{12n^2}f''(\xi)\right)$$

ou, em uma forma mais compacta

$$I = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2}f(n)\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

Vemos que o método dos trápezios estendido tem a mesma ordem que o método do ponto médio.

Regra de simpson estendida

Em uma notação mais compacta:

$$S = \frac{h}{3}\left[f(x_1) + f(x_n) + 4\sum_{j=1}^{(n-2)/2} f(x_j) + 2\sum_{j=1}^{(n-2)/2} f(x_j)\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^4}\right)$$

Importantíssima propriedade da regra de Simpson:

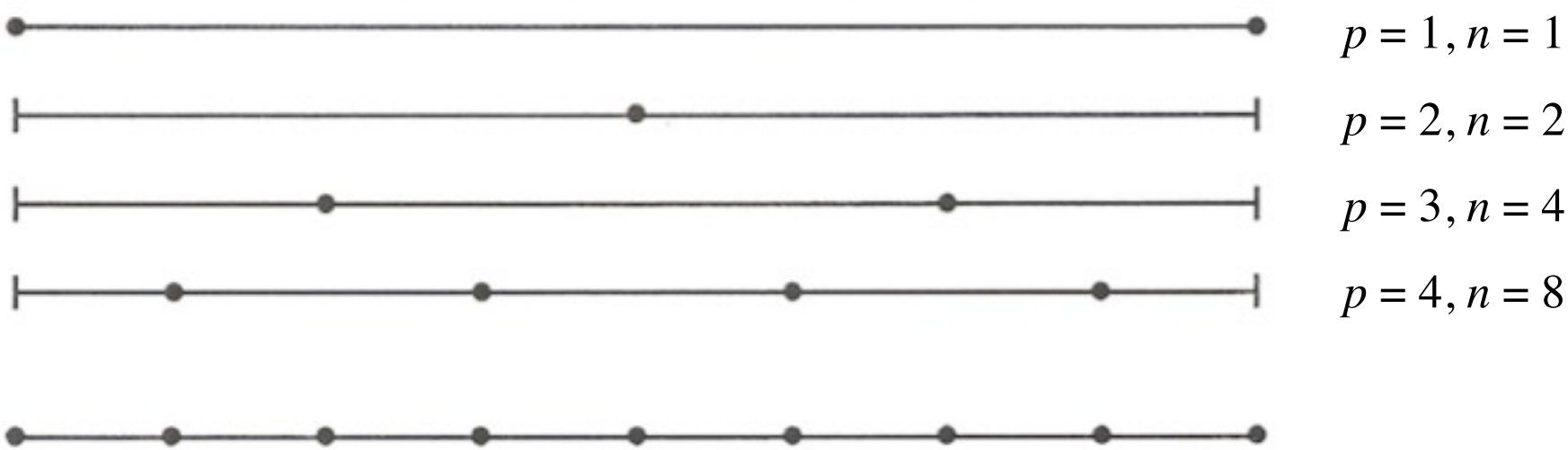
sendo de um método de ordem 4, a **precisão de integral aumenta com a quarta potência de *n***

Estimando o Erro: métodos com abcissas igual. espaçadas

Como não se pode estimar o erro da integral?

Lembrar: não conhecemos o valor correto do erro, apenas sua ordem

Resposta: refinar sucessivamente a solução aumentando o número de intervalos considerado (ou seja, diminuir h)



O procedimento acima permite **incorporar a informação das estimativas anteriores e calcular o integrando apenas para os pontos novos**, de forma a refinar a grade

Método de Romberg

Até aqui, vimos que o erro total para trapézios é da ordem de $\mathcal{O}(h^2)$. Um exame mais detalhado, considerando os termos de ordem superior da série de Taylor, fornece

$$I - T(h) = Ah^2 + Bh^4 + \ldots, \qquad \textbf{(1)}$$

onde A e B dependem de f e de suas derivadas mas não de h.

Vamos comparar esse resultado com o obtido na iteração anterior

$$I - T(2h) = A(2h)^2 + B(2h)^4 + \ldots \qquad \textbf{(2)}$$

Multiplicando (1) por 4 e subtraindo (2), obtemos

$$\begin{aligned} 4I - 4T(h) &= 4Ah^2 + 4Bh^4 + \ldots \\ -I + T(2h) &= -A(2h)^2 - 16Bh^4 + \ldots \\ \hline 3I - [4T(h) - T(2h)] &= -12Bh^4 + \ldots \\ I - [4T(h) - T(2h)]/3 &= -12Bh^4 + \ldots \\ &\equiv S(h) \end{aligned}$$

Método de Romberg

Esta aproximação

$$S(h) = \frac{4T(h) - T(2h)}{3} = T(h) + \frac{T(h) - T(2h)}{3}$$

difere do valor exato da integral por um termo $\mathcal{O}(h^4)$, enquanto $T(h)$ e $T(2h)$ diferem por um termo $\mathcal{O}(h^2)$

Desta forma, a combinação de estimativas consecutivas da integral pelo método dos trapézios **cancelar os termos de ordem inferior do erro**!

A ordem termo remanescente é a mesma que para a regra de Simpson.

Na verdade, pode-se mostrar que a equação acima é **exatamente** a regra de Simpson estendida.

Usar a **relação de recorrência acima** é a forma mais conveniente de se avaliar a regra de Simpson, usando-se, para isso, uma subrotina capaz de calcular, de forma geral, as sucessivas aproximações de uma integral pela regra do trapézio (ver exercício de programação 2).

Método de Romberg

Claramente, o processo empregado anteriormente pode ser repetido.

Partimos de duas estimativas sequenciais para a integral

$$I - S(h) = -4Bh^4 + Ch^6 \qquad \textbf{(3)}$$

e

$$I - S(2h) = -4B(2h)^4 + C(2h)^6 \qquad \textbf{(4)}$$

Fazendo 16 vezes (4) menos (1):

$$\begin{aligned} 16I - 16S(h) &= -4B16h^4 + 16Ch^6 + \ldots \\ -I - S(2h) &= 4B(2h)^4 - C(2h)^6 + \ldots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 15I - [16S(h) - S(2h)] &= -48Ch^6 + \ldots \\ I - \underbrace{[16S(h) - S(2h)]/15}_{\equiv R_2(h)} &= -(48/15)Ch^6 + \ldots . \end{aligned}$$

Método de Romberg

Obtemos, assim, uma estimativa da função que difere do valor exato por um termo $\mathcal{O}(h^6)$

$$R_2(h) = \frac{16S(h) - S(2h)}{15} = S(h) + \frac{S(h) - S(2h)}{15}$$

Ou seja, este procedimento remove os erros de ordem até $\mathcal{O}(h^4)$

É possível estender-se o **método de Romberg** para ordens superiores. De forma geral R_k é dado pela relação de recorrência

$$R_k(h) = R_{k-1}(h) + \frac{R_{k-1}(h) - R_{k-1}(2h)}{2^{2k} - 1}$$

que é a fórmula de Romberg com erro proporcional a h^{2k+1} ou $1/n^{2k}$.

O caso anterior é justamente a fórmula de Romberg para $k = 1$.

Exemplo 1

Calcular a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

usando o método do trapézio e de Romberg.

h	$T(h)$	$\lvert\epsilon\rvert$	$R_2(h)$	$\lvert\epsilon\rvert$	$R_3(h)$	$\lvert\epsilon\rvert$
1	0.68393972	0.06				
0,5	0.73137025	0.01	0.74718043	0.0004		
0,25	0.74298410	0.004	0.74685538	3×10^{-5}	0.74683371	1×10^{-5}
0,125	0.74586561	0.001	0.74682612	2×10^{-6}	0.74682417	4×10^{-8}

Tabela 8.1: Estimativa da integral $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ usando o método do trapézio, T, e as relações de recorrência Eq. (8.19), (R_2), e Eq. (8.22), R_3. Note que o $|\epsilon|$ mostrado corresponde ao erro real cometido, ou seja, à diferença entre a estimativa e o valor exato da integral.

Quadratura de Gauss

As fórmulas de integração desenvolvidas anteriormente (**Newton-Cotes**) são do tipo

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

com n +1 valores de w_i (peso ou *weight*) e n +1 valores $f(x_i)$.

Assim, se x_i forem igualmente espaçados, temos apenas n+1 parâmetros a serem determinados (w_i). Se x_i **não determinados a priori, temos 2*n*+2 parâmetros indeterminados**.

A Quadratura de Gauss também tem a forma descrita acima (ou seja, somatória de um conjunto de valores da função no intervalo, multiplicados por um peso) mas os pontos não são equidistantes, mas escolhidos **de forma que a soma ponderada forneça exatamente a integral se *f*(*x*) é um polinômio de grau 2*n*+1 ou menos**.

<u>Comparemos com Simpson...</u>

Antes de iniciar o desenvolvimento de Gauss, vamos estudar os **polinômios ortogonais de Legendre**.

Quadratura de Gauss-Legendre

Termo do erro:

$$\text{erro} = \int_{-1}^{1} \left[\sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{n} b_i c_j P_i(x) P_j(x) + b_{n+1} \sum_{i=0}^{n} c_i P_i(x) P_{n+1}(x) \right] dx$$

Agora a mágica matemática acontece...

No primeiro termo do integrando, todos os termos em que $i \neq j$ deverão desaparecer devido à **ortogonalidade**.

Já a integral do segundo termo é zero pois $i \neq n+1$

Dessa forma

$$\text{erro} = \int_{-1}^{1} \sum_{i=0}^{n} b_i c_i [P_i(x)]^2 dx$$

Uma maneira de fazer esta expressão ser zero é que todos os b_i, $i = 0,1, \ldots, n$ sejam zero.

Quadratura de Gauss-Legendre

Lembrando que:

$$\prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + \ldots + b_{n+1} P_{n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n+1} b_i P_i(x)$$

Nesta expressão, apenas o termo $n + 1$ é diferente de zero.
Portanto

$$\boxed{\prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = b_{n+1} P_{n+1}(x)}$$

Então, para que o erro seja zero, $\boldsymbol{x_i}$ **devem ser as raízes do polinômio** $\boldsymbol{P_{n+1}(x)}$**!**

Chegamos, assim ao que queríamos. Para uma dada ordem n da quadratura de Gauss-Legendre, temos que

1) calcular a função em $n + 1$ pontos dados pela raiz de $\boldsymbol{P_{n+1}(x)}$

2) calcular os pesos de cada $n + 1$ termo usando $w_i = \int_{-1}^{1} L_i(x)dx$

Raízes de $P_{n+1}(x)$ e pesos w_i

ordem	Raízes	Pesos
$n = 0$ (1 ponto)	0	2
$n = 1$ (2 pontos)	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
$n = 2$ (3 pontos)	0 $\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$8/9$ $5/9$
$n = 3$ (4 pontos)	$\pm\sqrt{(3-2\sqrt{6/5})/7}$ $\pm\sqrt{(3+2\sqrt{6/5})/7}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$ $\frac{18-\sqrt{30}}{36}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Existe uma rotina no Numerical Recipes (`gauleg.f`) que calcula as raízes x_i e os pesos w_i para um dado n.

(Ver wikipedia para a expressão das relações de recorrência)

Exemplo

Calcule

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$$

usando quadratura de Gauss-Legendre com três pontos.

Inicialmente devemos fazer uma mudança de variáveis, de forma que a integral esteja entre -1 e 1

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \int_0^2 \frac{\frac{1}{2}dx}{1+\left(\frac{x}{2}\right)^2} = \int_{-1}^1 \frac{\frac{1}{2}dx}{1+\left(\frac{x+1}{2}\right)^2} = \int_{-1}^1 \frac{2dx}{4+(x+1)^2}$$

Agora aplicamos a quadratura de Gauss-Legendre usando os pesos e raízes para $n = 2$

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

onde $\quad f(x) = \dfrac{2}{4+(x+1)^2}$

Exemplo

Temos

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \frac{5}{9}\frac{2}{4+\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}+1\right)^2} + \frac{8}{9}\frac{2}{4+(0+1)^2} + \frac{5}{9}\frac{2}{4+\left(\sqrt{\frac{3}{5}}+1\right)^2}$$
$$\approx 0.274293789 + 0.355555555 + 0.155417689$$
$$\approx 0.785267033$$

O valor correto da integral é $\pi/4 = 0.785398163$.

Vemos que com apenas 3 avaliações da integral **chegamos a um erro de apenas 0.00013.**

Para efeitos de comparação, se usarmos o método de Simpson para os mesmos 3 pontos obteremos o resultado 0.78333336, cujo erro é de 0.002.