

1. Publicação nº <i>INPE-2327-MD/017</i>	2. Versão	3. Data <i>Fev., 1982</i>	5. Distribuição <input type="checkbox"/> Interna <input checked="" type="checkbox"/> Externa <input type="checkbox"/> Restrita
4. Origem <i>DRH/DGA</i>	Programa <i>FRH</i>		
6. Palavras chaves - selecionadas pelo(s) autor(es) <i>MÉTODOS NUMÉRICOS DIRETOS DERIVAÇÃO</i> <i>DIFERENÇAS FINITAS INTEGRAÇÃO</i> <i>INTERPOLAÇÃO AJUSTE DE CURVAS</i>			
7. C.D.U.: <i>519,6;681,322</i>			
8. Título <i>FUNDAMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA PARA COMPUTADORES DIGITAIS VOLUME 2</i>		10. Páginas: <i>189</i>	
		11. Última página: <i>B.15</i>	
		12. Revisada por <i>Paulo</i> <i>José Carlos Barbosa</i>	
9. Autoria <i>Carlos José Zamlutti</i>		13. Autorizada por <i>Parada</i> <i>Nelson de Jesus Parada</i> <i>Diretor</i>	
Assinatura responsável			
14. Resumo/Notas <i>Apresenta-se um conjunto de métodos que, dentro da teoria das aproximações, são englobados dentro de um mesmo contexto, com a denominação de métodos diretos. A característica comum do conjunto é a possibilidade de determinar, a priori, o trabalho computacional envolvido para a obtenção de um resultado desejado, com uma precisão estipulada. Nos métodos apresentados, neste volume, a qualidade pode ser avaliada diretamente pelo limite de erro da aproximação. Este volume consta dos capítulos iniciais da terceira parte (Análise de Métodos Numéricos) do trabalho sobre os fundamentos da Análise Numérica, iniciado com a Publicação INPE-1937-MD/005</i>			
15. Observações			

ABSTRACT

Under the denomination of direct methods, a set of methods are collected in a same context for the theory of approximations. The set is characterized by the possibility of obtaining, a priori, the amount of work required for a derived accuracy. In the methods presented, the quality can be determined directly by the approximated error limits. This volume presents the first chapters of the third part of the work "Análise de Métodos Numéricos" (Analysis of Numerical Methods). It started with the publication INPE-1937-MD/005.

ÍNDICE

	<u>Pág.</u>
ABSTRACT	<i>vii</i>
LISTA DE TABELAS	<i>viii</i>
 <u>TERCEIRA PARTE - ANÁLISE DE MÉTODOS NUMÉRICOS</u>	
<u>CAPÍTULO - XIV - DIFERENÇAS FINITAS</u>	197
14.1 - Introdução	197
14.2 - Operadores lineares	198
14.3 - Diferenças de ordem superior	200
14.4 - Diferenças relativas	200
14.5 - Tabelas de diferenças finitas	200
14.6 - Propagação de erros	202
14.7 - Correção de tabelas	203
EXERCÍCIOS	207
BIBLIOGRAFIA	209
 <u>CAPÍTULO XV - INTERPOLAÇÃO</u>	 211
15.1 - Introdução	211
15.2 - Função interpoladora	212
15.3 - Sistemas de Tchebyshev	214
15.4 - Termo corretivo da fórmula interpoladora	214
15.5 - Polinômios interpoladores - Caso geral	216
15.5.1 - Polinômio interpolador de Lagrange	216
15.5.2 - Polinômio interpolador de Newton	218
15.6 - Polinômios interpoladores para pontos igualmente espaçados	220
15.6.1 - Fórmulas interpoladoras de Newton	221
15.6.2 - Fórmulas de Gauss	222
15.6.3 - Fórmula de Stirling	224
15.6.4 - Fórmula de Bessel	225
15.6.5 - Fórmula de Everett	226
15.7 - Emprego das fórmulas interpoladoras	227
15.8 - Interpolação de funções periódicas	229
15.9 - Interpolação inversa	233
15.10 - Extrapolação	235
15.11 - Interpolação generalizada - concordância	236

	<u>Pág.</u>
15.11.1 - Interpolação por funções concordantes	236
15.11.2 - Polinômio interpolador de Hermite	237
15.11.3 - Funções concordantes por trechos - "Splines"	243
EXERCÍCIOS	253
BIBLIOGRAFIA	257
<u>CAPÍTULO XVI - DERIVAÇÃO NUMÉRICA</u>	259
16.1 - Introdução	259
16.2 - Método de Lagrange para derivação	259
16.3 - Método de Newton para derivação	261
16.4 - Método da "splines" para derivação	262
16.5 - Cálculo da derivada com o uso de diferenças finitas	263
16.6 - Erros introduzidos pelo computador	264
EXERCÍCIOS	266
BIBLIOGRAFIA	267
<u>CAPÍTULO XVII - INTEGRAÇÃO NUMÉRICA</u>	269
17.1 - Introdução	269
17.2 - Métodos baseados no polinômio interpolador de Lagrange ..	269
17.2.1 - Método de Newton-Côtes	271
17.3 - Métodos baseados no polinômio interpolador de Hermite ...	278
17.3.1 - Integração do polinômio de Hermite	279
17.3.2 - Generalização da integração	282
17.3.3 - Determinação dos coeficientes e abcissas	285
17.3.4 - Casos particulares da integração de Gauss	287
17.3.5 - Aplicação do método de Gauss	290
17.4 - Fórmulas compostas para integração	291
17.4.1 - Regra do trapézio	292
17.4.2 - Regra parabólica	292
17.4.3 - Integração das "splines"	293
17.4.4 - Método de Romberg	294
17.5 - Integrais singulares	306
17.5.1 - Integração pelo método de Gauss	307
17.5.2 - Decomposição do integrando como produto de funções	308
17.5.3 - Decomposição integrando como soma de funções	309

	<u>Pág.</u>
17.6 - Integrais múltiplas	310
17.6.1 - Forma geral das fórmulas unidimensionais	310
17.6.2 - Integrais múltiplas em cubos N-dimensionais	311
EXERCÍCIOS	313
BIBLIOGRAFIA	317
<u>CAPÍTULO XVIII - TEORIA DAS APROXIMAÇÕES</u>	319
18.1 - Introdução	319
18.2 - Matriz de conversão de um subespaço do E_{∞} para um subespaço do E_N	319
18.3 - Métrica do espaço vetorial de funções	322
18.4 - Aproximação ótima	322
18.5 - Ortogonalidade do erro da aproximação ótima	325
18.6 - Teorema de Khaar generalizado	326
18.7 - Determinação da aproximação ótima	327
18.8 - Aproximação polinomial ótima	328
18.9 - Aproximação trigonométrica ótima-aproximação de Fourier .	328
18.10 - Aproximação exponencial ótima	329
18.10.1 - Método de Prony	330
18.11 - Melhoria da aproximação polinomial ótima pela escolha das abcissas	331
18.12 - Interpolação de Tchebyshev	334
18.13 - Redução do número de termos nas séries de potência	336
18.14 - Aproximação por funções racionais	336
EXERCÍCIOS	340
BIBLIOGRAFIA	342
<u>CAPÍTULO XIX - AJUSTE DE FUNÇÕES</u>	343
19.1 - Introdução	343
19.2 - Princípios dos mínimos quadrados de Legendre	343
19.3 - Ajuste linear para valores exatos	344
19.4 - Ajuste linear na presença de erros	345
19.4.1 - Ajuste linear com valor de erro médio quadrático conhecido	346
19.4.2 - Ajuste linear com valor do erro médio quadrático desconhecido	349
19.5 - Ajuste não-linear	352

	<u>Pág.</u>
19.5.1 - Forma redutível para o caso linear	352
19.5.2 - Forma não-redutível para o caso linear	353
EXERCÍCIOS	354
BIBLIOGRAFIA	357
<u>APÊNDICE A - DISTRIBUIÇÃO</u>	A.1
A.1 - Introdução	A.1
A.2 - Função densidade	A.2
A.3 - Associação geométrica ao espaço vetorial de funções	A.3
A.4 - Funções generalizadas	A.4
A.4.1 - Função delta de Dirac	A.5
A.4.2 - Outras funções generalizadas	A.6
EXERCÍCIOS	A.8
BIBLIOGRAFIA	A.9
<u>APÊNDICE B - POLINÔMIOS ORTOGONAIS</u>	B.1
B.1 - Introdução	B.1
B.2 - Relação de ortogonalidade	B.1
B.3 - Construção de conjuntos de polinômios ortogonais	B.2
B.3.1 - Fórmula de recorrência de 3 parcelas	B.2
B.3.2 - Equação diferencial e função geratriz	B.4
B.3.3 - Cálculo dos coeficientes da fórmula de recorrência, uti lizando a função geratriz	B.5
B.3.4 - Determinação dos dois primeiros polinômios ortogonais ..	B.7
B.3.5 - Exemplos ilustrativos	B.8
B.4 - Relação de Christoffel-Darboux para polinômios ortogonais.	B.10
B.5 - Outras propriedades dos polinômios ortogonais	B.12
EXERCÍCIOS	B.14
BIBLIOGRAFIA	b.15

LISTA DE TABELAS

	<u>Pág.</u>
XIV.1 - Diferenças sucessivas para $f(x) = x^3$	201
XIV.2 - Efeito de erro em um valor de y	203
XIV.3 - Tabela para $f(x) = \log(x)$	205
XVII.1 - Fórmulas abertas	272
XVII.2 - Fórmulas fechadas	273
XVII.3 - Denominação da integral de gauss.....	287

TERCEIRA PARTE

ANÁLISE DE MÉTODOS NUMÉRICOS

CAPÍTULO XIV

DIFERENÇAS FINITAS

14.1 - INTRODUÇÃO

Os métodos numéricos, baseados no cálculo de diferenças finitas, mereceram especial atenção na chamada Análise Numérica Clássica. Cumpre lembrar a publicação de um tratado sobre o assunto, em 1860, por George Boole, intitulado "A Treatise on the Calculus of Finite Differences".

Com o aparecimento dos computadores eletrônicos, esses métodos perderam parte de sua importância, por várias razões, entre as quais se destacam:

- a) a necessidade de um grande número de registros de memória para armazenamento de tabelas;
- b) o processo de subtrações sucessivas, usado no cálculo com diferenças finitas, acarreta uma perda de dígitos significativos (ver Capítulo XIII) e um rápido crescimento de erros.

A aplicação de métodos usando diferenças finitas é mais apropriada para o cálculo manual. Em computadores digitais o uso desses métodos requer cuidados especiais, não sendo muitas vezes competitivos. Esses métodos encontram maior utilização, neste caso, na solução numérica de equações diferenciais.

Dentre as aplicações especiais, do cálculo com diferenças finitas, destaca-se o teste para determinação e correção de erros em tabelas matemáticas.

Apresentar-se-ão, neste capítulo, os fundamentos do cálculo com diferenças finitas. Algumas aplicações serão vistas, em certos métodos numéricos, nos capítulos subsequentes.

14.2 - OPERADORES LINEARES

No que se segue, usar-se-á a notação:

$$u_x = f(x)$$

$$u_{x+h} = f(x+h)$$

Define-se o operador Δ , denominado "primeira diferença progressiva", pela relação:

$$\Delta u_x = u_{x+h} - u_x$$

Dessa relação, segue-se a lei de recorrência que permite estabelecer o operador E , denominado "deslocamento":

$$u_{x+h} = u_x + \Delta u_x = (1 + \Delta) u_x = E u_x$$

de onde a relação

$$E = (1 + \Delta)$$

Analogamente, define-se o operador ∇ , denominado "primeira diferença regressiva", pela relação:

$$\nabla u_x = u_x - u_{x-h}$$

Considera-se o operador "diferença central", dado pela relação:

$$\delta u_x = u_{x+h/2} - u_{x-h/2}$$

e o operador "m\u00e9dia", dado por:

$$\mu u_x = \frac{1}{2} [u_{x+h/2} + u_{x-h/2}]$$

Usando-se o desenvolvimento de Taylor, define-se o operador "diferencial" $D = h \frac{d}{dx}$ por:

$$\begin{aligned} u_{x+h} &= u_x + h \frac{du_x}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2u_x}{dx^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3u_x}{dx^3} + \dots = \\ &= u_x + Du_x + \frac{D^2}{2!} u_x + \frac{D^3}{3!} u_x + \dots = \\ &= \left(1 + D + \frac{D^2}{2!} + \frac{D^3}{3!} + \dots \right) u_x = e^D u_x \end{aligned}$$

De onde a rela\u00e7\u00e3o:

$$u_{x+h} = (1 + \Delta) u_x = e^D u_x$$

Logo:

$$E = (1 + \Delta) = e^D \quad \text{e} \quad D = \ln(1 + \Delta)$$

Analogamente, define-se um operador integral pela rela\u00e7\u00e3o:

$$J u_x = \int_x^{x+h} u_t dt$$

14.3 - DIFERENÇAS DE ORDEM SUPERIOR

Podem-se generalizar as definições anteriores, criando-se os operadores de segunda ordem, terceira ordem e assim por diante; o processo é formalmente o mesmo. Assim, o título de exemplo, considere-se a extensão do conceito do operador "primeira diferença progressiva". O operador de segunda ordem será:

$$\Delta^2 u_x = \Delta(\Delta u_x) = \Delta u_{x+h} - \Delta u_x = u_{x+2h} - 2u_{x+h} + u_x$$

e o de ordem n, obtido do operador de ordem n-1 por recorrência, será:

$$\Delta^n u_x = \Delta(\Delta^{n-1} u_x) \quad n = 1, 2, \dots$$

14.4 - DIFERENÇAS RELATIVAS

Para pontos desigualmente espaçados, os conceitos estabelecidos anteriormente não podem ser aplicados. Definem-se, então, as diferenças relativas que, no caso de diferenças progressivas, serão dadas por:

$$f[x_0] = f(x_0)$$

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

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

e assim sucessivamente:

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

É simples mostrar que existe uma relação entre a derivada de uma função e sua diferença relativa em um ponto considerado. Essa relação é:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f[x, x + \Delta x] - f[x, x]}{\Delta x}$$

É óbvio que essa relação não possui sentido numericamente, mas sim como resultado de um limite.

14.5 - TABELAS DE DIFERENÇAS FINITAS

A tabela de diferenças é uma tabela de duas entradas, em que se colocam sucessivamente as diferenças de primeira ordem, segunda ordem e assim por diante. Como por exemplo, para a função $f(x) = x^3$ obtêm-se o resultado de diferenças sucessivas, mostrado na Tabela XIV.1.

TABELA XIV.1

DIFERENÇAS SUCESSIVAS PARA $f(x) = x^3$

X	0	1	2	3	4	5
Y	0	1	8	27	64	125
ΔY	1	7	19	37	61	
$\Delta^2 Y$	6	12	18	24		
$\Delta^3 Y$	6	6	6			
$\Delta^4 Y$	0	0				

Nota-se que as diferenças de quarta ordem são todas nulas quando $f(x) = x^3$. Isso não se deve meramente ao acaso. Para $Y = x^n$ ou $Y = \sum_{j=1}^n a_j x^j$ obtêm-se sempre $\Delta^{n+1} Y = 0$. A demonstração é simples. se $Y = x^n$, então:

$$\Delta Y = (x+h)^n - x^n = x^n + \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j x^j - x^n = \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j x^j,$$

decaindo, assim, o expoente de x de uma unidade. Analogamente:

$$\begin{aligned} \Delta^2 Y &= \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j \left[(x+h)^j - x^j \right] = \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j \left[x^j + \sum_{i=0}^{j-1} \gamma_i x^i - x^j \right] = \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^{j-1} \beta_j \gamma_i x^i = \sum_{k=0}^{n-2} \alpha_k x^k \end{aligned}$$

e assim, sucessivamente, obtêm-se:

$$\Delta^n Y = \sum_{\ell=0}^0 \alpha_\ell x^\ell = \alpha_0 = \text{constante}$$

de onde:

$$\Delta^{n+1} Y = \alpha_0 - \alpha_0 = 0$$

14.6 - PROPAGAÇÃO DE ERROS

As diferenças finitas gozam da propriedade de linearidade, assim para tabelas de diferenças finitas, é válido o princípio de superposição de efeitos. Pode-se, portanto, considerar nulos, sem perda de generalidade, todos os valores da função e um erro ϵ que afeta apenas um valor da função. Para este caso, tem-se a Tabela XIV.2.

TABELA XIV.2

EFEITO DE ERRO EM UM VALOR DE y

x	0	1	2	3	4	5	6
y	0	0	0	ϵ	0	0	0
Δy	0	0	ϵ	$-\epsilon$	0	0	
$\Delta^2 y$	0	ϵ	-2ϵ	ϵ	0		
$\Delta^3 y$	ϵ	-3ϵ	3ϵ	$-\epsilon$			

Observa-se, na Tabela XIV.2, que os coeficientes do erro ϵ , para uma dada linha considerada, são os coeficientes binomiais com sinais alternados. A soma algébrica dos erros é zero para qualquer diferença de ordem $i \geq 1$.

No caso de dois ou mais erros, devido à superposição de efeitos, a estrutura de coeficientes binomiais é destruída. O conhecimento das estruturas de erros é importante para o teste e para a correção de valores tabelados.

14.7 - CORREÇÃO DE TABELAS

As tabelas matemáticas, em geral, são construídas com espaçamento entre pontos h suficientemente pequenos, para que a função possa ser linearizada entre dois pontos consecutivos, x e $x+h$. Para que isto aconteça, deve ser satisfeita a relação:

$$\left| \frac{h^2}{2!} \frac{f''(x)}{f(x)} \right| < 5 \times 10^{-n},$$

onde n é o número de dígitos significativos usados na tabela.

Quando a condição de linearidade é satisfeita, é de se esperar que as diferenças de ordem superior sejam nulas. Isto permite detetar a presença de algum erro de impressão eventualmente existente na tabela.

Por exemplo na Tabela XIV.3 estão colocados os valores para $f(x) = \log(x)$, onde existe a suspeita da existência de um erro.

Os erros de arredondamento das tabelas, construídas para interpolação linear, afetam, no máximo, em uma unidade o último dígito significativo da diferença de segunda ordem.

Calculando-se as diferenças progressiva de primeira e segunda ordens, pode-se notar, nesta última, a estrutura dos coeficientes binomiais:

$$\epsilon, -2\epsilon, \epsilon,$$

começando no ponto $x = 4,04$ e propagando-se para $x < 4,04$.

Comparando-se com a estrutura de erros da Tabela XIV.2, pode-se estabelecer o valor $\epsilon = 0,0003$ e corrigir o valor da tabela para:

$$f(4,04) - \epsilon = 0,6064,$$

que é o valor correto, o qual deve figurar para $\log(4,04)$.

Os outros erros que figuram na Tabela XIV.3 para Δ^2 , e que introduzem uma pequena perturbação na exata configuração $\epsilon, -2\epsilon, \epsilon$, são erros de uma unidade na última casa decimal, devidos ao processo de arredondamento.

TABELA XIV.3

TABELA PARA $f(x) = \log(x)$

x	4,00	4,01	4,02	4,03	4,04	4,05	4,06	4,07	4,08	4,09
f(x)	0,6021	0,6031	0,6042	0,6053	0,6067	0,6075	0,6085	0,6096	0,6107	0,6117
Δ	0,0010	0,0011	0,0011	0,0014	0,008	0,0010	0,0011	0,0011	0,0010	
Δ^2	0,0001	0,0000	0,0003	-0,0006	0,0002	0,0001	0,0000	-0,0001		

Outra aplicação do processo de eliminação de erros, que usa tabelas de diferenças finitas, é a correção de valores calculados para funções de grande complexidade, e cujo algoritmo não oferece a necessária precisão para alguns pontos específicos.

EXERCÍCIOS

1. Considerando os desenvolvimentos em série de Taylor.

$$f(x) = f(x)$$

$$f(x + h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \dots$$

$$f(x + 2h) = f(x + h) + h f'(x + h) + \frac{h^2}{2!} f''(x + h) + \dots$$

determine a relação entre as diferenças progressivas de várias ordens e as derivadas da função.

2. Repita o exercício anterior para os casos:

- a) diferenças regressivas;
- b) diferenças centrais.

3. Usando os resultados dos Exercícios 1 e 2, analise o caso em que $f(x)$ é um polinômio de grau n .

4. Demonstre a propriedade de linearidade das diferenças regressivas. Sugestão: use o processo de indução finita para calcular as diferenças de várias ordens da função $af(x) + bg(x)$, onde a e b são constantes.

5. Desenvolva $\ln(1 + \Delta)$ em série de Taylor para estabelecer a relação entre Du_x e as diferenças progressivas $\Delta^i u_x$, $i = 1, 2, \dots$. Qual a condição de convergência?

6. Usando os desenvolvimentos em sêrie de Taylor, verifique se as diferenças relativas, definidas na Seção 14.4, possuem a mesma forma estrutural encontrada no Exercício 1.

7. Mostre que:

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

Sugestão: use o método de indução finita.

8. Demonstre a relação

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f_0}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{f_1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

e generalize esse resultado.

9. Estabeleça a estrutura de propagação de erros, para os vários casos possíveis, quando 2 valores da função estão afetados por erro ϵ_1 e ϵ_2 numa tabela de diferenças finitas.

10. Com base no resultado do Exercício 8, discuta a possibilidade de detetar a presença de dois erros numa tabela matemática. Simule um exemplo.

BIBLIOGRAFIA

HILDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis*. New York, McGraw-Hill, 1956.

KELLY, L.G. *Handbook of numerical methods and applications*. Reading, MA; Addison-Wesley, 1967.

RALSTON, A. *A first course in numerical analysis*. New York, MacGraw-Hill, 1964.

CAPÍTULO XV

INTERPOLAÇÃO

15.1 - INTRODUÇÃO

Um dos problemas mais frequentemente encontrados é o de conhecer o valor de uma função $f(x)$ para um determinado ponto x , sendo desconhecida a função e conhecendo-se apenas o seu valor para um conjunto de N pontos $\{x_j\}$ diferentes de x . Deseja-se, portanto, obter uma extensão de $f(x)$, $x \in \{x_j\}$.

Geralmente o problema pode ser estabelecido da seguinte forma:

- a) São conhecidos exatamente os valores $f(x_j)$ para um conjunto de N pontos $\{x_j\}$.
- b) É desconhecida a expressão analítica de $f(x)$.
- c) São desejados valores de $f(x)$ para um conjunto de M pontos $\{x_k\}$, que podem cair dentro ou fora do intervalo definido pelos valores extremos de x do conjunto $\{x_j\}$.

As variações decorrentes dessa forma são classificadas como:

- a) Interpolação Direta: Consiste em encontrar um valor $f(x)$ para um particular valor x , dentro do intervalo compreendido pelos pontos extremos de $\{x_j\}$.
- b) Interpolação Inversa: Consiste em encontrar o valor x que originou um valor $f(x)$ dado.
- c) Subtabulação: Consiste em encontrar os valores de $f(x)$ para um conjunto de K pontos $\{x_k\}$.

c) Extrapolação: Consiste em encontrar valores de $f(x)$ para x fora do intervalo compreendido pelos pontos extremos de $\{x_j\}$.

Neste capítulo apresentar-se-ão alguns métodos mais comuns de interpolação.

15.2 - FUNÇÃO INTERPOLADORA

Por hipótese existe uma função $y = f(x)$ que relaciona y com x e que é desconhecida. Admite-se então a possibilidade de caracterizar $f(x)$ por meio de um desenvolvimento do tipo:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \phi_i(x)$$

onde $\phi_i(x)$ são funções conhecidas (usualmente ortogonais). Nessas condições, considera-se uma aproximação $\phi(x)$ para $f(x)$, dada pelo truncamento da série acima:

$$f(x) \approx \phi(x) = \sum_{i=1}^M a_i \phi_i(x)$$

Para calcular os valores a_i , impõe-se a condição de que $\phi(x)$ reproduza exatamente $f(x)$ no conjunto de N pontos $\{x_j\}$, para os quais o valor $f(x_j)$ é conhecido. Então:

$$f(x_j) = \phi(x_j) = \sum_{i=1}^M a_i \phi_i(x_j) \quad j = 1, \dots, N$$

Este é um sistema com N equações e M incógnitas. Para minimizar o erro cometido no truncamento da série equivalente a $f(x)$, deve-se usar o maior valor possível para M . Então, adotar-se-á $M=N$, que resulta na equação matricial:

$$\underline{\phi} \underline{a} = \underline{f}$$

onde $\underline{\phi}$ é uma matriz $N \times N$ de elementos $\phi_{ij} = \phi_i(x_j)$, \underline{a} é um vetor com elementos a_i , e \underline{f} é um vetor com elementos $f_j = f(x_j)$.

O valor dos coeficientes a_i é então obtido de:

$$\underline{a} = \underline{\phi}^{-1} \underline{f}$$

desde que exista ϕ^{-1} . Neste caso, chamando-se Δ o valor do determinante de $\underline{\phi}$ e Δ_i , o valor do determinante que se obtém substituindo-se, na coluna i , os valores de ϕ_{ki} por f_i , resulta:

$$a_i = \frac{\Delta_i}{\Delta}$$

A função $\phi(x)$ pode então ser escrita como:

$$\phi(x) = \frac{\Delta_1}{\Delta} \phi_1(x) + \dots + \frac{\Delta_N}{\Delta} \phi_N(x)$$

Por outro lado, é possível desenvolver o determinante Δ_i pelos elementos da coluna i , obtendo-se:

$$\Delta_i = \sum_{k=1}^N (-1)^{i+k} f(x_k) \Delta_{ik}$$

onde Δ_{ik} são os menores complementares dos elementos da linha k e coluna i . Rearranjando-se os termos, pode-se escrever:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^N f(x_i) \psi_i(x)$$

onde as $\psi_i(x)$ serão combinações lineares das $\phi_i(x)$.

Para os pontos $x = x_j$ segue-se que:

$$f(x_j) = f(x_j) \psi_j(x_j) + \sum_{i \neq j} f(x_i) \psi_i(x_j)$$

de onde resultam as condições que as funções $\psi_i(x)$ devem satisfazer:

$$\psi_i(x_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$$

15.3 - SISTEMAS DE TCHEBYSHEV

Foi visto anteriormente que a condição para a existência da função interpoladora é que o determinante Δ não se anule para o particular conjunto de pontos x_j considerado.

Existe interesse em usar o mesmo conjunto de funções, $\phi_i(x)$, para qualquer conjunto de pontos, $\{x_j\}$, escolhidos dentro de um intervalo $[a, b]$ dado. Para que isto seja possível, é necessário que nenhuma combinação linear

$$L\{\phi_i(x)\} = \sum_{i=1}^N C_i \phi_i(x)$$

possua N raízes diferentes em $[a, b]$. Os conjuntos de funções, $\{\phi_i(x)\}$, com essa propriedade são chamados sistemas de Tchebyshev.

15.4 - TERMO CORRETIVO DA FÓRMULA INTERPOLADORA

A função interpoladora, $\phi(x)$, constitui uma aproximação para a função $f(x)$. Para que se possa ter uma fórmula interpoladora, é necessária a adição de um termo corretivo, $E(x)$, para a função $\phi(x)$, de modo que:

$$f(x) = \phi(x) + E(x).$$

Para determinar $E(x)$, consideram-se os resíduos:

$$r_k(x) = \frac{d^k}{dx^k} (f(x) - \phi(x) - E(x)), \quad k=0,1,2\dots$$

Tomando-se o resíduo $r_0(x)$, tem-se:

$$r_0(x) = f(x) - \phi(x) - E(x)$$

Como $\phi(x_i) = f(x_i)$, $i=1, \dots, N$, segue-se que $E(x_i) = r_0(x_i) = 0$. Assim, sem perda de generalidade, o termo $E(x)$ pode ser es crito na forma:

$$E(x) = K \prod_{i=1}^N (x-x_i).$$

Impondo-se a condição de que a fórmula também seja exata no particular ponto x considerado, $x \neq x_i$, resulta o valor de K :

$$K = \frac{f(x) - \phi(x)}{\prod_{i=1}^N (x - x_i)}$$

Esta expressão de K é de pouca utilidade, uma vez que $f(x)$ é desconhecida. Procurar-se-a, portanto, obter outra expressão que, complementada com alguma informação adicional, permita que se te nha uma estimativa para $E(x)$.

No intervalo $[a,b]$, definido pelo conjunto de pontos $\{x_i\}$, o resíduo $r_0(x)$ é nulo em $N+1$ pontos, a saber: x, x_1, \dots, x_N . Como consequência, pelo teorema de Rolle, $r_1(x)$ se anula em N pontos no in tervalo $[a,b]$ e assim, sucessivamente, conclue-se que $r_n(x)$ se anula em, pelo menos, um ponto do intervalo $[a,b]$. Seja ξ esse ponto, então:

$$r_N(\xi) = f^{(N)}(\xi) - \phi^{(N)}(\xi) - N! K = 0$$

Esta última expressão permite escrever:

$$K = \frac{f^{(N)}(\xi) - \phi^{(N)}(\xi)}{N!}$$

cuja aplicação subentende que existam as derivadas $f^{(N)}(x)$ e $\phi^{(N)}(x)$ para todo $x \in [a, b]$. Sendo dada a informação adicional de que $f^{(N)}(x)$ é limitada em $[a, b]$ por um valor M , a expressão que limita o termo corretivo resulta em:

$$E(x) < \frac{M - \phi^{(N)}(\xi)}{N!} \prod_{i=1}^N (x - x_i)$$

15.5 - POLINÔMIOS INTERPOLADORES - CASO GERAL

É de grande interesse, pela simplicidade de implementação em computadores, o caso em que a função interpoladora, $\phi(x)$, é um polinômio.

Nesta seção, tratar-se-á do problema da determinação de um polinômio interpolador, válido para todo o intervalo (a, b) considerado. Destacam-se, neste particular, duas opções principais:

- a) polinômio interpolador de Lagrange;
- b) polinômio interpolado de Newton.

15.5.1 - POLINÔMIO INTERPOLADOR DE LAGRANGE

Considera-se a seguinte sequência como o conjunto de funções $\{\phi_i(x)\}$:

$$1, x, x^2, \dots, x^{N-1}, \dots$$

$$\phi_1(x), \dots, \phi_N(x), \dots$$

As funções deste tipo são linearmente independentes em qualquer intervalo, uma vez que qualquer polinômio de grau $N-1$ tem, no máximo, $N-1$ raízes diferentes.

Para este caso, o determinante Δ terá a forma:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{N-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & & x_2^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & & x_N^{N-1} \end{vmatrix}$$

que é o determinante de Vandermond, cujo valor é:

$$\Delta = \prod_{i=j+1}^N (x_i - x_j) \quad j = 1, \dots, N-1$$

Este determinante é diferente de zero, desde que $x_i \neq x_j$ para $i \neq j$.

Para encontrar as funções $\psi_i(x)$ basta lembrar que combinações lineares dos $\phi_i(x)$, que se anulam para todos os $x_j \neq x_i$, podem ser colocadas na forma:

$$\psi_i(x) = A(x-x_1) \dots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \dots (x-x_N)$$

Da condição:

$$\psi_i(x_i) = 1$$

obtem-se o valor da constante A:

$$A = \frac{1}{(x_i-x_1) \dots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \dots (x_i-x_N)}$$

de onde resulta:

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

e o polinômio interpolador terá a forma:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^N \left[\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right] f(x_i)$$

Como $\phi^{(N)}(x) = 0$ para todo $x \in [a, b]$, o termo corretivo toma a forma:

$$E(x) = \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} \prod_{i=1}^N (x - x_i) \quad \xi \in [a, b]$$

15.5.2 - POLINÔMIO INTERPOLADOR DE NEWTON

Embora o desenvolvimento anterior possa ser usado para de terminar o polinômio interpolador de Newton, a dedução será feita par tindo-se da fórmula de Taylor, para dar ao leitor um método alternati vo de desenvolvimento.

Sendo a fórmula de Taylor exata para um ponto específico x , variando-se x , um termo corretivo deverá ser introduzido. Assim, par tindo-se do desenvolvimento linear entre dois pontos x_1 e x_2 , tem-se:

$$f(x) = f(x_1) + (x - x_1) f'(\xi_1) + E_1(x) \quad x_1 < \xi_1 < x_2$$

onde $E_1(x)$ é o termo corretivo (ou erro da aproximação).

CAPÍTULO XV

INTERPOLAÇÃO

15.1 - INTRODUÇÃO

Um dos problemas mais frequentemente encontrados é o de conhecer o valor de uma função $f(x)$ para um determinado ponto x , sendo desconhecida a função e conhecendo-se apenas o seu valor para um conjunto de N pontos $\{x_j\}$ diferentes de x . Deseja-se, portanto, obter uma extensão de $f(x)$, $x \in \{x_j\}$.

Geralmente o problema pode ser estabelecido da seguinte forma:

- a) São conhecidos exatamente os valores $f(x_j)$ para um conjunto de N pontos $\{x_j\}$.
- b) É desconhecida a expressão analítica de $f(x)$.
- c) São desejados valores de $f(x)$ para um conjunto de M pontos $\{x_k\}$, que podem cair dentro ou fora do intervalo definido pelos valores extremos de x do conjunto $\{x_j\}$.

As variações decorrentes dessa forma são classificadas como:

- a) Interpolação Direta: Consiste em encontrar um valor $f(x)$ para um particular valor x , dentro do intervalo compreendido pelos pontos extremos de $\{x_j\}$.
- b) Interpolação Inversa: Consiste em encontrar o valor x que originou um valor $f(x)$ dado.
- c) Subtabulação: Consiste em encontrar os valores de $f(x)$ para um conjunto de K pontos $\{x_k\}$.

Impondo-se a condição da aproximação ser exata para o ponto x_2 (i.e. $E(x_2) = 0$), resulta:

$$f'(\xi_1) = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = f[x_1, x_2]$$

O erro pode então ser escrito como:

$$E_1(x) = (x - x_1) \left\{ f[x_1, x] - f[x_1, x_2] \right\}$$

Por outro lado, é possível calcular $f[x_1, x]$ pela fórmula de Taylor, como anteriormente, introduzindo-se um termo corretivo $E_2(x)$. Assim: $f[x_1, x] = f[x, x_2] + (x - x_2) f'[x_1, \xi_2] + E_2(x)$

De onde resulta:

$$E_1(x) = (x - x_1)(x - x_2) f'[x_1, \xi_2] + (x - x_1) E_2(x)$$

e a expressão para calcular $f(x)$ torna-se:

$$f(x) = f(x_1) + (x - x_1) f[x_1, x_2] + (x - x_1)(x - x_2) f'[x_1, \xi_2] + (x - x_1) E_2(x)$$

Impondo-se agora a condição de que o erro $E_2(x)$ seja nulo para $x = x_3$, obtêm-se novamente $f'[x_1, \xi_2]$:

$$f'[x_1, \xi_2] = \frac{f[x_1, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_2} = f[x_1, x_2, x_3]$$

Dessa forma, o erro $E_2(x)$ valerá:

$$E_2(x) = (x - x_2) \left\{ f[x_1, x_2, x] - f[x_1, x_2, x_3] \right\}$$

e o termo corretivo $E_2^1(x)$, da fórmula que vale $(x-x_1) E_2(x)$, torna-se

$$E_2^1(x) = (x-x_1) (x-x_2) \left\{ f[x_1, x_2, x] - f[x_1, x_2, x_3] \right\}$$

Assim, através desse procedimento sucessivo, chega-se ao desenvolvimento:

$$f(x) = f(x_1) + \sum_{i=2}^N \left[\prod_{j=1}^{i-1} (x-x_j) \right] f[x_1, \dots, x_i] + E(x),$$

onde o termo corretivo $E(x) = E_{N-1}^1(x)$ vale:

$$E_{N-1}^1 = \left[\prod_{j=1}^N (x-x_j) \right] f[x_1, x_2, \dots, x_N, x] = \frac{\prod_{j=1}^N (x-x_j)}{N!} f^{(N)}(\xi)$$

15.6 - POLINÔMIOS INTERPOLADORES PARA PONTOS IGUALMENTE ESPAÇADOS

Em grande quantidade de casos práticos os valores da função $f(x)$ são conhecidos para um conjunto de pontos x_j , $j=1, \dots, N$, igualmente espaçados entre si. Para estes pontos, tem-se:

$$|x_{j+1} - x_j| = h,$$

e fórmulas interpoladoras de menor complexidade podem ser deduzidas.

Ver-se-ão aqui as principais fórmulas que usam diferenças finitas.

15.6.1 - FÓRMULAS INTERPOLADORAS DE NEWTON

Na fórmula geral deduzida das diferenças relativas progressivas - Seção 15.5.2, considerando-se os pontos igualmente espaçados, segue-se que:

$$\begin{aligned}f [x_1, x_2] &= \frac{\Delta f_1}{h} \\f [x_1, x_2, x_3] &= \frac{\Delta^2 f_1}{2h^2} \\&\vdots \\f [x_1, \dots, x_n] &= \frac{\Delta^{N-1} f_1}{(N-1)! h^{N-1}},\end{aligned}$$

onde o índice 1 indica que as diferenças são calculadas com base no ponto x_1 . Assim, a fórmula interpoladora de Newton torna-se

$$\phi(x) = f(x_1) + \sum_{i=2}^N \left[\prod_{j=1}^{i-1} (x-x_j) \right] \frac{\Delta^{i-1} f_1}{(i-1)! h^{i-1}}$$

Fazendo-se agora $\frac{x-x_1}{h} = t$ resulta a fórmula interpoladora para pontos igualmente espaçados:

$$\phi(t) = f(x_1) + \sum_{i=2}^N \left[\prod_{j=1}^{i-1} (t-j+1) \right] \frac{\Delta^{i-1} f_1}{(i-1)!}$$

No caso em que os pontos estão ordenados em ordem decrescente de valor relativo, isto é $x_{i+1} - x_i = -h$, prefere-se usar diferenças regressivas.

Neste caso, usando-se idêntico desenvolvimento, obtêm-se:

$$\phi(t) = f(x_1) + \sum_{i=2}^N \left[\begin{matrix} i-1 \\ j=1 \end{matrix} \binom{t+j-1}{\pi} \right] \frac{\nabla^{i-1} f_i}{(i-1)!}$$

O termo corretivo da fórmula de Newton torna-se, para o caso de diferenças progressivas de pontos igualmente espaçados, em:

$$E(x) = \frac{\sum_{j=1}^N \binom{t-j+1}{\pi}}{N!} h^N f^{(N)}(\xi)$$

e para diferenças regressivas, em:

$$E(x) = \frac{\sum_{j=1}^N \binom{t+j-1}{\pi}}{N!} h^N f^{(N)}(\xi)$$

15.6.2 - FÓRMULAS DE GAUSS

Obtêm-se a primeira fórmula de Gauss a partir da fórmula geral de Newton, fazendo-se:

$$\left. \begin{aligned} z_0 &= x_1 \\ x_{2n} &= z_0 + n h \\ x_{2n+1} &= z_0 - n h \end{aligned} \right\} n=1, \dots, \frac{N-1}{2}$$

A expressão para função interpoladora torna-se:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= f(z_0) + (x-z_0) f[z_0, z_0+h] + \\ &+ (x-z_0)(x-z_0-h) f[z_0, z_0+h, z_0-h] + \dots \end{aligned}$$

Usando-se a propriedade de simetria das diferenças relativas, obtêm-se:

$$f[z_0, \dots, z_0 + nh, z_0 - nh] = \frac{\delta^{2n} f_0}{(2n)! h^{2n}}$$

$$f[z_0, \dots, z_0 + nh] = \frac{\delta^{2n-1} f_{1/2}}{(2n-1)! h^{2n-1}}$$

onde o índice 0 indica que a diferença central é calculada no ponto z_0 , e o índice 1/2 indica o cálculo no ponto médio, entre z_0 e z_1 . É simples mostrar que, no presente caso, as diferenças centrais dependem apenas dos valores tabelados para $f(x)$.

Fazendo-se $t = (x - z_0)/h$, pode-se finalmente escrever:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & f(z_0) + t \delta f_{1/2} + \frac{t(t-1)}{2!} \delta^2 f_0 + \frac{t(t^2-1)}{3!} \delta^3 f_{1/2} + \\ & + \frac{t(t^2-1)(t-2)}{4!} \delta^4 f_0 + \dots \end{aligned}$$

Obtêm-se, de modo idêntico, a segunda fórmula de Gauss a partir da fórmula geral de Newton, fazendo-se:

$$\left. \begin{aligned} z_0 &= x_1 \\ x_{2n+1} &= z_0 + nh \\ x_{2n} &= z_0 - nh \end{aligned} \right\} n=1, \dots, \frac{N-1}{2}$$

A única ressalva a ser feita neste caso é para as diferenças relativas assimétricas, que valerão:

$$f[z_0, \dots, z_0 - nh] = \frac{\delta^{2n-1} f_{-1/2}}{(2n-1)! h^{2n-1}}$$

A expressão para a segunda fórmula de Gauss resulta em:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & f(z_0) + t \delta f_{-1/2} + \frac{t(t+1)}{2!} \delta^2 f_0 + \\ & + \frac{t(t^2-1)}{3!} \delta^3 f_{-1/2} + \frac{t(t^2-1)(t+2)}{4!} \delta^4 f_0 + \dots \end{aligned}$$

O termo corretivo para as fórmulas de Gauss é o mesmo da fórmula geral de Newton, da qual derivam.

No caso de N ser par, o valor 2n estende-se até N e o valor 2n+1 estende-se até N-1. Nessas condições, não há perfeita simetria das fórmulas.

15.6.3 - FÓRMULA DE STIRLING

Obtêm-se esta fórmula da média aritmética das duas fórmulas interpoladoras de Gauss.

De acordo com a definição do operador média (Seção 14.2), $\mu \delta^K f_0 = 1/2 (\delta^K f_{1/2} + \delta^K f_{-1/2})$, de onde resulta a fórmula de Stirling:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & f(z_0) + t \mu \delta f_0 + \frac{t^2}{2!} \delta^2 f_0 + \frac{t(t^2-1)}{3!} \mu \delta^3 f_0 + \\ & + \frac{t^2(t^2-1)}{4!} \delta^4 f_0 + \dots \end{aligned}$$

O termo corretivo, nestas condições, continua ser o mesmo da fórmula geral de Newton.

Ainda neste caso, a fórmula interpoladora não requer subtabulação e pode ser obtida facilmente de uma tabela de diferenças centrais.

15.6.4 - FÓRMULA DE BESSEL

Considere-se a expressão para a segunda fórmula de Gauss:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & f(z_0) + t \delta f_{-1/2} + \frac{t(t+1)}{2!} \delta^2 f_0 + \frac{t(t^2-1)}{3!} \delta^3 f_{-1/2} + \\ & + \frac{t(t^2-1)(t+2)}{4!} \delta^4 f_0 + \dots \end{aligned}$$

Aplicando-se o operador deslocamento E ao ponto de referência z_0 e lembrando-se que:

- a) $E f(z_0) = f(z_1)$
- b) $E \delta^j f_i = \delta^j f_{i+1}$
- c) $E t = t-1,$

obtêm-se:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & f(z_1) + (t-1) \delta f_{1/2} + \frac{(t-1)t}{2!} \delta^2 f_1 + \frac{(t-1)t(t-2)}{3!} \delta^3 f_{1/2} + \\ & + \frac{(t-1)t(t-2)(t+1)}{4!} \delta^4 f_1 + \dots \end{aligned}$$

A média aritmética dessa fórmula, juntamente a primeira fórmula de Gauss, fornece a expressão da fórmula de Bessel:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & \mu f_{1/2} + (t-1/2) \delta f_{1/2} + \frac{t(t-1)}{2!} \mu \delta^2 f_{1/2} + \\ & + \frac{t(t-1)(t-1/2)}{3!} \delta^3 f_{1/2} + \dots \end{aligned}$$

É simples verificar que a fórmula de Bessel também não requer uma subtabulação para o seu cálculo.

O termo corretivo continua a ser idêntico ao da fórmula de Newton, da qual deriva.

15.6.5 - FÓRMULA DE EVERETT

Obtêm-se esta fórmula do reagrupamento de termos das fórmulas de Gauss. Desejando-se apenas diferenças de ordem par, toma-se a primeira fórmula de Gauss:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & (f_0 + t \delta f_{1/2}) + \frac{t(t-1)}{2} (\delta^2 f_0 + \frac{t+1}{3} \delta^3 f_{1/2}) + \\ & + \frac{t(t^2-1)(t-2)}{4} (\delta^4 f_0 + \frac{t+2}{5} \delta^5 f_{1/2}) + \dots, \end{aligned}$$

que com o uso das relações:

$$\delta^{2K+1} f_{1/2} = \delta^{2K} f_1 - \delta^{2K} f_0$$

se transforma em:

$$\begin{aligned} \phi(t) = & (1-t) f_0 - \frac{t(t-1)(t-2)}{3!} \delta^2 f_0 - \\ & - \frac{(t+1)t(t-1)(t-2)(t-3)}{5!} \delta^4 f_0 - \dots + t f_1 + \\ & + \frac{(t+1)t(t-1)}{3!} \delta^2 f_1 + \frac{(t+2)(t+1)t(t-1)(t-2)}{5!} \delta^4 f_1 + \dots \end{aligned}$$

Esta última expressão é chamada fórmula de Everett, ou primeira fórmula de Everett. Obtém-se a segunda fórmula de Everett reagrupando-se os termos da primeira fórmula de Gauss, de modo a reter apenas as diferenças de ordem ímpar.

O termo corretivo, como o das outras fórmulas, é o mesmo da fórmula de Newton.

15.7 - EMPREGO DAS FÓRMULAS INTERPOLADORAS

Para pontos desigualmente espaçados, as duas formas de interpolação de Newton e de Lagrange constituem essencialmente a mesma fórmula, escrita diferentemente.

A fórmula de Lagrange apresenta, do ponto de vista computacional, a vantagem de poder exprimir cada função $\psi_i(x)$ como o quociente de dois polinômios de grau $N-1$, escritos na forma de soma de potências. Evita-se, assim, o problema da perda de dígitos significativos, característica das subtrações de números próximos.

A fórmula de Newton é preferida nos casos em que se sabe, de antemão, que por limitações do computador usado, nem todos os pontos disponíveis poderão ser empregados. Nestes casos, escolhem-se os pontos x_1 e x_2 , de tal forma que o ponto x considerado caia no intervalo $[x_1, x_2]$, e os demais pontos conhecidos, caiam o menos afastado possível do ponto x . É simples verificar que, com este procedimento, escolhem-se, para a fórmula de Newton, os termos mais significativos da fórmula de Lagrange.

Para pontos igualmente espaçados, as diferentes formas da função interpoladora, derivadas da fórmula de Newton, possuem aplicações específicas.

As fórmulas de Newton, com diferenças progressivas e regressivas, são preferidas, quando o ponto x estiver próximo, respectivamente, do começo ou do fim do intervalo definido pelos pontos do conjunto $\{x_j\}$.

As fórmulas que usam diferenças centrais de Gauss, Stirling, Bessel e Everett são preferidas, quando o ponto x estiver próximo ao centro de intervalo definido pelo conjunto de pontos $\{x_j\}$. Quando não se tem idéia da localização do ponto x , as fórmulas que usam diferenças centrais são mais aconselháveis.

A primeira fórmula de Gauss é vantajosa, quando o ponto x estiver no intervalo $[z_0, z_0 + h]$, enquanto a segunda fórmula de Gauss é mais aconselhada para pontos x dentro do intervalo $[z_0, z_0 - h]$.

A fórmula de Stirling oferece maior precisão para pontos x dentro do intervalo $[z_0 - 1/2h, z_0 + 1/2 h]$.

A fórmula de Bessel é usada para o ponto x dentro do intervalo $[z_0, z_0 + h]$. Esta fórmula, em relação à fórmula de Gauss, que lhe é equivalente, apresenta a vantagem de possuir os coeficientes tabelados.

Usa-se a fórmula de Everett associada com tabelas de funções, para as quais, por economia de impressão, são incluídos, juntamente com os valores tabelados, apenas algumas diferenças de ordem par ou ordem ímpar. Assim, se a tabela incluir as diferenças de segunda e quarta ordens, pode-se com a fórmula de Everett obter uma precisão idêntica à da fórmula de Gauss, com diferenças de até quinta ordem.

Basicamente, todas as fórmulas de interpolação polinomial apresentadas constituem formas diferentes de escrever a fórmula de Taylor, para o intervalo $[a, b]$, definido pelo conjunto $\{x_j\}$. A diferença entre elas está na escolha do ponto em torno do qual se faz o desenvolvimento de Taylor. Assim, o termo corretivo para todas elas possui a mesma forma estrutural, não havendo, portanto, nenhuma vantagem intrínseca que justifique a escolha de uma só fórmula, válida para to

dos os casos. A natureza do problema e o tipo de computador usado serão os elementos que ditarão a conveniência da particular fórmula interpoladora a ser empregada.

15.8 - INTERPOLAÇÃO DE FUNÇÕES PERIÓDICAS

Quando a função a ser interpolada possui a propriedade $f(a) = f(b)$, pode-se assumir, para efeito de tratamento, que ela seja periódica com período $T=b-a$.

No processamento de funções periódicas, é conveniente usar o intervalo $[a, b]$, que contém um período completo da função.

Cada função do conjunto que compõe a função interpoladora deve satisfazer a condição $\phi_i(a) = \phi_i(b)$, $i=1, \dots, N$. Como consequência, tanto a função interpoladora, como cada uma de suas componentes, só pode conter, no intervalo (a, b) , um número par de raízes, se $f(a)=f(b) \neq 0$.

Sem perda de generalidade, será aqui considerado o sistema de funções:

$$1, \text{sen } x, \text{cos } x, \text{sen } 2x, \text{cos } 2x, \dots \\ \phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x), \phi_4(x), \phi_5(x), \dots,$$

cujo período T vale 2π . Funções, com diferentes períodos, requerem uma prévia transformação de variáveis para usar o tratamento aqui exposto. Será visto no desenvolvimento a seguir que o sistema de funções trigonométricas acima é um sistema de Tchebyshev em qualquer intervalo (a, b) de amplitude 2π .

Antes de se passar ao cálculo das funções $\psi_i(x)$, serão feitas, no sistema de funções trigonométricas, manipulações algébricas para convertê-lo num sistema de mais fácil utilização.

Considere-se o sistema:

$$1, \operatorname{sen}(x), \cos(x), \dots, \operatorname{sen} nx, \cos nx.$$

Usando-se as relações trigonométricas:

$$\operatorname{sen} Kx = \frac{e^{iKx} - e^{-iKx}}{2i}$$

$$\cos Kx = \frac{e^{iKx} + e^{-iKx}}{2}$$

obtem-se o sistema:

$$1, \dots, \frac{e^{iNx} - e^{-iNx}}{2i}, \frac{e^{iNx} + e^{-iNx}}{2},$$

que nada mais é do que uma combinação linear do sistema:

$$e^{-iNx}, \dots, 1, \dots, e^{iNx}$$

Colocando-se em evidência o fator e^{-iNx} e chamando-se $z = e^{ix}$, resulta:

$$z^{-N}(1, z, \dots, z^{2N}).$$

O sistema fundamental dentro do parênteses é o sistema polinomial, já discutido quando foi tratado o polinômio interpolador de Lagrange. *Este sistema é o sistema de Tchebyshev, e a função interpoladora possui $2N$ raízes para x compreendido no intervalo $(0, 2\pi)$.*

Far-se-á o cálculo das funções $\psi_i(z)$ usando-se o quociente de dois determinantes (ver Exercício 4):

$$\psi_i(z) = \frac{D_i}{D},$$

cada linha dos quais é gerada pelo sistema a que se reduziu o sistema trigonométrico. Assim, obtêm-se:

$$D = \prod_{j=1}^{2N+1} z_j^{-N} \begin{vmatrix} 1 & z_1 & \dots & z_1^{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & z_{2N+1} & \dots & z_{2N+1}^{2N} \end{vmatrix}$$

$$D_i = z_i^{-N} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{2N+1} z_j^{-N} \begin{vmatrix} 1 & z_1 & \dots & z_1^{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & z & \dots & z^{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & z_{2N+1} & \dots & z_{2N+1}^{2N} \end{vmatrix} \quad \text{linha } i$$

onde:

$$z_k = e^{ix_k}$$

Os determinantes D_i e D são determinantes de Vandermond. Assim, as funções $\psi_i(z)$ tornam-se:

$$\psi_i(z) = \frac{z^{-N}}{z_i^{-N}} \cdot \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{2N+1} \frac{(z-z_j)}{(z_i-z_j)}$$

Colocando-se $z_j^{1/2}$ em evidência no numerador e denominador dos termos da produtória, e englobando-se os fatores z^{-N} e z_i^{-N} na produtória, resulta:

$$\psi_i(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{2N+1} \frac{(z^{1/2} z_j^{-1/2} - z^{-1/2} z_j^{1/2})}{(z_i^{1/2} z_j^{-1/2} - z_i^{-1/2} z_j^{1/2})},$$

de onde:

$$\psi_i(x) = \frac{2N+1}{\pi} \frac{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} \sin\left(\frac{x-x_j}{2}\right)}{\sin\left(\frac{x_i-x_j}{2}\right)}$$

O tratamento simplificado aqui adotado, deprezando-se as transformações lineares para atingir o sistema polinomial fundamental, sã foi possível, pois as funções $\psi_i(x)$ são combinações lineares das $\phi_i(x)$, que por sua vez resultaram em combinações lineares do sistema fundamental.

Quando a função $f(x)$ é par, prefere-se usar o sistema de funções:

$$1, \cos x, \cos 2x, \dots$$

Quando a função $f(x)$ é ímpar, prefere-se usar o sistema: $\sin x, \sin 2x, \dots$

Nestes dois últimos casos, o mesmo desenvolvimento aqui adotado é aplicável.

Quando os pontos forem igualmente espaçados, as fórmulas interpoladoras tornar-se-ão mais simples. Este problema será tratado posteriormente no Capítulo XVIII.

O cálculo do termo corretivo para interpolação de funções periódicas é bastante laborioso, devido à complexidade das derivadas das funções $\psi_i(x)$.

Pode-se mostrar facilmente que as derivadas das funções $\psi_i(x)$ podem ser colocadas na forma:

$$\psi_i^{(p)}(x) = F_{i,p}(x) \psi_i(x),$$

onde as funções $F_{i,p}(x)$ são calculadas pelo esquema de recorrência:

$$\begin{cases} F_{i,1}(x) = 1/2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{2N+1} \cot \left(\frac{x-x_k}{2} \right) \\ F_{i,p}'(x) = F_{i,p-1}'(x) + F_{i,1}(x) F_{i,p-1}(x), & p > 2 \end{cases}$$

Neste caso, o cálculo do termo corretivo, $E(x)$, pode ser efetuado da seguinte maneira:

$$E(x) = \frac{f^{(2N)}(\xi) - \phi^{(2N)}(\xi)}{(2N)!} \prod_{i=1}^{2N+1} (x-x_i)$$

15.9 - INTERPOLAÇÃO INVERSA

O problema de interpolação inversa consiste em encontrar o valor x do argumento que produziu o valor $v=f(x)$ da função. Quando existem vários argumentos $x_i, i=1, \dots, n$, que produzem o mesmo valor v , o problema não admite solução única. A Figura 15.1 esquematiza o processo.

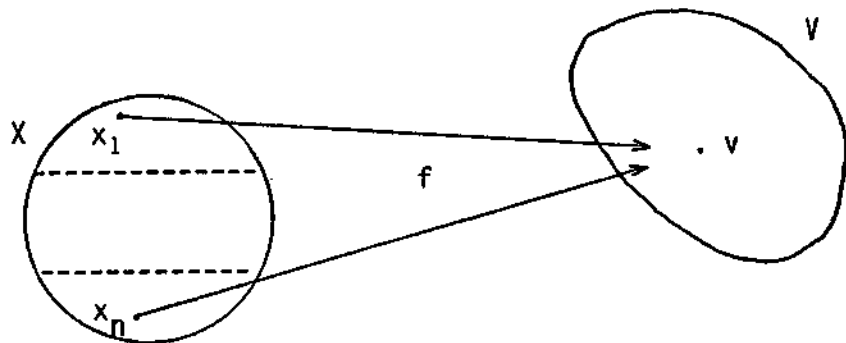


Fig. 15.1 - Interpolação inversa.

No caso de multiplicidade de argumentos, para o mesmo valor da função, há uma perda de informação quando se faz o mapeamento $X \rightarrow V$. Para que o mapeamento inverso seja possível, informações adicionais devem ser acrescentadas, a fim de que se possa identificar o particular valor de x_i , que produziu v .

Resolve-se o problema da interpolação inversa, dividindo-se o conjunto X em partições disjuntas, X_i , cujos mapeamentos V_i estão em correspondência biunívoca, V_i subconjuntos do conjunto V . Formalmente, escreve-se:

$$\left. \begin{array}{l} X = \bigcup_i X_i \\ X_i \rightleftharpoons V_i \\ V = \bigcup_i V_i \end{array} \right\} i=1, \dots, n$$

$$X_i \cap X_j = \phi, \quad i \neq j$$

Pela própria natureza do problema, segue-se que:

$$V_1 \cap V_2 \cap \dots \cap V_n \neq \phi.$$

Para que exista correspondência biunívoca entre uma partição X_i e seu mapeamento V_i , é necessário que a derivada $\frac{dv}{dx}$ não mude de sinal e se anule no máximo em um único ponto, quando $x \in X_i$.

Em toda a partição X_i de correspondência biunívoca com um mapeamento V_i , a interpolação inversa possui solução única. As técnicas de interpolação direta, aqui apresentadas, podem então ser usadas, bastando considerar os valores do argumento como função, e os valores da função como argumento.

A interpolação inversa pode também ser efetuada pelos métodos para solução de equações, que serão apresentados nos Capítulos XX e XXI.

15.10 - EXTRAPOLAÇÃO

O problema de extrapolação caracteriza a necessidade de determinar valores de $f(x)$ para x fora do intervalo $[a,b]$, definido pelo conjunto de pontos $\{x_j\}$, para os quais se conhece $f(x_j)$.

Examinada do ponto de vista de uma extensão do problema de interpolação, a extrapolação pode ser considerada como o problema de determinar a fórmula de Taylor para a função $f(x)$, dados $f(x_j)$. Assim, as fórmulas interpoladoras são também a solução para o problema de extrapolação.

Alguns cuidados são necessários para obter resultados satisfatórios em extrapolação. As indicações abaixo auxiliam neste aspecto:

- . Quando a função $f(x)$ é periódica, deve-se usar a função interpoladora trigonométrica da Seção 15.8.
- . Quando $x < a$, devem-se usar fórmulas de interpolação de maior precisão no início do intervalo.
- . Quando $x > b$ deve-se usar a fórmula de maior precisão no fim do intervalo.
- . Quando não se tem idéia da posição relativa de x com respeito ao intervalo $[a,b]$, devem ser adotadas as fórmulas de maior precisão no meio do intervalo.
- . Para sequências temporais, em que outras informações sobre o sistema são conhecidas, o problema se inclui num contexto mais generalizado com o nome de "previsão", para a qual foram desenvolvidas técnicas particularizadas. Este assunto não será discutido no presente trabalho.

15.11 - INTERPOLAÇÃO GENERALIZADA - CONCORDÂNCIA

Definição - Diz-se que duas curvas, C_1 e C_2 , estão em concordância num ponto x_c , quando elas se encontram em x_c , e a transição de C_1 para C_2 e vice versa não é abrupta em x_c . A Figura 15.2 ilustra esta definição.

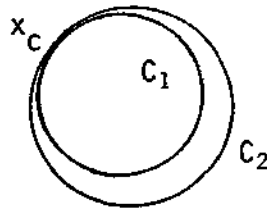


Fig. 15.2 - Curvas em concordância.

Matematicamente, o conceito de concordância se formula de uma maneira simples. Considere-se a curva C_1 descrita por um relacionamento $v=f_1(x)$, e a curva C_2 descrita por $v=f_2(x)$. Diz-se que há concordância das curvas num ponto x_c se:

- a) $f_1(x_c) = f_2(x_c)$ e
- b) $f_1'(x_c) = f_2'(x_c)$.

A extensão desta formulação para identidade, no ponto x_c , das derivadas de ordem superior generaliza o conceito de concordância.

15.11.1 - INTERPOLAÇÃO POR FUNÇÕES CONCORDANTES

Existem dois casos de especial interesse para a interpolação por funções concordantes:

- 1) A função $f(x)$, que se deseja interpolar, é conhecida, bem como algumas de suas derivadas para um conjunto de pontos $\{x_j\}$ pertencentes a um intervalo $[a, b]$.

2) A função $f(x)$, que se deseja interpolar, é conhecida para um conjunto de pontos $\{x_j\}$ pertencentes a um intervalo $[a, b]$, e a função interpoladora $\phi(x)$ é dada pela união de uma coleção $\phi_i(x)$, definidas em intervalos I_i disjuntos entre si, mas cuja união é o intervalo $[a, b]$.

No primeiro caso, destaca-se pela sua importância o polinômio interpolador de Hermite.

No segundo caso, as funções interpoladoras por trechos, concordantes entre si nos pontos x_j e conhecidas pelo seu nome em inglês "Spline", constituem uma solução de destaque.

15.11.2 - POLINÔMIO INTERPOLADOR DE HERMITE

Considerem-se os valores das funções e suas derivadas até a ordem $m_j - 1$, para cada um dos pontos x_j de um conjunto $\{x_j\}$, $j=1, \dots, N$. Deseja-se determinar a função interpoladora $\phi(x)$, que reproduz exatamente a função $f(x)$ e suas derivadas para os pontos do conjunto $\{x_j\}$.

A função interpoladora $\phi(x)$ é a combinação de funções $\phi_i(x)$ pertencentes a um sistema Tchebyshev, podendo-se determinar outras combinações lineares $\psi_{ki}(x)$, tais que:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^{m_i-1} f^{(k)}(x_i) \psi_{ki}(x)$$

onde $\psi_{ki}(x)$ satisfaz:

$$\psi_{ki}^{(r)}(x_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \text{ ou } k \neq r \\ 1 & i = j \text{ e } k = r \end{cases}$$

Pela sua utilização em computadores, apresentar-se-á o caso em que a função ϕ_i é um polinômio conhecido pelo nome de polinômio de Hermite.

1) Construção do polinômio interpolador

A primeira consideração sobre a construção do polinômio interpolador de Hermite diz respeito ao grau do polinômio. Consequentemente, esse grau, o maior que cada uma das funções $\psi_{ki}(x)$ pode ter é:

$$m = \left(\sum_{i=1}^N m_i \right) - 1$$

Para satisfazer o primeiro conjunto de restrições sobre $\psi_{ki}(x)$, ou seja:

$$\psi_{ki}^{(r)}(x_j) = 0, \quad i \neq j, \quad r=1, \dots, m_j-1,$$

deve-se ter a forma:

$$\psi_{ki}(x) = \left[\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (x-x_j)^{m_j} \right] P_{m_i-1}(x),$$

onde $P_{m_i-1}(x)$ é um polinômio de grau m_i-1 .

Para satisfazer o segundo conjunto de restrições sobre $\psi_{ki}(x)$, ou seja:

$$\psi_{ki}^{(r)}(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{se } k \neq r \\ 1 & \text{se } k=r \end{cases}$$

condições serão impostas ao polinômio $P_{m_i-1}(x)$.

Para $r < k$, a condição $\psi_{ki}^{(r)}(x) = 0$ será satisfeita, se o polinômio $P_{m_i-1}(x)$ for colocado na forma:

$$P_{m_i-1}(x) = (x-x_i)^k P_{m_i-k-1}(x).$$

Para satisfazer a condição $\psi_{ki}^{(k)}(x_i) \neq 0$, o polinômio $P_{m_i-k-1}(x)$ não pode se anular para $x=x_i$. Esse polinômio será representado por:

$$P_{m_i-k-1}(x) = a_0 + \dots + a_{m_i-k-1} (x-x_i)^{m_i-k-1} \quad \text{com } a_0 \neq 0.$$

Para determinar os coeficientes a_j ; será usada a notação:

$$\pi_m(x) = (x-x_1)^{m_1} (x-x_2)^{m_2} \dots (x-x_N)^{m_N},$$

de onde se obtêm:

$$\psi_{ki}(x) = \frac{\pi_m(x)}{(x-x_i)^{m_i-k}} P_{m_i-k-1}(x)$$

Assim, $P_{m_i-k-1}(x)$ pode ser escrito como:

$$P_{m_i-k-1}(x) = \frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \frac{\psi_{ki}(x)}{(x-x_i)^k},$$

e os coeficientes a_j serão calculados por:

$$a_j = \frac{1}{j!} \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{d^j}{dx^j} \left[\frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \frac{\psi_{ki}(x)}{(x-x_i)^k} \right]$$

O coeficiente a_0 pode ser imediatamente calculado e vale:

$$a_0 = \left[\frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \right]_{x=x_i} \lim_{x \rightarrow x_i} \left[\frac{\psi_{ki}(x)}{(x-x_i)^k} \right],$$

onde o limite é obtido pela regra de l'Hôpital, resultando em:

$$a_0 = \frac{1}{k!} \left[\frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \right]_{x=x_i}$$

Para efetuar o cálculo dos outros coeficientes, a função dentro dos colchetes será decomposta em duas parcelas:

$$f_1(x) = \frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \quad e$$

$$f_2(x) = \frac{\psi_{ki}(x)}{(x-x_i)^k}$$

As derivadas serão obtidas, usando-se a regra Leibnitz:

$$\frac{d^j}{dx^j} [f_1(x) f_2(x)] =$$

$$\sum_{p=0}^j C_{j,p} [f_1(x)]^{(p)} [f_2(x)]^{(j-p)}$$

As derivadas de $f_1(x)$ são todas contínuas no ponto $x=x_i$.

Assim:

$$\left[f_1(x) \right]_{x=x_i}^{(p)} = \left[\frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \right]_{x=x_i}^{(p)}$$

Para calcular o limite das derivadas de f_2 , quando $x \rightarrow x_i$, basta lembrar que $\psi_{ki}(x)$ é exatamente divisível por $(x-x_i)^k$, pela própria forma em que foram construídas. Então:

$$f_2(x) = Q_{m-k}(x),$$

onde:

$Q_{m-k}(x)$ é um polinômio de grau $m-k$, podendo ser escrito como:

$$Q_{m-k}(x) = b_0 + \dots + b_{m-k}(x-x_i)^{m-k}$$

Então, o limite das derivadas de $f_2(x)$, quando $x \rightarrow x_i$, vale:

$$\lim_{x \rightarrow x_i} [f_2(x)]^{(j-p)} = (j-p)! b_{j-p}$$

Para encontrar b_{j-p} basta observar que:

$$\psi_{ki}(x) = b_0(x-x_i)^k + \dots + b_{m-k}(x-x_i)^m,$$

de onde:

$$\psi_{ki}^{(k+j-p)}(x_i) = (k+j-p)! b_{j-p},$$

como:

$$\psi_{ki}^{(r)}(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{se } r=k \\ 0 & \text{se } r \neq k \end{cases}$$

assim, o único coeficiente não-nulo ocorre quando $p=j$ e vale:

$$b_0 = \frac{1}{k!}$$

Dessa maneira:

$$\lim_{x \rightarrow x_i} \left[f_2(x) \right]^{(j-p)} = \frac{1}{k!}$$

e, finalmente:

$$a_j = \frac{1}{j!k!} \left[\frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \right]_{x=x_i}^{(j)}$$

Então, a forma completa para a função $\psi_{k_i}(x)$ torna-se:

$$\psi_{k_i}(x) = \frac{1}{k!} \frac{\pi_m(x)}{(x-x_i)^{m_i-k}} \sum_{j=0}^{m_i-k-1} \frac{1}{j!} \left[\frac{(x-x_i)^{m_i}}{\pi_m(x)} \right]_{x=x_i}^{(j)} (x-x_i)^j$$

A função interpoladora de Hermite será dada por:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^{m_i-1} f^{(k)}(x_i) \psi_{k_i}(x)$$

2) Termo corretivo do polinômio interpolador

As mesmas considerações feitas para estabelecer o termo corretivo da fórmula interpoladora (Seção 15.4) são válidas no caso da interpolação generalizada. Assim, pode-se escrever a fórmula interpoladora de Hermite da seguinte forma:

$$f(x) = \phi(x) + e(x),$$

onde:

$$e(x) = K \pi_m(x).$$

O valor de K , determinado da mesma maneira que na Seção 15.4 será:

$$K = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}$$

15.11.3 - FUNÇÕES CONCORDANTES POR TRECHOS - "SPLINES"

Considerem-se conhecidos os valores de $f(x)$ para um conjunto de pontos $\{x_j\}$, $j=1, \dots, N$. Para cada intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ deseja-se interpolar $f(x)$ por meio de um polinômio de grau $m < N-1$.

Impõe-se, ainda, a condição de que os polinômios sejam concordantes entre si. A solução para este problema são as funções "Spline".

As funções "Spline", $S(x)$, de grau m , são caracterizadas por duas propriedades:

$S(x)$ é dada nos intervalos $[x_i, x_{i+1}]$, $i=0, \dots, N$, sendo $x_0 = -\infty$ e $x_{N+1} = +\infty$, por meio de algum polinômio de grau menor ou igual a m .

$S(x)$ e suas derivadas de ordem $1, \dots, N-1$ são contínuas em $(-\infty, +\infty)$.

Uma função "Spline" de grau ímpar, $2K-1$, é dita "natural", se, além das duas condições anteriores, satisfazer a seguinte condição adicional:

$S(x)$ reduz-se a um polinômio de grau $K-1$, em cada um dos intervalos $(-\infty, x_1)$ e (x_n, ∞) . Os polinômios de grau $K-1$ são, em geral, diferentes para cada um desses dois intervalos.

1) Determinação da função interpoladora

Tratar-se-á somente do caso da "spline" de terceiro grau, por ser ele o de maior utilidade prática. Impor-se-á a condição do polinômio ser uma "spline" natural". Assim, fora do intervalo $[x_1, x_N]$, deve-se ter um polinômio do primeiro grau.

Chamando a "spline" de $s(x)$, pela condição de continuidade da segunda derivada, tem-se:

$$s''(x_1) = s''(x_N) = 0,$$

pois, fora do intervalo $[x_1, x_N]$, o polinômio é do primeiro grau.

A imposição de $s(x)$ reproduzir $f(x)$ para o conjunto de pontos $\{x_j\}$ fornece:

$$s(x_i) = f(x_i) \quad i=1, \dots, N$$

A fórmula de Newton para interpolação linear no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ é:

$$s(x) = s(x_i) + (x-x_i) s[x_i, x_{i+1}] + (x-x_i)(x-x_{i+1}) s[x_i, x_{i+1}, x].$$

Nesta fórmula, o último termo é a correção da interpolação linear. Neste termo, não se conhece o valor de $s[x_i, x_{i+1}, x]$. Para determiná-lo, desenvolve-se $s(x)$ em série de Taylor a partir de $x=x_i$, obtendo-se:

$$s(x) = s(x_i) + (x-x_i) s'(x_i) + \frac{(x-x_i)^2}{2!} s''(x_i) + \frac{(x-x_i)^3}{3!} s'''(x_i),$$

pois sendo $s(x)$ um polinômio do terceiro grau, $s^{(4)}(x) = 0$.

As fórmulas de diferenças relativas permitem escrever a expressão acima da seguinte forma:

$$s[x_i, x] = s'(x_i) + \frac{(x-x_i)}{2!} s''(x_i) + \frac{(x-x_i)^2}{3!} s'''(x_i)$$

Como $s(x)$ é um polinômio do terceiro grau, $s''(x)$ é linear e pode ser expressa pela fórmula de interpolação de Newton, para o intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, como:

$$s''(x) = s''(x_i) + (x-x_i) s''[x_i, x_{i+1}],$$

de onde:

$$s'''(x) = s''[x_i, x_{i+1}] = \text{constante.}$$

O desenvolvimento de Taylor transforma-se, então, em:

$$s[x_i, x] = s'(x_i) + \frac{1}{2} (x-x_i) s''(x_i) + \frac{1}{6} (x-x_i)^2 s''[x_i, x_{i+1}].$$

Para $x = x_{i+1}$, segue-se que:

$$s[x_i, x_{i+1}] = s'(x_i) + \frac{1}{2} (x_{i+1}-x_i) s''(x_i) + \frac{1}{6} (x_{i+1}-x_i)^2 s''[x_i, x_{i+1}].$$

A diferença entre estas duas últimas equações fornece o valor de $s[x_i, x_{i+1}, x]$ desejado:

$$s[x_i, x_{i+1}, x] = \frac{1}{2} s''(x_i) + \frac{1}{6} [(x-x_i) + (x_{i+1}-x_i)] s''[x_i, x_{i+1}]$$

Usando-se a expressão de $s''(x)$, obtêm-se:

$$s[x_i, x_{i+1}, x] = \frac{1}{2} s''(x_i) + \frac{1}{6} [s''(x) - s''(x_i) + s''(x_{i+1}) - s''(x_i)],$$

e reagrupando-se os termos, tem-se:

$$s[x_i, x_{i+1}, x] = \frac{1}{6} [s''(x) + s''(x_i) + s''(x_{i+1})]$$

Nesta expressão são desconhecidos os valores de $s''(x_i)$ e $s''(x_{i+1})$. Para obtê-los, retoma-se o valor de $s[x_i, x_{i+1}]$, que pode ser escrito usando-se a expressão linear de $s''(x)$, como:

$$s[x_i, x_{i+1}] = s'(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)}{6} [2s''(x_i) + s''(x_{i+1})]$$

Para o intervalo anterior $[x_{i-1}, x_i]$, usando-se a relação de simetria das diferenças relativas, escreve-se essa expressão da seguinte forma:

$$s[x_{i-1}, x_i] = s'(x_i) + \frac{(x_{i-1} - x_i)}{6} [2s''(x_i) + s''(x_{i-1})]$$

Multiplicando-se as duas últimas expressões por 6 e subtraindo-as membro a membro, segue-se que:

$$6[s[x_i, x_{i+1}] - s[x_{i-1}, x_i]] = (x_i - x_{i-1}) s''(x_{i-1}) +$$
$$+ 2(x_{i+1} - x_{i-1}) s''(x_i) + (x_{i+1} - x_i) s''(x_{i+1})$$

$$i = 2, \dots, N-1$$

O lado esquerdo da equação acima pode ser facilmente calculado a partir dos valores da função $f(x)$, para os pontos x_i , para os quais $f(x_i)$ é conhecido, uma vez que foi imposta a condição:

$$s(x_i) = f(x_i)$$

Assim, tem-se um sistema de $N-2$ equações, cujas incógnitas são os $s''(x_i)$, $i=1, \dots, N$. A matriz \underline{A} de coeficientes é simétrica e tridiagonal. Pode-se decompô-la em duas matrizes: $\underline{A} = \underline{D} + \underline{C}$, onde \underline{D} é uma matriz diagonal e \underline{C} é o complemento. O sistema do tipo $\underline{A} \underline{u} = \underline{d}$ transforma-se, então, num sistema do tipo:

$$\underline{u} = - \underline{B} \underline{u} + \underline{g},$$

onde $\underline{B} = \underline{D}^{-1} \underline{C}$ e $\underline{g} = \underline{D}^{-1} \underline{d}$. Este sistema é conveniente do ponto de vista computacional e facilmente resolvido pelos métodos de iteração ou de relaxação. Como se tem $N-2$ equações e N incógnitas é necessário encontrar mais duas equações para que o sistema admita solução. Conforme mostrado anteriormente, $s''(x_1) = s''(x_N) = 0$ completa o sistema.

Determinados os valores de $s''(x_i)$, $i=1, \dots, N$, que são os únicos elementos remanescentes na indeterminação de $s[x_i, x_{i+1}, x]$, a fórmula interpoladora de Newton para o intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ está completa.

A função interpoladora $\phi(x)$ para o intervalo $[a, b]$ é dada pela união das $s(x)$, definidas para os intervalos disjuntos $[x_i, x_{i+1}]$.

2) Erro Máximo do Método

O cálculo do erro introduzido pelo uso da função "spline" envolve a prévia demonstração de um teorema e de um lema.

Teorema - Se f e g possuem derivadas de segunda ordem em $[a, b]$, s é a função spline de f com $s''(a) = s''(b) = 0$ e $g(x_i) = s(x_i) = f(x_i)$ para $i = 1, \dots, N$, então:

$$\int_a^b (g'')^2 dx = \int_a^b (g'' - s'')^2 dx + \int_a^b (s'')^2 dx$$

Prova

$$\int_a^b (g'')^2 dx = \int_a^b (g'' - s'')^2 dx + 2 \int_a^b (g'' - s'') s'' dx + \int_a^b (s'')^2 dx$$

Integrando-se por trechos:

$$\int_a^b s''(g'' - s'') dx = \sum_{i=1}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} s''(g'' - s'') dx$$

Usando-se a integração por partes em cada intervalo, resulta:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} s''(g'' - s'') dx = (g' - s') s'' \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} - \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g' - s') s''' dx$$

Mas, como $s''(a) = s''(x_1) = s''(b) = s''(x_N) = 0$:

$$\sum_{i=1}^{N-1} (g' - s') s'' \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = 0$$

Por outro lado, s''' é constante em cada intervalo, logo:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (g' - s') s''' dx = C_i \int_{x_i}^{x_{i+1}} (g' - s') dx = C_i [g - s]_{x_i}^{x_{i+1}} = 0,$$

pois $g(x_{i+1}) = s(x_{i+1})$ e $g(x_i) = s(x_i)$,

logo:

$$\int_a^b (g'')^2 dx = \int_a^b (g'' - s'')^2 dx + \int_a^b (s'')^2 dx \geq \int_a^b (s'')^2 dx ,$$

que mostra a propriedade da função spline ser a mais harmoniosa, no sentido de menor quadrado da derivada de ordem K (no caso de ordem 2).

Lema - Seja g uma função que possui pelo menos um zero em $[a, b]$ e g' contínua em $[a, b]$, então:

$$\text{Max}_{[a, b]} |g(x)| \leq \left[|b-a| \int_a^b (g')^2 dt \right]^{1/2}$$

Prova - A função $g(x)$ pode ser escrita como:

$$g(x) = \int_{\xi_0}^x g'(t) dt$$

onde ξ_0 é o ponto tal que $g(\xi_0) = 0$.

Pela desigualdade de Schwarz, segue-se que:

$$\begin{aligned} |g(x)| &\leq \int_{\xi_0}^x |g'(t)| dt \leq \left[\int_{\xi_0}^x [g'(t)]^2 dt \int_{\xi_0}^x dt \right]^{1/2} \leq \\ &\leq \left[|b-a| \int_a^b (g')^2 dt \right]^{1/2} \end{aligned}$$

Cálculo de erro

Considere-se primeiramente a expressão que permite calcular a segunda derivada da função "spline":

$$\begin{aligned} & (x_i - x_{i-1}) s''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1}) s''(x_i) + (x_{i+1} - x_i) s''(x_{i+1}) = \\ & = 6 \left[s[x_i, x_{i+1}] - s[x_{i-1}, x_i] \right] \end{aligned}$$

Para a dedução dessa expressão são conhecidos os $s(x_i) = f(x_i)$. Por outro lado, se nessas expressões forem impostas $s''(x_i) = f''(x_i)$, resultam os valores de $s(x_i)$ diferentes dos valores de $f(x_i)$. Chamando-se de $y(x)$ a função "spline", para a qual $y''(x_i) = f''(x_i)$, tem-se que a função $s(x) - y(x)$ é a "spline" interpoladora para a função $f(x) - y(x)$. Pelo teorema anterior, segue-se que:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f'' - y'')^2 dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f'' - s'')^2 dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} (s'' - y'')^2 dx \geq$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f'' - s'')^2 dx$$

A função y'' pode ser considerada como o polinômio interpolador de Lagrange de f'' em $[x_i, x_{i+1}]$. Como mostrado para o caso de interpolação de Lagrange, o erro $f'' - y''$ deve ser nulo para $x = x_i$ e $x = x_{i+1}$, tendo assim a forma:

$$f'' - y'' = k (x - x_i) (x - x_{i+1})$$

e, mais ainda, sendo y'' linear, o valor de k será dado por:

$$k = \frac{f^{(4)}(\xi)}{2}, \quad \xi \in [x_i, x_{i+1}]$$

Logo:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f''-y'')^2 dx \leq \text{Max}_{[x_i, x_{i+1}]} \frac{|f^{(4)}(x)|^2}{4} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1})^2 dx$$

Chamando-se $M = \text{Max}_{[x_i, x_{i+1}]} \frac{|f^{(4)}(x)|}{2}$, tem-se:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f''-y'')^2 dx \leq \frac{M^2}{4} \left[\frac{(x_{i+1}-x_i)^5}{30} \right]$$

de onde:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f''-s'')^2 dx \leq \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f''-y'')^2 dx \leq \frac{M^2}{120} (x_{i+1}-x_i)^5$$

Como $s(x_i) = f(x_i)$ e $s(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$, pelo teorema de Rolle, $(f'-s')$ anula-se em pelo menos um ponto para cada intervalo $[x_i, x_{i+1}]$. Aplicando-se o lema para cada intervalo, tem-se:

$$\text{Max}_{[x_i, x_{i+1}]} |f'-s'| \leq \frac{M}{\sqrt{120}} (x_{i+1}-x_i)^3,$$

segue-se que:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (f'-s')^2 dx \leq \frac{M^2}{120} (x_{i+1}-x_i)^7$$

Como $s(x_i) = f(x_i)$, a função $f-s$ anula-se pelo menos uma vez em $[x_i, x_{i+1}]$. Logo, aplicando-se novamente o lema, resulta:

$$\text{Max}_{[x_i, x_{i+1}]} |f(x) - s(x)| \leq \frac{M}{\sqrt{120}} (x_{i+1} - x_i)^4 ,$$

que é o limite do erro procurado.

EXERCÍCIOS

1. Pela definição de extensão de uma função (Capítulo II, Exercício 2), se $\phi(x)$ é uma extensão de $f(x)$, qual a condição que deve satisfazer o resíduo:

$$r(x) = \phi(x) - f(x),$$

para todo x pertencente ao conjunto comum às duas funções?

2. Se cada ponto do conjunto de N pontos $\{x_j\}$ constitui uma propriedade de um espaço vetorial, serão necessário pelo menos N vetores \underline{v}_i , $i=1, \dots, N$ para caracterizar o espaço vetorial. Em termos das componentes $\phi_i(x_j)$, os vetores \underline{v}_i serão dados por

$$\begin{aligned} \underline{v}_1 &= \phi_1(x_1) \bar{x}_1 + \dots + \phi_1(x_N) \bar{x}_N \\ &\vdots \\ &\vdots \\ \underline{v}_N &= \phi_N(x_1) \bar{x}_1 + \dots + \phi_N(x_N) \bar{x}_N \end{aligned}$$

Estabeleça a condição para que os vetores sejam linearmente independentes, e compare os resultados com a condição da Seção 15.2.

3. Generalize o resultado do Exercício 2 para o caso em que os x_j podem assumir qualquer valor dentro de um intervalo $\{a, b\}$. Compare o resultado com a condição da Seção 15.3 para sistemas de Tchebyshev.

4. Mostre que:

$$\psi_i(x) = \frac{D_i}{D}$$

onde:

$$D = \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_N(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \dots & \phi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

$$D_i = \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \dots & \phi_N(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x) & \dots & \phi_N(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \dots & \phi_N(x_N) \end{vmatrix} \text{ linha } i$$

5. Demonstre a identidade dos polinômios interpoladores de Newton e de Lagrange.

6. Mostre que para pontos igualmente espaçados:

$$f[x_1, \dots, x_N] = \frac{\Delta^{N-1} f_1}{(N-1)! h^{N-1}}$$

7. Mostre que o termo corretivo da fórmula de Newton torna-se

$$E(x) = \frac{j^{\frac{N}{j-1}} (t-j-1)}{N!} h^N f^{(N)}(\xi),$$

para o caso de diferenças progressivas e pontos igualmente espaçados.

8. Usando a simetria das diferenças relativas, mostre que:

$$f[z_0, \dots, z_0 + nh, z_0 - nh] = \frac{\delta^{2n} f_0}{(2n)! h^{2n}}$$

$$f[z_0, \dots, z_0 + nh] = \frac{\delta^{2n-1} f_{1/2}}{(2n-1)! h^{2n-1}}$$

$$f[z_0, \dots, z_0 - nh] = \frac{\phi^{2n-1} f_{1/2}}{(2n-1)! h^{2n-1}}$$

9. Determine a forma do termo corretivo para as duas fórmulas de Gauss.
10. Determine a forma do termo corretivo da fórmula de interpolação de Stirling.
11. Seno $t = (x - z_0)/h$, mostre que: $E_t = t-1$
12. Determine a forma do termo corretivo de Bessel.
13. Usando um desenvolvimento análogo ao da primeira fórmula de Everett, determine a expressão da segunda fórmula de Everett.
14. Os valores de uma função $f(x)$ são conhecidos em 5 pontos igualmente espaçados x_1, \dots, x_5 . Dado um ponto x , cujas distâncias aos pontos x_i obedece a ordem crescente:

$$|x - x_3|, |x - x_4|, |x - x_2|, |x - x_5|, |x - x_1|,$$

escolha apenas 3 pontos para utilizar na fórmula de Newton, de modo que os termos considerados sejam os mais significativos.

15. Dada a tabela de valores de uma função $f(x)$, que se sabe ser periódica no intervalo $(0, 2\pi)$

x (rd)	f(x)
0.60	0.68414
0.61	0.69892
0.62	0.71391
0.63	0.72911
0.64	0.74454

encontre a fórmula interpoladora para $f(x)$, e calcule a estimativa do termo corretivo.

16. Repita o exercício anterior com interpolação polinomial, desprezando, assim, a informação de que a função é periódica. Dê uma estimativa do termo corretivo e compare com o exercício anterior.

17. Mostre que a derivada da função $\phi_i(x)$, para o caso de interpolação periódica, vale:

$$\psi_i'(x) = 1/2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{2N+1} \cot \frac{(x-x_k)}{2}$$

18. Mostre que, se $\psi_i^{(p)}(x) = F_{i,p}(x) \psi_i(x)$, então $F_{i,p}(x)$ é dada pela recorrência:

$$F_{i,p}(x) = F_{i,p-1}(x) + F_{i,1}(x) F_{i,p-1}(x).$$

19. Mostre que, quando $f(x) = \sin x$, para interpolação inversa, o número de partições num intervalo infinito é também infinito.

20. Escreva a função interpoladora de Hermite sabendo que, para um conjunto de N pontos x_1, \dots, x_N , os valores da função e de sua primeira derivada são conhecidos.

21. Estabeleça a forma do termo corretivo para a função interpoladora do exercício anterior.

22. Discuta a diferença do ponto de vista de erro das funções interpoladoras: de Newton e de splines para o mesmo grau.

BIBLIOGRAFIA

- BEREZIN, I.S.; ZHIDKOV, N.P. *Computing methods*. Reading, MA, Addison-Wesley, 1965.
- HAMMING, R.W. *Numerical methods for scientists and engineers*. New York, Mac Graw-Hill, 1962.
- HILDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis*. New York, Mac Graw-Hill, 1956.
- RALSTON, A. *A first course in numerical analysis*. New York, Mac Graw-Hill, 1964.
- RALSTON, A.; WILF, H.S. *Mathematical methods for digital computers*. New York, John Wiley, 1968. v.2.
- SCARBOROUGH, J.B. *Numerical mathematical analysis*. Baltimore, MD, Johns Hopkins Press, 1962.

CAPÍTULO XVI

DERIVAÇÃO NUMÉRICA

16.1 - INTRODUÇÃO

Caracteriza-se o problema de derivação numérica pela necessidade de determinar a derivada $f^{(K)}(x)$ de uma função $f(x)$, da qual se conhecem os valores para um conjunto de pontos $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, N$.

A solução para o problema é dada indiretamente, supondo-se que as derivadas da função interpoladora para $f(x)$ sejam uma boa aproximação para as derivadas de $f(x)$. Essa hipótese nem sempre é verdadeira, o que constitui uma limitação intrínseca para a derivação numérica. O método de diferenças finitas, não sendo um processo direto, é equivalente ao uso de uma prévia interpolação.

Os erros de arredondamento, de menor importância no caso da interpolação, também assumem papel de destaque no cálculo numérico de derivadas.

Apresentam-se, neste capítulo, apenas algumas formas de obtenção da primeira derivada. A extensão para derivadas de ordem superior, bem como o uso de diferentes métodos de interpolação, pode ser obtida adotando-se o mesmo procedimento aqui exemplificado.

16.2 - MÉTODO DE LAGRANGE PARA DERIVAÇÃO

Chamando-se de $L(x)$ a função interpoladora de Lagrange e de $E(x)$ o seu termo corretivo, pode-se escrever:

$$f(x) = L(x) + E(x)$$

com:

$$L(x) = \sum_{i=1}^N \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} f(x_i)$$

e:

$$E(x) = \left[\prod_{i=1}^N (x - x_i) \right] \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}$$

sendo a derivada de $f(x)$ dada por:

$$f'(x) = L'(x) + E'(x)$$

e:

$$L'(x) = \sum_{i=1}^N \left[\prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{1}{(x_i - x_k)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i \\ j \neq k}}^N \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right] f(x_i)$$

O cálculo de $E'(x)$ é mais complexo, uma vez que o valor de ξ depende do particular valor de x considerado, lembrando-se, entre tanto, que:

$$f^{(N)}(\xi) = N! f[x_1, \dots, x_N, x]$$

tem-se:

$$\frac{1}{N!} \frac{d}{dx} \left[f^{(N)}(\xi) \right] = f[x_1, \dots, x_N, x, x] = \frac{f^{(N+1)}(\eta)}{(N+1)!}$$

onde η é um valor compreendido no intervalo definido pelo conjunto de pontos $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, N$, então:

$$E'(x) = \left[\sum_{i=1}^N \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (x - x_j) \right] \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} +$$

$$+ \left[\prod_{i=1}^N (x - x_i) \right] \frac{f^{(N+1)}(\eta)}{(N+1)!}$$

16.3 - MÉTODO DE NEWTON PARA DERIVAÇÃO

Analogamente ao caso anterior, chamando-se de $N(x)$ o polinômio interpolador de Newton e de $E(x)$ o termo corretivo, escreve-se:

$$f(x) = N(x) + E(x)$$

$$f'(x) = N'(x) + E'(x)$$

onde:

$$N(x) = \sum_{i=1}^N \left[\prod_{j=1}^{i-1} (x - x_j) \right] f[x_1, \dots, x_i]$$

$$E(x) = \prod_{i=1}^N (x - x_i) f[x_1, \dots, x_N, x] =$$

$$= \left[\prod_{i=1}^N (x - x_i) \right] \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}$$

então:

$$N'(x) = \sum_{i=1}^N \left[\sum_{k=1}^{i-1} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{i-1} (x - x_j) \right] [x_1, \dots, x_i]$$

e:

$$E'(x) = \left[\sum_{k=1}^N \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N (x - x_i) \right] \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} +$$

$$+ \left[\prod_{i=1}^N (x - x_i) \right] \frac{f^{(N+1)}(\eta)}{(N+1)!}$$

que é o mesmo termo corretivo do método de Lagrange.

16.4 - MÉTODO DAS "SPLINES" PARA DERIVAÇÃO

Viu-se no capítulo anterior o processo de interpolação que usa as funções "spline". Especificamente, para o caso de uma "spline" cúbica no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, obteve-se:

$$S(x) = S(x_i) + (x - x_i) S[x_i, x_{i+1}] +$$

$$+ (x - x_i)(x - x_{i+1}) S[x_i, x_{i+1}, x]$$

com:

$$S[x_i, x_{i+1}, x] = \frac{1}{6} [S''(x_i) + S''(x_{i+1}) + S''(x)]$$

e:

$$s''(x) = S''(x_i) + (x - x_i) S''[x_i, x_{i+1}]$$

Derivando-se $S(x)$, resulta:

$$S'(x) = S[x_i, x_{i+1}] + [(x - x_i) + (x - x_{i+1})] S[x_i, x_{i+1}, x] + (x - x_i)(x - x_{i+1}) S'[x_i, x_{i+1}, x]$$

como:

$$S'[x_i, x_{i+1}, x] \doteq \frac{S''(x)}{6} = \frac{S''[x_i, x_{i+1}]}{6}$$

tem-se:

$$S'(x) = S[x_i, x_{i+1}] + [2x - (x_i + x_{i+1})] S[x_i, x_{i+1}, x] + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{6} S''[x_i, x_{i+1}]$$

Do mesmo modo que para o caso de interpolação, obtêm-se o valor dos $s''(x_i)$ resolvendo-se um sistema de M equações simultâneas. Conhecidos os $s''(x_i)$, o valor de $s[x_i, x_{i+1}, x]$ está determinado, e a expressão para $s'(x)$ pode ser calculada.

O erro da expressão acima foi calculado no Capítulo XV, sobre interpolação, e é limitado por:

$$\text{Max}_{[x_i, x_{i+1}]} |f'(x) - S'(x)| \leq \frac{M}{\sqrt{120}} (x_{i+1} - x_i)^3$$

16.5 - CÁLCULO DA DERIVADA COM O USO DE DIFERENÇAS FINITAS

A derivada também pode ser calculada usando-se uma tabela de diferenças finitas. Para isto, por exemplo, basta lembrar a relação entre o operador $D = h \frac{d}{dx}$ e o operador Δ , assim:

$$D = \ln(1 + \Delta)$$

$$hu'_x = Du_x = [\ln(1 + \Delta)]u_x$$

de onde, desenvolvendo-se $\ln(1 + \Delta)$ em s\u00e9rie de Taylor, tem-se:

$$hu'_x = \left[\Delta - \frac{\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^3}{3} - \dots \right] u_x$$

O erro no c\u00e1lculo da derivada, neste caso, \u00e9 dado pelo truncamento da s\u00e9rie acima e vale:

$$E = \frac{\Delta^n u_x}{nh}$$

16.6 - ERROS INTRODUZIDOS PELO COMPUTADOR

A execu\u00e7\u00e3o do c\u00e1lculo das derivadas em computador introduz, adicionalmente aos erros dos m\u00e9todos, erros de arredondamento, os quais neste caso assumem consider\u00e1vel import\u00e2ncia.

Para que o leitor possa visualizar melhor o problema, as f\u00f3rmulas de deriva\u00e7\u00e3o s\u00e3o reescritas numa forma mais conveniente. Assim, tem-se:

a) F\u00f3rmula de Lagrange

$$L'(x) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{(x - x_k)} L(x).$$

b) F\u00f3rmula de Newton

$$N'(x) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{(x - x_k)} N(x).$$

Calculados numericamente, $L(x)$ e $N(x)$ são afetados por erros de arredondamento ou truncamento, passando a:

$$L(x) + R(x) \text{ e } N(x) + R(x),$$

onde:

$R(x)$ reflete o efeito nos cálculos da limitação do número de dígitos do computador. Representando-se simbolicamente por $R'(x)$ esse efeito no cálculo das derivadas, pelas fórmulas acima, resulta a relação:

$$R'(x) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{(x - x_k)} R(x),$$

que mostra claramente a amplificação do erro $R(x)$, quando x está próximo de um particular valor x_m .

A "spline", sendo derivada da fórmula de Newton para cada intervalo, obedece à mesma regra de amplificação de erro.

No caso da derivada ser calculada com o uso de diferenças finitas, o fator $1/h$ é responsável pela amplificação dos erros.

A escolha da fórmula para derivação requer a minimização dos erros introduzidos pelo computador. Neste caso, espera-se que a fórmula de Lagrange apresente ligeira vantagem sobre as demais, quando suas parcelas forem calculadas na forma de quociente de dois polinômios. Esta vantagem desaparece, se a fórmula de Lagrange for calculada na forma de produtos de diferenças.

EXERCÍCIOS

1. Encontre a fórmula de Newton para derivação, usando diferenças progressivas e pontos igualmente espaçados.
2. Compare o resultado do Exercício 1 com o resultado do método de diferenças finitas, apresentado na Seção 16.5.
3. Usando o polinômio interpolador de Hermite, encontre a fórmula de derivação de Hermite.
4. Usando $f(x) = \sin x$ e cinco pontos igualmente espaçados no intervalo $[0, \pi]$, verifique a diferença entre as fórmulas de Newton e de Lagrange, para uma derivação numérica executada num computador. Use o ponto $x = 1,01 \pi/2$ para o teste.
5. Encontre a derivada numérica de funções periódicas, usando-se a função interpoladora para funções periódicas.

BIBLIOGRAFIA

BEREZIN, I.S.; ZHIDKOV, N.P. *Computing methods*. Reading, Addison
-Wesley, 1965.

HILDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis*. New York,
MacGraw-Hill, 1956.

RALSTON, A. *A first course in numerical analysis*. New York, MacGraw
-Hill, 1964.

RALSTON, A.; WILF, H.S. *Mathematical methods for digital computers*.
New York, Wiley, 1968. V. 2.

CAPÍTULO XVII

INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

17.1 - INTRODUÇÃO

A integração numérica foi uma necessidade verificada desde o aparecimento do cálculo integral. Isto porque os métodos analíticos são bastante complexos, mesmo no caso em que a função a ser integrada é relativamente simples.

O problema básico consiste em determinar-se o valor da integral de uma função $f(x)$, conhecida para um conjunto de pontos $\{x_i\}$, $i=1, \dots, N$. Neste caso, uma possível solução é dada pela integral da função interpoladora. Este tipo de solução, que apresenta restrições no caso de derivação numérica, é altamente conveniente no presente caso, pois apenas o comportamento médio da função tem interesse para a integral.

Para a integração numérica não existe um único método que possa ser aplicado sem restrições para todas as situações. Por essa razão apresenta-se, aqui, um conjunto dos métodos mais comumente encontrados nas aplicações práticas. Envidaram-se esforços no sentido de tornar este conjunto expressivo, uma vez que, dada a extensão do assunto, uma exposição significativa da grande quantidade de métodos existentes torna-se impraticável.

17.2 - MÉTODOS BASEADOS NO POLINÔMIO INTERPOLADOR DE LAGRANGE

Usando-se a mesma notação do Capítulo XVI, a função $f(x)$, pode ser substituída por $L(x) + E(x)$ no cálculo da integral. Assim, obtém-se:

$$\int_a^b f(x) \, dx = \int_a^b L(x) \, dx + \int_a^b E(x) \, dx$$

A primeira integral fornece a aproximação desejada, e a segunda dá a estimativa do erro. Estas integrais serão analisadas separadamente.

A integral da função interpoladora de Lagrange pode ser escrita como:

$$\int_a^b L(x) dx = \sum_{i=1}^N f(x_i) \int_a^b \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)} dx = \sum_{i=1}^N C_i f(x_i),$$

onde os valores de C_i dependem do número de pontos e de sua distribuição, mas são integrais calculáveis analiticamente.

No caso de distribuição uniforme com os pontos igualmente espaçados, os C_i são chamados "números de Cotes".

No que diz respeito aos limites de integração, supondo-se os x_i ordenados de modo crescente, existem duas alternativas:

- a) limites de pontos, quando $a = x_1$ e $b = x_N$;
- b) limites externos ao conjunto de pontos, quando $a < x_1$ e $b > x_N$.

No primeiro caso, as fórmulas obtidas são ditas fechadas e, no segundo abertas. Para pontos igualmente espaçados e fórmulas abertas, é de importância prática o caso em que:

$$a = x_1 - h \quad e \quad b = x_N + h$$

Uma estimativa do erro do método de integração é dada pela integral do termo corretivo da fórmula interpoladora. Assim, obtêm-se:

$$\int_a^b E(x) dx = \int_a^b \left[\prod_{i=1}^N (x-x_i) \right] \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} dx$$

$$\leq \frac{M}{N!} \int_a^b \left[\prod_{i=1}^N (x-x_i) \right] dx,$$

onde M é o limite superior para

$$\left| f^{(N)}(\xi) \right|, \quad \xi \in (a,b)$$

17.2.1 - MÉTODO DE NEWTON-CÔTES

Este método usa a fórmula interpoladora de Lagrange para pontos igualmente espaçados. Assim, sendo h o espaçamento entre pontos, pode-se escrever:

$$x_i = a+(i-1)h, \quad i=1, \dots, N$$
$$x = a+(y-1)h$$

para fórmulas fechadas, e:

$$x_i = a+ih, \quad i=0, \dots, N+1$$
$$x = a+hy$$

para fórmulas abertas.

Com essa notação, os "números de Cotes" tornam-se:

$$C_i = h \int_1^N \frac{(y-1)\dots(y-i+1)(y-i-1)\dots(y-N)}{(i-1)\dots(1)(-1)\dots(i-N)} dy$$

para fórmulas fechadas, e:

$$C_i = h \int_0^{N+1} \frac{(y-1)\dots(y-i+1)(y-i-1)\dots(y-N)}{(i-1)\dots(1)(-1)\dots(i-N)} dy$$

para fórmulas abertas.

Mostra-se que os "números de Cotes" são iguais para pontos simétricos, em relação ao centro do intervalo de integração. Pode-se, então, escrever que:

$$C_{1+K} = C_{N-K}, \quad K=0, \dots, N/2$$

No caso de N ser ímpar, a variação de K vai até $(N-1)/2$. Esta relação é de grande utilidade, pois reduz a metade o número de coeficientes C_i , que necessitam ser calculados para uma particular forma de integração.

Em particular, se $f(x)$ é constante dentro do intervalo $\{a,b\}$, o erro de integração é nulo, não importando o número de pontos ($N \geq 2$) empregados na fórmula de interpolação. Resulta daí que a soma dos números C_i é igual ao comprimento $b-a$ do intervalo de integração.

As Tabelas XVII.1 e XVII.2 mostram os valores dos coeficientes C_i para fórmulas abertas e fechadas, respectivamente, sendo $N \leq 5$.

TABELA XVII.1

FÓRMULAS ABERTAS

N	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
2	$h/2$	$h/2$			
3	$2h/3$	$-h/3$	$2h/3$		
4	$11h/24$	$h/24$	$h/24$	$11h/24$	
5	$11h/20$	$-14h/20$	$26h/20$	$-14h/20$	$11h/20$

TABELA XVII.2

FÓRMULAS FECHADAS

N	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅
2	h/2	h/2			
3	h/6	4h/6	h/6		
4	h/8	3h/8	3h/8	h/8	
5	7h/90	32h/90	12h/90	32h/90	7h/90

Na Tabela XVII.2 podem-se identificar facilmente, para N=2, os coeficientes da regra do trapézio e, para N=3, os coeficientes da regra de Simpson.

O termo corretivo para as fórmulas fechadas de Newton - Cotes assume a forma:

$$E = \frac{h^{N+1}}{N!} \int_1^N f^{(N)}(\xi) \prod_{i=1}^N (y-i) dy$$

Para calcular o valor do termo corretivo, considere-se a função auxiliar:

$$q_N(y) = \int_0^y \prod_{i=1}^N (u-i) du$$

Primeiramente, considera-se o caso em que N é ímpar. Nestas condições $q_N(1) = q_N(N) = 0$, pois a função $q_N(y)$ é simétrica em relação ao ponto médio, para o qual i vale $(N+1)/2$.

A integração por partes transforma a expressão para o termo corretivo em:

$$E = - \frac{h^{N+1}}{N!} \int_1^N q_N(y) \frac{d f^{(N)}}{dy} (\xi) dy$$

Para aplicar o teorema do valor médio a esta integral, deve-se provar que $q_N(y)$ não muda de sinal no intervalo $(1, N)$. Como $q_N(y)$ é simétrica, basta apenas mostrar que não há mudança de sinal no intervalo $(1, (N+1)/2)$. Isto será feito mostrando-se que para os pontos extremos, dados por $q_N(i)$, a relação $q_N(i+1)/q_N(i)$ é sempre positiva.

Desenvolvendo-se $q_N(i+1)$, obtêm-se:

$$q_N(i+1) = q_N(i) + \int_i^{i+1} \frac{N}{\pi} (y-j) dy$$

e a relação torna-se:

$$\frac{q_N(i+1)}{q_N(i)} = 1 + \frac{\int_i^{i+1} \frac{N}{\pi} (y-j) dy}{\int_1^i \frac{N}{\pi} (y-j) dy} = 1 + \frac{I_i}{q_N(i)},$$

$$i = 2, \dots, (N-1)/2$$

Assim, $q_N(i+1)/q_N(i)$ será positiva, desde que a relação das integrais do segundo membro tenha valor absoluto menor do que 1. Isto ocorre sempre e pode ser mostrado por indução finita.

Primeiramente, é necessário determinar a relação entre I_{i+1} e I_i . Usando-se a transformação de variável $y=z+1$, pode-se escrever:

$$I_{i+1} = \int_i^{i+1} \prod_{j=0}^{N-1} (z-j) dz = \int_i^{i+1} \frac{z}{z-(N)} \prod_{j=1}^N (z-j) dz$$

Como a produtória mantém o mesmo sinal no intervalo $(i, i+1)$, pode-se aplicar o teorema do valor médio, obtendo-se:

$$I_{i+1} = \frac{\xi_i}{\xi_i - (N)} I_i = \alpha_i I_i,$$

$$i < \xi_i < i+1$$

Para o intervalo $(1, (N+1)/2)$, o valor de α_i é limitado por:

$$\left| \frac{(N+1)/2}{(N+1)/2 - N} \right| < 1$$

O processo de indução finita é agora imediato. Supondo-se que:

$$\left| \frac{I_i}{q_N(i)} \right| < 1$$

segue-se que:

$$\left| \frac{I_{i+1}}{q_N(i+1)} \right| = \left| \frac{\alpha_i I_i}{q_N(i) + I_i} \right| < \left| \frac{\alpha_i}{2} \right| < 1$$

Para completar a indução finita, basta considerar a primeira relação, que vale:

$$\left| \frac{I_2}{q_N(2)} \right| = \left| \frac{I_2}{I_1} \right| = \left| \alpha_1 \right| < 1$$

Para aplicar o teorema do valor médio na expressão do termo corretivo, torna-se necessário primeiramente recordar o capítulo anterior (Seção 16.2), em que:

$$\frac{1}{N!} \frac{d}{dy} f^{(N)}(\xi) = \frac{h}{(N+1)!} f^{(N+1)}(\eta)$$

Aplicando-se o teorema do valor médio, resulta:

$$E = - \frac{h^{N+2}}{(N+1)!} f^{(N+1)}(\eta) \int_1^N q_N(y) dy$$

Finalmente, integrando-se por partes a expressão para o termo corretivo, quando N é ímpar, ela se torna:

$$E = - \frac{h^{N+2}}{(N+1)!} f^{(N+1)}(\eta) \int_1^N y \prod_{i=1}^N (y-i) dy$$

Pode-se notar pela expressão do termo corretivo que polinômios até grau N são integrados de maneira exata, quando N é ímpar. Isto constitui um "bônus" em relação à fórmula interpoladora usada.

Considere-se agora o caso de N par. Para utilizar o resultado já obtido para N ímpar, emprega-se a relação entre a diferença relativa e derivada da função, apresentada na Seção 15.2, que é:

$$f^{(N)}(\xi) = N! f[x_1, \dots, x_N, x]$$

A expressão do termo corretivo é então reescrita como:

$$E = \int_1^N f[1, \dots, N, y] \prod_{i=1}^N (y-i) dy$$

Decompondo-se a integral em duas, uma para o intervalo $(1, N-1)$ e outra para o intervalo $(N-1, N)$, obtêm-se:

$$E_1 = \int_1^{N-1} f[1, \dots, N, y] \prod_{i=1}^N (y-i) dy$$

$$E_2 = \int_{N-1}^N f[1, \dots, N, y] \prod_{i=1}^N (y-i) dy$$

Desenvolve-se a primeira dessas expressões, utilizando-se a relação da Seção 14.4:

$$(y-N) f[1, \dots, N, y] = f[1, \dots, N-1, y] - f[1, \dots, N]$$

Então, a expressão para E_1 torna-se:

$$E_1 = \int_1^{N-1} f[1, \dots, N-1, y] \prod_{i=1}^N (y-i) dy,$$

pois a outra parcela se anula porque envolve a integral de $q_{N-1}(y)$, num intervalo que contém um número ímpar de pontos.

Pelo resultado anterior, para um número ímpar de pontos, E_1 pode ser reescrita como:

$$E_1 = -\frac{h^N}{N!} f^{(N)}(\xi_1) \int_1^{N-1} y \prod_{i=1}^{N-1} (y-i) dy$$

Na expressão de E_2 , a aplicação do teorema do valor médio é imediata, pois os zeros da produtória estão todos fora de um intervalo de integração, assim:

$$E_2 = \frac{h^N}{N!} f^{(N)}(\xi_2) \int_{N-1}^N \prod_{i=1}^N (y-i) dy$$

Para adicionar as duas expressões, deve-se notar que o integrando na expressão de E_2 é negativo para todo o intervalo de integra

ção. Por outro lado, como $q_{N-1}(y)$ mantém o sinal na integração de E_1 , e o integrando no intervalo $[1,2]$ é positivo, segue-se que E_1 e E_2 têm o mesmo sinal, podendo ser adicionadas numa única expressão:

$$E = - \frac{h^N}{N!} f^{(N)}(\xi) \left[\int_1^{N-1} y \prod_{i=1}^{N-1} (y-i) dy - \int_N^{N-1} \prod_{i=1}^N (y-i) dy \right]$$

Note-se que não se observa, no caso de N par, o mesmo "bônus" do caso de N ímpar.

Para o caso de fórmulas abertas, obter-se-á resultado semelhante para o termo corretivo.

Em virtude de erros de arredondamento introduzidos pelo computador, as fórmulas de Newton-Côtes são apresentadas vantajosas para $N \leq 5$. Isto ocorre principalmente porque, no processo de integração, a importância individualizada cai com o aumento do número de pontos. Como o erro de arredondamento aumenta com o número de pontos, a perda do valor individual contribui mais para o aumento do erro do que para a convergência do valor da integral.

17.3 - MÉTODOS BASEADOS NO POLINÔMIO INTERPOLADOR DE HERMITE

Chamando-se de $H(x)$ o polinômio interpolador de Hermite, a função $f(x)$ pode ser substituída por $H(x) + E(x)$, onde $E(x)$ é o termo corretivo. A integral de $f(x)$ torna-se:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b H(x) dx + \int_a^b E(x) dx$$

A integral de $H(x)$ fornece a aproximação desejada, e a integral de $E(x)$, a estimativa do erro.

17.3.1 - INTEGRAÇÃO DO POLINÔMIO DE HERMITE

Considera-se, aqui, apenas o caso em que $f(x)$ e $f'(x)$ são conhecidas para o conjunto de pontos $\{x_i\}$. O polinômio interpolador de Hermite torna-se:

$$H(x) = \sum_{i=1}^N \psi_{0i}(x) f(x_i) + \psi_{1i}(x) f'(x_i),$$

e o termo corretivo $E(x)$ vale:

$$E(x) = \frac{f^{(2N)}(\xi)}{(2N)!} \prod_{i=1}^N (x-x_i)^2$$

A expressão do valor aproximado da integral se simplifica bastante, quando:

$$\int_a^b \psi_{1i}(x) dx = 0, \quad i=1, \dots, N.$$

Neste caso, a aproximação para o valor da integral torna-se:

$$\int_a^b H(x) dx = \sum_{i=1}^N f(x_i) \int_a^b \psi_{0i}(x) dx = \sum_{i=1}^N a_i f(x_i)$$

É importante notar que, com este procedimento, o emprego de N pontos permite integrar, exatamente, os polinômios até o grau $2N-1$. Lembrando-se que o método de Newton-Côtes permite, com N pontos, a integração exata de polinômios até o grau N , no caso de N ímpar, vê-se que o procedimento em questão apresenta maiores vantagens.

As fórmulas de integração que, com N pontos, permitem integrar exatamente polinômios até o grau $2N-1$, são chamadas genericamente fórmulas de integração de Gauss.

Examinar-se-ã agora a condiçãõ em que:

$$\int_a^b \psi_{1i}(x) dx = 0, \quad i=1, \dots, N.$$

Essa condiçãõ ã dada pelo seguinte teorema:

Teorema: A condiçãõ necessãria e suficiente para que:

$$\int_a^b \psi_{1i}(x) dx = 0, \quad i=1, \dots, N.$$

ã que a funçãõ:

$$\pi(x) = \prod_{i=1}^N (x-x_i)$$

seja ortogonal a todos os polinõmios de grau N-1.

Prova: Ë simples mostrar que a funçãõ $\psi_{1i}(x)$ pode ser colocada na forma:

$$\psi_{1i}(x) = \frac{\pi(x)}{\pi'(x_i)} \psi_i(x),$$

onde as $\psi_i(x)$ sãõ as funções auxiliares da interpolaçãõ de Lagrange.

Para que a integral de $\psi_{1i}(x)$ se anule, serã necessãrio que:

$$\frac{1}{\pi'(x_i)} \int_a^b \pi(x) \psi_i(x) dx = 0, \quad i=1, \dots, N.$$

Como as funções $\psi_i(x)$ sãõ polinõmios de grau N-1, que de

pendem da distribuiçãõ dos x_i dentro do intervalo $\{a,b\}$, a fim de que a integral se anule para qualquer $\psi_i(x)$, ã necessãrio e suficiente que ela seja zero para todos polinõmios de grau N-1.

Recordando-se o que foi exposto no Capítulo III, um polinômio de grau K pode ser interpretado como o vetor soma de vetores elementares $U a_j x^j \hat{x}$, $j=0, \dots, K$ e \hat{x} versor da direção. Assim, $P_K(x)$ pode ser escrito como:

$$U P_K(x) \hat{x} = \sum_{j=0}^K U a_j x^j \hat{x}$$

Da mesma forma, a função $\pi(x)$ é interpretada como o vetor $U \pi(x) \hat{x}$, e a condição acima se escreve como:

$$\langle U \pi(x) \hat{x}, U P_{N-1}(x) \hat{x} \rangle = 0.$$

Sendo o produto escalar zero, esses vetores são chamados ortogonais. Em particular, $U \pi(x) \hat{x}$ deve ser ortogonal a todos os vetores elementares que compõem $U P_{N-1}(x) \hat{x}$, o que completa a prova.

Mostrou-se no decorrer desta seção, que a condição suficiente para uma fórmula de N pontos integrar exatamente os polinômios até o grau $2N-1$ é ortogonalidade entre $\pi(x)$ e qualquer polinômio de grau $N-1$.

Verifica-se, também, que esta condição é necessária. Para isto, basta tomar um polinômio de grau $2N-1$ e colocá-lo na forma especial:

$$P_{2N-1}(x) = \pi(x) P_{N-1}(x)$$

Como, por hipótese,

$$\int_a^b \psi_{1i}(x) dx = 0$$

para essa particular forma do polinômio, segue-se que:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \pi(x) P_{N-1}(x) dx = \sum_{i=1}^N a_i f(x_i) = 0,$$

pois os x_i são as raízes do polinômio $\pi(x)$. Isto mostra a necessidade de $\pi(x)$ ser ortogonal a $P_{N-1}(x)$.

17.3.2 - GENERALIZAÇÃO DA INTEGRAÇÃO

O que foi exposto para a integral de $f(x)$ aplica-se também para o caso em que $f(x)$ é separada como o produto de duas funções:

$$f(x) = \omega(x) g(x)$$

A função $\omega(x) \geq 0$ chama-se função peso. Este procedimento tem a vantagem de permitir o uso de resultados conhecidos para determinação das abscissas x_i ; no entanto, em contrapartida, ele é mais complexo, se os resultados conhecidos não puderem ser utilizados.

Da mesma forma que anteriormente, o ponto de partida é a função interpoladora de Hermite, obtendo-se, assim:

$$\int_a^b \omega(x) g(x) dx = \sum_{i=1}^N a_i g(x_i) + E, \quad \omega(x) \geq 0,$$

onde E é o termo corretivo e a função $\pi(x)$, construída com as abscissas x_i , satisfaz agora a condição de ortogonalidade expressa por:

$$\langle \prod \pi(x) \bar{x}, \prod \omega(x) Q_{N-1}(x) \bar{x} \rangle = 0,$$

onde $Q_{N-1}(x)$ é um polinômio de grau $N-1$, pertencente a um conjunto de polinômios ortogonais entre si, $\{Q_k(x)\}$, em relação à função peso $\omega(x)$.

Pela própria forma como foi construída a função $\pi(x)$, segue-se que:

$$\pi(x) = \frac{1}{b_N} Q_N(x),$$

onde b_N é o coeficiente do termo em x^N de $Q_N(x)$. Esta relação permite identificar o valor dos x_i que serão as raízes do polinômio $Q_N(x)$, valores estes em geral tabelados. Mesmo não sendo tabeladas, as raízes de $Q_N(x)$ podem, em geral, ser facilmente encontradas.

A determinação dos valores a_i baseia-se na importante identificação de Christoffel-Darboux (Ver Apêndice B):

$$\sum_{K=0}^N \frac{Q_K(x) Q_K(y)}{\gamma_K} = \frac{Q_{N+1}(x) Q_N(y) - Q_N(x) Q_{N+1}(y)}{\alpha_N \gamma_N (x-y)}$$

onde b_K é o coeficiente de x^K em $Q_K(x)$ e:

$$\alpha_K = \frac{b_{K+1}}{b_K}$$

$$\gamma_K = \int_a^b \omega(x) Q_K^2(x) dx.$$

Como a fórmula de integração é exata para polinômios até o grau $2N-1$, a função $\psi_i(x)$, em particular, é exatamente integrável, obtendo-se:

$$\int_a^b \omega(x) \psi_i(x) dx = a_i$$

$$\text{Mas } \psi_i(x) = \frac{\pi(x)}{(x-x_i) \pi'(x_i)},$$

assim,

$$a_i = \frac{1}{Q_N'(x_i)} \int_a^b \omega(x) \frac{Q_N(x)}{x-x_i} dx$$

Para calcular essa integral, faz-se $y=x_i$ na fórmula de Christoffer-Darboux, obtendo-se:

$$-\frac{Q_{N+1}(x_i)}{\alpha_N \gamma_N} \frac{Q_N(x)}{x-x_i} = \sum_{K=0}^{N-1} \frac{Q_K(x) Q_K(x_i)}{\gamma_K},$$

pois $Q_N(x_i) = 0$. Multiplicando-se ambos os lados por $\omega(x) Q_0(x)$ e integrando-se em $[a, b]$, resulta:

$$-\frac{Q_{N+1}(x_i)}{\alpha_N \gamma_N} \int_a^b \omega(x) \frac{Q_0(x) Q_N(x)}{x-x_i} dx = Q_0(x_i),$$

pois os polinômios $Q_K(x)$ são ortogonais. Levando-se em conta que $Q_0(x)$ é uma constante, obtêm-se finalmente:

$$\int_a^b \omega(x) \frac{Q_N(x)}{x-x_i} dx = \frac{\alpha_N \gamma_N}{Q_{N+1}(x_i)},$$

de onde os valores desejados dos coeficientes a_j são:

$$a_i = -\frac{\alpha_N \gamma_N}{Q_{N+1}(x_i) Q_N'(x_i)}, \quad i=1, \dots, N$$

Aplicando-se o teorema do valor médio, o termo corretivo E , obtido pela integração do termo corretivo da fórmula de Hermite, vale:

$$E = \int_a^b \omega(x) \frac{g^{(2N)}(\xi)}{(2N)!} \pi^2(x) dx = \frac{g^{(2N)}(\eta) \gamma_N}{(2N)! b_N^2}$$

O desenvolvimento acima mostra a simplificação que se obtém no cálculo dos valores dos x_i e a_i , quando os polinômios ortogonais são usados. Ver-se-á, a seguir, o método geral aplicável a todos os casos.

17.3.3 - DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES E ABCISSAS

A expressão para integração pelo método de Gauss é escrita como:

$$\int_a^b \omega(x) g(x) dx = \sum_{K=1}^N a_K g(x_K) + E$$

Esta expressão possui $E = 0$ se $g(x)$ é um polinômio de grau menor ou igual a $2N-1$. Assim, integrando-se os polinômios $1, x, x^2, \dots, x^{2N-1}$ resulta um sistema de $2N$ equações, que permite encontrar o valor das abscissas x_i e dos coeficientes $a_i, i=1, \dots, N$.

Usando-se a notação

$$M_i = \int_a^b \omega(x) x^i dx,$$

o sistema de equações não-lineares será:

$$M_0 = a_1 + a_2 + \dots + a_N$$

$$M_1 = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_N x_N$$

⋮

$$M_{2N-1} = a_1 x_1^{2N-1} + a_2 x_2^{2N-1} + \dots + a_N x_N^{2N-1}$$

Obtêm-se a solução desse sistema, construindo-se o polinômio $\pi(x)$, dado por:

$$\pi(x) = \prod_{i=1}^N (x-x_i) = \sum_{k=0}^N C_K x^K,$$

que se anula para $x=x_i, i=1, \dots, N$.

No sistema acima multiplicando-se, a primeira equação por C_0 , a segunda por C_1 , a terceira por C_2 e assim sucessivamente e, em seguida, adicionando-se as equações multiplicadas por esses coeficientes, tem-se:

$$\sum_{k=0}^N C_K M_K = \sum_{i=1}^N a_i \pi(x_i) = 0$$

Procedendo-se da mesma forma, mas começando-se a multiplicar por C_0 a segunda equação, por C_1 a terceira equação e assim sucessivamente, obtêm-se por adição das equações multiplicadas por esses coeficientes:

$$\sum_{k=0}^N C_K M_{K+1} = \sum_{i=1}^N a_i x_i \pi(x_i) = 0$$

Repetindo-se o processo, mas começando-se na terceira, equação, quarta, etc., de um modo geral, resulta:

$$\sum_{k=0}^N C_K M_{K+j} = 0 \quad j=0, \dots, N,$$

que é um sistema linear homogêneo de $N+1$ equações, com incógnitas C_K , $K=0, \dots, N$. Este sistema possui solução fazendo-se $C_N = 1$ e encontrando-se os outros valores C_i , $i=0, \dots, N-1$, dependentes de C_N . Para que isto seja possível, o determinante dos M_{K+j} $j=0, \dots, N$; $K=0, \dots, N$ não pode ser nulo.

Uma vez determinados os coeficientes C_K , encontram-se os valores das raízes x_i , $i=1, \dots, N$ do polinômio $\pi(x)$. Determinados os valores de x_i , tomam-se N equações do sistema inicial, constituindo-se assim um sistema de N equações lineares com incógnitas a_i . A solução deste sistema completa o cálculo.

Para completar o método geral, resta determinar o termo corretivo. Isto é simples, pois neste caso o teorema do valor médio pode ser aplicado, obtendo-se:

$$E = \frac{1}{(2N)!} \int_a^b \omega(x) \pi^2(x) g^{(2N)}(\xi) dx = \frac{g^{(2N)}(\eta)}{(2N)!} \int_a^b \omega(x) \pi^2(x) dx$$

Este método geral é usado principalmente para $\omega(x) = 1$. Outros valores de $\omega(x)$ são comumente usados em conjunção com polinômios ortogonais, quando então se aplica o método anterior.

17.3.4 - CASOS PARTICULARES DA INTEGRAÇÃO DE GAUSS

De acordo com a função peso e o intervalo de integração, a integral de Gauss recebe denominações especiais. A Tabela XVII.3 mostra os casos mais utilizados.

TABELA XVII.3

DENOMINAÇÃO DA INTEGRAL DE GAUSS

FUNÇÃO E PESO	LIMITES DE INTEGRAÇÃO	NOME DO MÉTODO
1	(-1,1)	Gauss-Legendre
e^{-x}	(0,∞)	Gauss-Laguerre
e^{-x^2}	(-∞,+∞)	Gauss-Hermite
$1/\sqrt{1-x^2}$	(-1,1)	Gauss-Tchebyshev
$(1-x)^\alpha (1+x)^\beta$	(-1,1)	Gauss-Jacobi

O segundo nome do método corresponde ao polinômio ortogonal. Apresentar-se-ão, a seguir, algumas relações que envolvem esses polinômios, as quais são de interesse para integração de Gauss:

a) polinômio de Legendre $P_n(x)$

- forma explícita:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{(n/2)} (-1)^m \binom{n}{m} \binom{2n-2m}{n} x^{n-2m}$$

- fator de normalização:

$$\gamma_n = \frac{2}{2n+1}$$

- coeficiente de x^n :

$$b_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$$

b) polinômios de Laguerre $L_n(x)$

- forma explícita:

$$L_n(x) = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{n-m} \frac{1}{m!} x^m$$

- fator de normalização:

$$\gamma_n = 1$$

- coeficiente de x^n :

$$b_n = \frac{(-1)^n}{n!}$$

c) polinômios de Hermite $H_n(x)$

- forma explícita:

$$H_n(x) = n! \sum_{m=0}^{n/2} (-1)^m \frac{1}{m!(n-m)!} (2x)^{n-2m}$$

- fator de normalização:

$$\gamma_n = 2^n \sqrt{\pi} n!$$

- coeficiente de x^n :

$$b_n = 2^n$$

d) polinômios de Tchebyshev $T_n(x)$

- forma explícita:

$$T_n(x) = \frac{n}{2} \sum_{m=0}^{n/2} (-1)^m \frac{(n-m-1)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m}$$

- fator de normalização:

$$\gamma = \frac{\pi}{2}$$

- coeficiente de x^n :

$$b_n = 2^{n-1}$$

e) polinômios de Jacobi $J_n(x)$

- forma explícita:

$$J_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n \binom{n+\alpha}{m} \binom{n+\beta}{n-m} (x-1)^{n-m} (x+1)^m$$

- fator de normalização:

$$\gamma_n = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1) \Gamma(\alpha+\beta+1)}{n! \Gamma(n+\alpha+\beta+1)}$$

- coeficiente de x_n :

$$b_n = \frac{1}{2^n} \binom{2n+\alpha+\beta}{n}$$

Nos casos mais comuns, o método de Gauss-Tchelyshev apresenta um particular interesse, pois, como pode ser facilmente verificado, nesse método, todos os a_i são iguais. Esta propriedade é altamente conveniente, pois minimiza o erro de arredondamento, uma vez que todos os pontos participam igualmente para melhoria da aproximação; desta forma evitando o uso de pontos pouco importantes, os quais contribuem mais para o aumento do erro de arredondamento do que para a melhoria da aproximação.

17.3.5 - APLICAÇÃO DO MÉTODO DE GAUSS

Com o intuito de reduzir os erros de arredondamento, a primeira idéia que ocorre é a do uso de um menor número de pontos para obtenção da mesma precisão. Neste particular, as fórmulas de Gauss parecem, à primeira vista, constituir a solução ideal. Na prática, entretanto, isto não é necessariamente verdade, pois sendo as abcissas números irracionais, quando $f(x)$ é dada por valores tabelados, essa vantagem é perdida.

As fórmulas de Gauss apresentam maior vantagem, quando a expressão analítica de $f(x)$ é conhecida.

A fórmula de Gauss-Tchebyshev apresenta, adicionalmente, a vantagem de minimizar o erro, por atribuir igual importância a todos os pontos.

Devido à quantidade de operações necessárias, o método geral para determinação das abcissas e coeficientes perde um pouco de sua importância. A aplicação do método de Gauss adquire, então, maior importância nos casos em que polinômios ortogonais podem ser usados.

A integração pelo método de Gauss pode ser estendida para o caso de integrais impróprias, onde se isola a singularidade num dos extremos de integração. Como os pontos extremos não são abcissas de integração, a obtenção de um resultado é garantida nesses casos.

17.4 - FÓRMULAS COMPOSTAS PARA INTEGRAÇÃO

As fórmulas de integração já apresentadas possuem algumas características comuns:

- . O erro é proporcional a alguma potência da amplitude, $b-a$, do intervalo de integração.
- . O erro depende de derivadas de ordem superior, que nem sempre de crescem em amplitude com o aumento da ordem.
- . O aumento do número de pontos, via de regra, contribui mais para o aumento de erro de arredondamento do que para melhoria da aproximação.

Como consequência, nos métodos já apresentados, o aumento de números de pontos não é aconselhável para $N \geq 5$. A alternativa para grandes intervalos de integração é a divisão em intervalos menores e a integração por trechos da função. As fórmulas resultantes são denominadas compostas.

Apresentar-se-ão, a seguir, os elementos para a composição de fórmulas e de seu respectivo erro.

A forma mais elementar de composição consiste em dividir o intervalo (a,b) em M intervalos disjuntos $[z_i, z_{i+1}]$, $i=1, \dots, N$. Para cada intervalo $[z_i, z_{i+1}]$ aplica-se uma fórmula de integração com n pontos. A integral I no intervalo $[a,b]$ será dada pela soma das integrais I_i nos intervalos $[z_i, z_{i+1}]$. Para o cálculo do número N de abcissas, necessárias em $[a,b]$, devem-se distinguir dois casos:

- a) Fórmulas abertas - neste caso não existem abcissas comuns a dois intervalos de integração consecutivos; nestas condições $N=n M$.
- b) Fórmulas fechadas - neste caso existirão $M-1$ pontos comuns, pois o limite superior de integração de cada intervalo coincide com o limite inferior de integração do intervalo subsequente; nestas condições $N=nM-M+1$.

O erro E da fórmula de integração composta será dado pela soma dos erros E_j de cada intervalo.

17.4.1 - REGRA DO TRAPÉZIO

A forma mais simples de composição emprega $n=2$ e o método de Newton-Côtes em cada subintervalo. Usando-se a fórmula fechada para pontos igualmente espaçados, obtêm-se:

$$z_i = x_i$$

$$M = N-1$$

$$I = \frac{b-a}{N-1} \left\{ \frac{1}{2} \left[f(x_1) + f(x_N) \right] + \sum_{i=2}^{N-1} f(x_i) \right\}$$

$$E = - \left(\frac{b-a}{N-1} \right)^3 \frac{1}{12} \sum_{i=1}^{N-1} f''(\eta_i)$$

A regra do trapézio, pela sua simplicidade, é largamente utilizada nos casos mais triviais.

17.4.2 - REGRA PARABÓLICA

Esta regra utiliza $n=3$ e o método de Newton-Côtes em cada subintervalo.

Usando-se a fórmula fechada para pontos igualmente espaçados, resulta:

$$z_i = x_{2i-1}, \quad i=1, \dots, M+1$$

$$M = \frac{N-1}{2}$$

$$I = \frac{b-a}{N-1} \left\{ \frac{1}{3} [f(x_1) + f(x_N)] + \frac{4}{3} \sum_{i=1}^M f(x_{2i}) + \frac{2}{3} \sum_{i=2}^M f(z_i) \right\}$$

$$E = -\left(\frac{b-a}{N-1}\right)^5 \frac{1}{90} \sum_{i=1}^M f^{(4)}(\eta_i)$$

Pode-se notar que a regra parabólica já apresenta flutuações nos coeficientes dos valores da função. Por essa razão, os erros computacionais serão maiores do que os introduzidos pela regra do trapézio.

Valores maiores do que $n=3$ são pouco usados nas regras de composição.

17.4.3 - INTEGRAÇÃO DAS "SPLINES"

Considerar-se-á, aqui, apenas o caso da "spline" cúbica, apresentada no Capítulo XV. Esta "spline" é integrável exatamente, em cada subintervalo, pela regra de Simpson, que usa $n=3$. Para isso, é necessário dispor-se do valor do ponto médio, \bar{x}_i , para cada subintervalo. Usando-se a fórmula desenvolvida no Capítulo XV, obtêm-se:

$$s(\bar{x}_i) = \frac{1}{2} [s(x_i) + s(x_{i+1})] - \frac{1}{16} (x_{i+1} - x_i)^2 [s''(x_i) + s''(x_{i+1})]$$

Aplicando-se a regra de Simpson para cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ resulta:

$$\int_a^b s(x) dx = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i) \left[s(x_i) + s(x_{i+1}) \right] - \\ - \frac{1}{24} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^3 \left[s''(x_i) + s''(x_{i+1}) \right]$$

O erro pode ser estimado pela integral do limite do erro da função "spline", em cada subintervalo.

Usando-se a mesma notação da Seção 15.11.3, item 2, resulta:

$$E \leq \frac{M}{\sqrt{120}} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^5,$$

onde:

$$M = \text{Max}_{[a,b]} \frac{|f^{(4)}(x)|}{2}.$$

Este método só apresenta vantagens práticas quando já se dispõe dos valores de $s''(x_i)$, $i=1, \dots, N$.

17.4.4 - MÉTODO DE ROMBERG

Este método aumenta a precisão do cálculo da integral, pelo processo de redução gradativa do erro. A redução gradativa do erro é conseguida, combinando-se valores aproximados da integral, obtidos pelo método trapezoidal, e usando-se várias amplitudes para o espaçamento entre os pontos.

Como passo inicial, deduzir-se-ã a fôrmla de Euler-MacLaurin para a somatõria. Esta fôrmla mostra que o erro da integraçã trapezoidal depende das potências pares da amplitude, Δx , do espaçamento entre pontos.

1) Fôrmla de Euler-MacLaurin para a somatõria

Esta fôrmla relaciona $\sum_{j=0}^N f(t+jh)$ com o valor da integral $\int_0^{Nh} f(t+y) dy$.

Primeiramente, definir-se-ã os polinômios e os números de Bernoulli.

Definição: Os polinômios de Bernoulli, de ordem K , $B_K(t)$, são definidos pela identidade:

$$\sum_{k=0}^{\infty} B_K(t) \frac{x^k}{k!} = \frac{x[e^{tx} - 1]}{e^x - 1}$$

O cãculo desses polinômios ã simples, basta multiplicar ambos os lados desta expressã por $e^x - 1$, em seguida desenvolver e^x e e^{tx} da equaçã acima, em sãrie de Taylor e igualar os coeficientes de potência idênticas de x .

Definição: Os números de Bernoulli, de ordem K , B_K , são definidos pela identidade:

$$\sum_{k=0}^{\infty} B_K \frac{x^k}{k!} = \frac{x}{e^x - 1}$$

Os números de Bernoulli são calculados do mesmo modo que os polinômios de Bernoulli.

Usando-se essas definições, mostra-se que:

$$B_k(0) = 0 \quad k \geq 0$$

$$B_k(1) = 0 \quad k > 1$$

$$B_{2k}'(t) = 2k B_{2k-1}(t) \quad k > 1$$

$$B_{2k+1}'(t) = (2k+1) \left[B_{2k}(t) + B_{2k} \right] \quad k \geq 0$$

Serã agora introduzida a integral S_k , definida por:

$$S_k = \frac{1}{(2k)!} \int_0^h B_{2k} \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2k)}(t+y) dy$$

Para $k > 1$, integrando por partes, tem-se:

$$S_k = - \frac{1}{(2k-1)!} \frac{1}{h} \int_0^h B_{2k-1} \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2k-1)}(t+y) dy$$

pois, como $B_{2k}(0) = B_{2k}(1) = 0$, para $k > 1$, o primeiro termo da integração por partes se anula.

Integrando-se novamente por partes, resulta:

$$S_k = \frac{1}{(2k-1)!} \frac{1}{h^2} \int_0^h B_{2k-1}' \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2k-2)}(t+y) dy$$

como:

$$B_{2k-1}' \left(\frac{y}{h} \right) = (2k-1) \left[B_{2k-2} \left(\frac{y}{h} \right) + B_{2k-2} \right],$$

tem-se:

$$S_k = \frac{1}{(2k-2)!} \frac{1}{h^2} \left[\int_0^h B_{2k-2} \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2k-2)}(t+y) dy + \right. \\ \left. + B_{2k-2} \int_0^h f^{(2k-2)}(t+y) dy \right],$$

de onde:

$$S_k = \frac{1}{h^2} S_{k-1} + \frac{1}{h^2} \frac{B_{2k-2}}{(2k-2)!} \left[f^{(2k-3)}(t+h) - f^{(2k-3)}(t) \right]$$

finalmente:

$$S_{k-1} = h^2 S_k - \frac{B_{2k-2}}{(2k-2)!} \left[f^{(2k-3)}(t+h) - f^{(2k-3)}(t) \right]$$

Analogamente, usar-se-á a integração por partes, para re solver o caso $k=1$, assim:

$$S_1 = \frac{1}{2} \int_0^h B_2 \left(\frac{y}{h} \right) f''(t+y) dy$$

Substituindo-se $B_2 \left(\frac{y}{h} \right)$ por seu valor, obtêm-se:

$$S_1 = \frac{1}{2} \int_0^h \left[\frac{y^2}{h^2} - \frac{y}{h} \right] f''(t+y) dy$$

Integrando-se por partes:

$$S_1 = - \int_0^h \left[\frac{y}{h^2} - \frac{1}{h} \right] f'(t+y) dy$$

Integrando-se novamente por partes:

$$S_1 = -\frac{1}{2h} \left[f(t+h) + f(t) \right] + \frac{1}{h^2} \int_0^h f(t+y) dy,$$

de onde:

$$\int_0^h f(t+y) dy = \frac{h}{2} \left[f(t+h) + f(t) \right] + h^2 S_1$$

Usando-se a relação de recorrência entre S_{k-1} e S_k , segue-se que:

$$S_1 = h^2 S_2 - \frac{B_2}{2!} \left[f'(t+h) - f'(t) \right]$$

$$S_2 = h^2 S_3 - \frac{B_4}{4!} \left[f''(t+h) - f''(t) \right],$$

e assim por diante. Desse modo, a integral acima pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\int_0^h f(t+y) dy = \frac{h}{2} \left[f(t+h) + f(t) \right] -$$
$$- \sum_{k=1}^m \frac{B_2 k h^{2k}}{(2k)!} \left[f^{(2k-1)}(t+h) - f^{(2k-1)}(t) \right] + h^{2(m+1)} S_{m+1}$$

Fazendo-se, agora, t valer sucessivamente $x, x+h, x+2h, \dots, x+(N-1)h$ e adicionando-se as integrais elementares, obtêm-se o valor de I , dado pela fórmula de Euler-MacLaurin.

$$I = \int_0^{Nh} f(y) dy = T(h) - \sum_{k=1}^m \frac{B_2 k h^{2k}}{(2k)!} \left[f^{(2k-1)}(x+Nh) - f^{(2k-1)}(x) \right] + E_m,$$

onde:

$$T(h) = \frac{h}{2} \left[f(x) + 2f(x+h) + 2f(x+2h) + \dots + f(x+Nh) \right]$$

é a aproximação trapezoidal com espaçamento h , e:

$$E_m = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{h^{2(m+1)}}{(2m+2)!} \int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2m+2)}(x+jh+y) dy$$

é o erro da fórmula.

Supondo-se $f^{(2m+2)}(x+jh+y)$ contínua, pode-se usar o teorema do valor médio para calcular as N integrais do erro E_m . Tem-se, então, pelo teorema do valor médio, que:

$$\int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2m+2)}(x+jh+y) dy = f^{(2m+2)}(\xi_j) \int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) dy$$

como:

$$B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) = -B_{2m+2} + \frac{B'_{2m+3} \left(\frac{y}{h} \right)}{(2m+3)} ;$$

Integrando-se esta expressão, tem-se:

$$\int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) dy = - \int_0^h B_{2m+2} dy + \int_0^h \frac{B'_{2m+3} \left(\frac{y}{h} \right)}{(2m+3)} dy$$

A segunda integral é nula, pois $B_{2m+3}(1) = B_{2m+3}(0) = 0$.

logo:

$$\int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) dy = -h B_{2m+2}$$

Desse modo, obtêm-se:

$$E_m = - \sum_{j=0}^{N-1} \frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi_j) =$$

$$= - \frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} B_{2m+2} \sum_{j=0}^{N-1} f^{(2m+2)}(\xi_j)$$

Como $f^{(2m+2)}(x)$ é contínua em $[a,b]$, existe um valor $\xi \in [a,b]$, tal que:

$$\sum_{j=0}^{N-1} f^{(2m+2)}(\xi_j) = N f^{(2m+2)}(\xi)$$

Então:

$$E_m = - \frac{Nh^{2m+3}}{(2m+2)!} B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi)$$

O produto $Nh B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi)$ não se altera, se Nh é constante, pois:

$$Nh B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) = \sum_{j=0}^{N-1} \int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{y}{h} \right) f^{(2m+2)}(x+jh+y) dy =$$

$$= \int_0^{Nh} B_{2m+2} \left[\frac{Nh}{b-a} \right] f(x+y) dy$$

Assim, o valor ξ depende apenas do produto Nh , e não do valor particular de h . Utilizar-se-ã este resultado na demonstração do método de Romberg para integração.

2) Cálculo aproximado da integral

Tomar-se-á como ponto de partida a fórmula de Euler-MacLaurin:

$$I = T(h) + \sum_{i=1}^m C_i h^{2i} + E_m(h),$$

onde os coeficientes C_i dependem apenas do valor de i e do valor da função e suas derivadas, nos pontos a e b extremos do intervalo de integração. Fazendo-se $h = 2^m \Delta x$, tem-se:

$$I = T(2^m \Delta x) + \sum_{i=0}^m C_i 2^{2mi} (\Delta x)^{2i} + E_{m,m},$$

onde $E_{m,m} = E_m(2^m \Delta x)$.

Chamando-se de $D_{1,m} = I - T(2^m \Delta x)$, tem-se:

$$D_{1,m} = \sum_{i=1}^m C_i 2^{2mi} (\Delta x)^{2i} + E_{m,m}$$

$$D_{1,m-1} = \sum_{i=1}^m C_i 2^{2(m-1)i} (\Delta x)^{2i} + E_{m,m-1}$$

Constrói-se, então, $D_{2,m-1}$ como:

$$D_{2,m-1} = D_{1,m} - 2^2 D_{1,m-1}$$

Logo:

$$D_{2,m-1} = \sum_{i=2}^m \left[2^{2i} - 2^2 \right] 2^{2(m-1)i} C_i (\Delta x)^{2i} + E_{m,m} - 2^2 E_{m,m-1}$$

Chamando-se: $\beta_{i,1} = [2^{2i} - 2^2]$, tem-se:

$$D_{2,m-1} = \sum_{i=1}^m \beta_{i,1} C_i 2^{2(m-1)i} (\Delta x)^{2i} + (E_{m,m} - 2^2 E_{m,m-1})$$

Por outro lado:

$$E_{m,m} = - \frac{(2^m \Delta x)^{2m+2}}{(2m+2)!} \left[N(2^m \Delta x) B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) \right],$$

sendo a expressão dentro dos colchetes invariante.

Fazendo-se $N=1$, com $h = 2^m \Delta x = b-a$, segue-se que, para $h = 2^{m-1} \Delta x = (b-a)/2$, tem-se $N=2$, então:

$$E_{m,m} = - \frac{(2^m \Delta x)^{2m+2}}{(2m+2)!} \left[2^m \Delta x B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) \right]$$

$$E_{m,m-1} = - \frac{(2^{m-1} \Delta x)^{2m+2}}{(2m+2)!} \left[2(2^{m-1} \Delta x) B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) \right]$$

De onde:

$$E_{m,m} = 2^{2m+2} E_{m,m-1}$$

Logo:

$$D_{2,m-1} = \sum_{i=2}^m \beta_{i,1} C_i 2^{2(m-1)i} (\Delta x)^{2i} + \gamma_{m,1} E_{m,m-1},$$

onde:

$$\gamma_{m,1} = (2^{2m+2} - 2^2)$$

A expressão para $D_{2,m-1}$ tem a mesma forma que a expressão para $D_{1,m-1}$, apenas com duas constantes multiplicativas adicionais. Pod-se, então, construir $D_{3,m-2} = D_{2,m-1} - 2^4 D_{2,m-2}$. Logo:

$$D_{3,m-2} = \sum_{i=3}^m \left[2^{2i} - 2^4 \right] \beta_{i,1} C_i 2^{2(m-2)i} (\Delta x)^{2i} + \gamma_{m,2} E_{m,m-2},$$

onde:

$$\gamma_{m,2} = (2^{2m+2} - 2^4) \gamma_{m,1}$$

Podem-se reescrever essa expressão como:

$$D_{3,m-2} = \sum_{i=3}^m \beta_{i,2} C_i 2^{2(m-2)i} (\Delta x)^{2i} + \gamma_{m,2} E_{m,m-2},$$

com:

$$\beta_{i,2} = \left[2^{2i} - 2^4 \right] \beta_{i,1}$$

O processo pode ser repetido até a completa eliminação da somatória, ou seja, até $D_{m+1,0} = \gamma_{m,m} E_{m,0}$. O valor de $\gamma_{m,m}$ é calculado pela fórmula de recorrência:

$$\gamma_{m,k} = (2^{2m+2} - 2^{2k}) \gamma_{m,k-1} \quad k=1,2,\dots,m$$

$$\gamma_{m,0} = 1$$

Relacionando-se agora o valor de $D_{m+1,0}$ com o valor da integral I , tem-se:

$$D_{1,m} = I - T(2^m \Delta x) = \alpha_1 I - F_{1,m},$$

onde $\alpha_1 = 1$ e $F_{1,m} = T(2^m \Delta x)$; logo:

$$\begin{aligned} D_{2,m-1} &= D_{1,m} - 2^2 D_{1,m-1} = \alpha_1 [1 - 2^2] - [F_{1,m} - 2^2 F_{1,m-1}] = \\ &= \alpha_2 I - F_{2,m-1} \end{aligned}$$

e assim, sucessivamente, resulta:

$$D_{j+1,m-j} = \alpha_{j+1} I - F_{j+1,m-j} \quad j=1, \dots, m,$$

com as fórmulas de recorrência:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{j+1} &= [1 - 2^{2j}] \alpha_j \\ F_{j+1,m-j} &= F_{j,m-(j-1)} - 2^{2j} F_{j,m-j} \end{aligned} \right\} j=1, \dots, m$$

e:

$$\alpha_1 = 1, F_{1,m} = T(2^m \Delta x), F_{1,m-1} = T(2^{m-1} \Delta x)$$

Assim, para $j=m$, tem-se a relação procurada:

$$D_{m+1,0} = \alpha_{m+1} I - F_{m+1,0} = \gamma_{m,m} E_{m,0},$$

e o valor da integral pode ser escrito como:

$$I = \frac{F_{m+1,0}}{\alpha_{m+1}} + \frac{\gamma_{m,m}}{\alpha_{m+1}} E_{m,0}$$

Nesta fórmula, é possível identificar o primeiro termo como sendo o valor aproximado da integral, e o segundo, como o erro da aproximação.

3) Precisão do método

Desenvolvendo-se o termo do erro e usando-se as fórmulas de recorrência para $\gamma_{m,m}$ e α_{m+1} , resulta:

$$\frac{\gamma_{m,m}}{\alpha_{m+1}} = \frac{[2^{2m+2} - 2^{2m}] [2^{2m+2} - 2^{2(m-1)}] \dots [2^{2m+2} - 2^2]}{[1 - 2^{2m}] [1 - 2^{2(m-1)}] \dots [1 - 2^2]}$$

Invertendo-se a ordem dos termos no numerador, tem-se:

$$\frac{\gamma_{m,m}}{\alpha_{m+1}} = \frac{[2^{2m+2} - 2^2] \dots [2^{2m+2} - 2^{2(m-1)}] [2^{2m+2} - 2^{2m}]}{[1 - 2^{2m}] \dots [1 - 2^4] [1 - 2^2]}$$

Colocando-se em evidência, no numerador, 2^2 para o primeiro termo, 2^4 para o segundo, e assim por diante, segue-se que:

$$\frac{\gamma_{m,m}}{\alpha_{m+1}} = \frac{2^2 [2^{2m} - 1] \dots 2^{2(m-1)} [2^4 - 1] 2^{2m} [2^2 - 1]}{[1 - 2^{2m}] \dots [1 - 2^4] [1 - 2^2]}$$

De onde obtêm-se:

$$\frac{\gamma_{m,m}}{\alpha_{m+1}} = (-1)^m 2^2 \times 2^4 \times \dots \times 2^{2m} = (-1)^m 2^{m(m+1)}$$

O erro valerá, então:

$$E = (-1)^m 2^{m(m+1)} E_{m,0}$$

Por outro lado:

$$E_{m,0} = - \frac{(\Delta x)^{2m+2}}{(2m+2)!} \left[2^m \Delta x B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) \right]$$

Como $2^m \Delta x = b - a$, segue-se que:

$$E_{m,0} = - \frac{(b-a)^{2m+2}}{2^{2m(m+1)} (2m+2)!} \left[(b-a) B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi) \right]$$

e o erro valerá:

$$E = (-1)^{m+1} \frac{(b-a)^{2m+3}}{2^{2m(m+1)} (2m+2)!} B_{2m+2} f^{(2m+2)}(\xi)$$

O método de Romberg é de grande utilidade prática, devido à sua simplicidade de execução e ao fato de o erro diminuir com o aumento da ordem $2m+2$ da derivada da função. Para o caso $m=0$, o método reduz-se à regra trapezoidal e para o caso $m=1$, o método reduz a regra de Simpson.

17.5 - INTEGRAIS SINGULARES

Integrais singulares são as que possuem descontinuidade no integrando, ou que tem, pelo menos, um dos limites de integração não-finito. Devem-se distinguir três casos:

- a) Integrando com descontinuidade finita e limites finitos de integração.
- b) Integrando infinito em um ou mais pontos dentro dos limites finitos de integração.
- c) Integrando finito, mas limites infinitos de integração.

O primeiro caso não oferece maior interesse, uma vez que a singularidade pode ser isolada, dividindo-se o intervalo de integração. Para cada subintervalo usa-se, então, qualquer dos métodos já apresentados.

O segundo caso é o de maior interesse prático, por isto será visto com maiores detalhes.

O terceiro caso pode ser reduzido ao segundo por uma conveniente transformação de variáveis, ou calculado usando-se métodos como o de Gauss-Laguerre ou de Gauss-Hermite.

Apresentar-se-ão, a seguir, os métodos para resolução do segundo caso.

17.5.1 - INTEGRAÇÃO PELO MÉTODO DE GAUSS

Considere-se o problema de integrar a função $f(x)$ num intervalo $[a, b]$, sabendo-se que, para um ponto C desse intervalo, o integrando $f(x)$ não é finito.

Sem perda de generalidade, pode-se considerar apenas uma vizinhança de raio $\delta > 0$ do ponto C , uma vez que fora desse intervalo, os métodos já apresentados são aplicáveis.

O intervalo $[C-\delta, C+\delta]$ é então dividido em dois subintervalos, $[C-\delta, C)$ e $(C, C+\delta]$. Para cada um desses subintervalos, aplica-se uma das fórmulas de integração de Gauss. Como essas fórmulas não envolvem os valores dos pontos extremos, a obtenção de um resultado é sempre garantida. Como nem sempre a integral é convergente, reduzindo-se o valor de δ , pode-se determinar a confiabilidade do resultado.

Se a integral converge, tem-se que, para δ suficientemente pequeno, os valores de I_1 e $2I_2$ devem ser aproximadamente iguais, quando I_1 e I_2 são dados, respectivamente, por:

$$I_1 = \int_{C-\sigma}^C f(x) dx$$

e

$$I_2 = \int_{C-\sigma/2}^C f(x) dx$$

Resultado semelhante deve ser obtido para o outro intervalo de integração.

17.5.2 - DECOMPOSIÇÃO DO INTEGRANDO COMO PRODUTO DE FUNÇÕES

O intervalo de integração $[a,b]$ é separado em duas partes $[a,c]$ e $(c,b]$.

A função $f(x)$ é decomposta como o produto de duas funções:

$$f(x) = g(x) \omega(x),$$

com as restrições:

$$\omega(x) > 0 \text{ em } [a,b], \text{ e } g(x)$$

uma função limitada com um número suficiente de derivadas contínuas. A função $\omega(x)$ é considerada como uma função peso para a integração. A seguir aplicam-se os métodos de Gauss aos dois intervalos de integração.

Este tipo de decomposição é mais usado quando, por uma conveniente mudança de variáveis, cada subintervalo é transformado no intervalo $(-1,1)$ e a função peso pode ser colocada nas formas para integração de Gauss-Tchebyshev ou de Gauss-Jacobi.

Outro tipo de decomposição do integrando, como produto de funções, exige a forma particular:

$$f(x) = (x-c)^\alpha g(x), \quad \alpha > -1,$$

onde $g(x)$ pode ser representada em $[a,b]$ por uma fórmula de Taylor com potências de $(x-c)$.

A função $f(x)$ pode, então ser reescrita como:

$$f(x) = (x-c)^\alpha \sum_{k=0}^m \frac{(x-c)^k}{k!} g^{(k)}(c) \\ + (x-c)^\alpha \left[g(x) - \sum_{k=0}^m \frac{(x-c)^k}{k!} g^{(k)}(c) \right]$$

A primeira parcela da decomposição acima é uma série de potências integráveis, sem qualquer dificuldade. Na segunda parcela, a expressão entre colchetes anula-se para $x=c$ e possui todas as derivadas até ordem m , identicamente nulas para este ponto. Consequentemente, seu produto por $(x-c)^\alpha$ não apresentara singularidade no ponto $x=c$.

Assim, a primeira parte da decomposição possui solução analítica, e a segunda pode ser integrável pelos métodos numéricos já apresentados.

A transformação do produto de funções em adição de duas parcelas, uma integrável analiticamente e outra pelos métodos numéricos convencionais, sugere outra alternativa para a integração de funções singulares, que será apresentada a seguir.

17.5.3 - DECOMPOSIÇÃO INTEGRANDO COMO SOMA DE FUNÇÕES

Este método baseia-se na decomposição da função $f(x)$ em soma de duas funções:

$$f(x) = g_1(x) + g_2(x),$$

onde $g_1(x)$ é integrável analiticamente e $g_2(x)$ não apresenta singularidade, sendo integrável pelos métodos numéricos apresentados anteriormente.

Em geral, aplica-se esta solução, quando $f(x)$ é de fácil decomposição. O desenvolvimento por série de Taylor, apresentado na Seção 17.5.2, mostra uma alternativa para o emprego deste método, nos casos menos triviais.

17.6 - INTEGRAIS MÚLTIPLAS

As várias soluções alternativas para a integração de função de uma variável deram ao leitor uma idéia da complexidade do problema. Para a integração de funções de várias variáveis, esta complexidade cresce exponencialmente com o número de variáveis.

Na impossibilidade de uma abordagem satisfatória sobre o assunto, optou-se neste trabalho pela extensão das fórmulas para a integração em uma dimensão. Esta aproximação deve ser, portanto, encarada apenas como uma possível solução para o problema.

Para que o leitor possa avaliar a dificuldade de obtenção de uma solução otimizada, basta lembrar que, no caso de uma variável, a escolha conveniente da distribuição das abcissas melhora consideravelmente a qualidade da aproximação. A escolha dos pontos convenientes para a integração, num espaço n - dimensional, requer previamente a generalização dos polinômios ortogonais para várias variáveis, no momento inexistente.

17.6.1 - FORMA GERAL DAS FÓRMULAS UNIDIMENSIONAIS

As fórmulas mais usadas para calcular a integral definida, de uma função real de uma variável, podem ser colocadas na forma:

$$\int_a^b \omega(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^N a_i f(x_i)$$

O intervalo de integração $[a, b]$ pode ser finito ou infinito. A função peso $\omega(x) \geq 0$ para $x \in [a, b]$ é escolhida de acordo com a conveniência. Os coeficientes a_i e as abscissas x_i são determinados de tal forma que a integração seja exata para todos os polinômios de grau $\geq m$, onde m é um inteiro previamente escolhido.

As fórmulas para dimensões maiores serão generalizadas a partir da forma padrão de fórmulas unidimensionais.

17.6.2 - INTEGRAIS MÚLTIPLAS EM CUBOS N-DIMENSIONAIS

Sem perda de generalidade, os intervalos de integração, para cada variável, serão considerados todos iguais a $[-1, +1]$. Nessas condições, a extensão da forma padrão da Seção 17.6.1 torna-se:

$$\int_{-1}^{+1} \dots \int_{-1}^{+1} \omega(x, \dots, z) f(x, \dots, z) dx \dots dz =$$

$$= \sum_{i=1}^N \dots \sum_{k=1}^N a_i \dots a_k f(x_i, \dots, z_k) ,$$

com $\omega(x, \dots, z) = \omega_1(x) \dots \omega_n(z)$.

É fácil mostrar que polinômios até grau m são integráveis exatamente pela fórmula acima. De fato, considerando-se:

$$f(x, \dots, z) = x^\alpha \dots z^\gamma ,$$

segue-se que:

$$\int_{-1}^{+1} \dots \int_{-1}^{+1} \omega(x, \dots, z) x^\alpha \dots z^\gamma dx \dots dz =$$

$$= \int_{-1}^{+1} \omega_1(x) x^\alpha dx \dots \int_{-1}^{+1} \omega_n(z) z^\gamma dz = \sum_{i=1}^N a_i x_i^\alpha \dots \sum_{k=1}^N a_k z_k^\gamma =$$

$$= \sum_{i=1}^N \dots \sum_{k=1}^N a_i \dots a_k x_i^\alpha \dots z_k^\gamma$$

Respeitada a restrição: $0 \leq \alpha, \dots, \gamma \leq m$, cada uma das fórmulas unidimensionais integra exatamente o seu polinômio correspondente de grau m . Assim, a fórmula generalizada integra exatamente um polinômio de grau até m .

Pela sua forma, essa fórmula para integração n - dimensional é chamada "fórmula de produto cartesiano".

Para utilização da fórmula aqui apresentada, é previamente necessário fazer a conversão do problema para coordenadas cartesianas e as transformações de variáveis, para reduzir cada um dos intervalos de integração em $[-1, +1]$.

A fórmula de produto cartesiano é particularmente útil, quando se substitui a função $f(x, \dots, z)$ por um polinômio interpolador n - dimensional.

EXERCÍCIOS

1. Para o método de integração de Newton-Côtes, mostre que:

$$C_{1+K} = C_{N-K} \quad , \quad K=0, \dots, N/2 \quad , \quad \text{no caso de } N \text{ par e,}$$

$$C_{1+K} = C_{N-K} \quad , \quad K=0, \dots, (N-1)/2 \quad \text{no caso de } N \text{ ímpar}$$

2. Mostre que, para o método de Newton-Côtes:

$$\sum_{i=1}^N C_i = b-a,$$

onde $b-a$ é o comprimento do intervalo de integração.

3. Encontre os coeficientes C_i listados nas Tabelas XVII.1 e XVII.2 para o método de integração de Newton-Côtes.

4. Mostre que a função $q_N(y)$, definida na Seção 17.2.1, é simétrica:

Sugestão: Use a transformação de variável $y=N-z$.

5. Justifique por que $q_N(i)$, $i=1, \dots, N$ são pontos extremos da função $q_N(y)$.

6. Detalhe as considerações que permitem concluir a relação apresentada na Seção 17.2.1:

$$\left| \frac{I_{i+1}}{q_N(i+1)} \right| < 1$$

7. Integrando por partes, mostre que:

$$\int_1^N q_N(y) dy = \int_1^N y \sum_{i=1}^N (y-i) dy.$$

8. Determine a relação entre $f[x_1, \dots, x_n, x]$ e $f[1, \dots, N, y]$, resultante da transformação de variáveis usada na Seção 17.2.1.
9. Na Seção 17.2.1, justifique por que o integrando de E_2 é negativo no intervalo $[N-1, N]$, e o integrando de E_1 é positivo no intervalo $[1, N-1]$.
10. Determine a expressão do erro do método de Newton-Côtes para $N=2,3,4,5$, nos casos de fórmulas tanto abertas, quanto fechadas.
11. Encontre o erro do método de integração de Newton-Côtes, usando fórmulas abertas.
12. Determine o erro de arredondamento num processo de adições sucessivas de quantidades exatas. Usando-se esse resultado, e supondo-se que num processo de integração a importância individualizada de cada ponto varia na forma $1/N$, estabeleça a curva resultante do efeito aditivo destes dois fatores.
13. Mostre que a função auxiliar do polinômio interpolador de Hermite, $\psi_{1i}(x)$, pode ser escrita na forma:

$$\psi_{1i}(x) = \frac{\pi(x)}{\pi'(x_i)} \psi_i(x),$$

onde $\psi_i(x)$ é a função auxiliar do polinômio interpolador de Lagrange e $\pi(x)$ é dada por:

$$\pi(x) = \prod_{i=1}^N (x-x_i).$$

14. Mostre que a função auxiliar de Hermite, $\psi_{0i}(x)$, relaciona-se com a função do polinômio interpolador de Lagrange por:

$$\psi_{0i}(x) = \psi_i^2(x).$$

15. Usando-se os métodos das Seções 17.3.2 e 17.3.3, determine os coeficientes e abscissas para a interpolação pelo método de Gauss-Legendre, usando $N=3$. Compare os resultados obtidos e discuta a validade do uso deste método em lugar do processo geral da Seção 17.3.3. Verifique a propagação de erros nos dois casos.
16. Mostre que na integração pelo método de Gauss-Tchebyshev todos os coeficientes são iguais. Discuta essa propriedade como minimizadora de erros computacionais.
17. No caso de $N=3$, determine os coeficientes da integração de Gauss-Tchebyshev, usando o método da Seção 17.3.3. Verifique se os erros computacionais não afetam a propriedade de identidade dos coeficientes.
18. Considere a fórmula composta da regra do trapézio e a fórmula de Newton-Côtes para $N=5$. Compare-as com relação aos seguintes aspectos:
 - a - Precisão.
 - b - Erros computacionais (arredondamento).
19. Compare a fórmula composta da regra do trapézio com a fórmula de Gauss-Tchebyshev, para $N=6$, do ponto de vista de erros computacionais.
20. Para $N=3$, determine a expressão para a integral da "spline" cúbica e compare o resultado com a regra de Simpson, do ponto de vista de precisão.
21. Para $N=5$, compare o método de Gauss-Tchebyshev com o método de Romberg, do ponto de vista de erros computacionais.

22. Usando fórmulas de Gauss com $N=2$, determine o valor da integral:

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

23. Decompondo o integrando como produto de funções, e utilizando $N=4$; integre:

$$\int_{-1}^{+1} \frac{dx}{(1-x^4)^{1/2}}$$

24. Usando a identidade: $\ln \sin x = \ln x + \ln \frac{\sin x}{x}$ e o método de Romberg, para $N=3$, integre:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \ln \sin x dx$$

25. Usando $N=5$ e a fórmula de produto cartesiano para integral múltipla, calcule:

$$\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} (x^2+y^2-1)^{1/2} dx dy$$

BIBLIOGRAFIA

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.A. *Handbook of mathematical functions with formulas graphs, and mathematical tables.* Washington, U.S. Government Printing Office, 1964.
- BEREZIN, I.S.; ZHIDKOV, N.P. *Computing methods.* Reading, MA., Addison-Wesley, 1965.
- CARNAHAN, B.; LUTHER, H.A.; WILKES, J.O. *Applied numerical methods.* New York, Wiley, 1969.
- HILDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis.* New York, MacGraw-Hill, 1956.
- ISAACSON, E.; KELLER, H.B. *Analysis of numerical methods.* New York, Wiley, 1966.
- RALSTON, A. *A first course in numerical analysis.* New York, MacGraw-Hill, 1964.
- RALSTON, A.; WILF, H.S. *Mathematical methods for digital computers.* New York, Wiley, 1968. v. 1 e 2.
- SELLY, S.M. *Standard mathematical tables.* Cleveland, Chemical Rubler, 1964.
- WENDROFF, B. *Theoretical numerical analysis.* London, Academic, 1966.

CAPÍTULO XVIII

TEORIA DAS APROXIMAÇÕES

18.1 - INTRODUÇÃO

A resolução de problemas matemáticos implica, em geral, o aparecimento de uma solução $f(x)$ contínua, num intervalo (a,b) . Essa função constitui um vetor de infinitas componentes, definindo num espaço euclidiano de infinitas dimensões (ver Capítulo III).

Os computadores digitais não permitem a representação de entidades infinitas. Por essa razão, toda a solução numérica obtida por esses computadores implicará uma aproximação, resultante da contração do espaço euclidiano, de infinitas dimensões E_∞ , num espaço euclidiano finito, E_N . Assim haverá necessariamente uma perda de informações, expressas por um erro dado pela diferença entre o valor desejado e aproximação obtida.

O estudo do erro, acima mencionado, é um dos objetivos da teoria das aproximações, que será apresentada neste capítulo.

18.2 - MATRIZ DE CONVERSÃO DE UM SUBESPAÇO DO E_∞ PARA UM SUBESPAÇO DO E_N

A contração de um subespaço do E_∞ para um subespaço do E_N escreve-se como:

$$\sum_i f(x_i) \tilde{x}_i = \underline{\underline{C}} \sum_x f(x) \tilde{x}$$

Verifica-se facilmente que a matriz C vale:

$$\underline{\underline{C}} = \sum_i \sum_x \delta(x - x_i) \tilde{x} \tilde{x}_i.$$

De fato, a contração dada pelo produto matricial torna-se:

$$\underline{C} \int_x f(x) \bar{x} = \int_i U \delta(x - x_i) \bar{x}, \int_x U f(x) \bar{x} = \int_i U f(x_i) \bar{x}_i$$

Uma primeira constatação é que o único autovetor da transformação, dado pela relação:

$$\underline{C} \underline{v} = \lambda \underline{v}$$

ocorre para $f(x) = C = \text{constante}$. Assim, exceto o caso trivial em que $f(x)$ é constante, todos os outros casos implicarão uma única perda de informação em virtude da contração. Isto acontece devido à inexistência de outros invariantes da transformação.

À primeira vista, pelo exposto acima, pode parecer que soluções exatas não poderão ser obtidas, usando-se o espaço N-dimensional no lugar do espaço de infinitas dimensões. Entretanto, isto não ocorre em virtude da arbitrariedade com que pode ser escolhida a base do espaço E_∞ . O teorema a seguir justifica este fato.

TEOREMA: toda função $\phi(x)$, expressa como combinação linear de N outras funções $\phi_i(x)$, é um invariante da transformação acima, desde que escolhida convenientemente a base do espaço E_∞ .

PROVA: considere $\phi(x)$ dada por:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(x).$$

Nessas condições,

$$\int_x U \phi(x) \bar{x} = \int_x U \int_i c_i \phi_i(x) \bar{x} = \int_i c_i \int_x U \phi_i(x) \bar{x} = \int_i c_i \underline{u}_i.$$

Definindo-se os novos versores do espaço como:

$$\underline{u}_i = \sum_x \phi_i(x) \tilde{x},$$

segue-se que a matriz de transformação, neste caso, é uma matriz A, tal que:

$$\sum_j \phi(x_j) \tilde{x}_j = \sum_i \underline{A}_{ij} c_i \underline{u}_i.$$

Usando-se a notação:

$$\underline{A} = \sum_i \sum_j \underline{A}_{ij} \underline{u}_i \tilde{x}_j$$

e impondo-se a restrição:

$$\langle \underline{u}_i, \underline{u}_k \rangle = \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = k \\ 0, & \text{se } i \neq k, \end{cases}$$

a realização do produto matricial leva à seguinte identidade:

$$\sum_{i=1}^N \underline{A}_{ij} c_i = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(x_j).$$

Esta identidade revela dois pontos importantes:

a) os elementos da matriz A são dados por:

$$a_{ij} = \phi_i(x_j);$$

b) qualquer combinação linear das $\phi_i(x)$ é autovetor da transformação, com auto valor igual a 1.

Este teorema é de grande importância, pois justifica fatos já verificados nos capítulos anteriores, como a possibilidade de integrar exatamente os polinômios, usando-se métodos numéricos.

18.3 - MÉTRICA DO ESPAÇO VETORIAL DE FUNÇÕES

A avaliação do erro de uma aproximação requer o estabelecimento de uma relação de ordem. Para isso é necessário associar ao espaço vetorial de funções uma métrica.

Considerem-se dois vetores, \underline{v}_1 e \underline{v}_2 , do espaço vetorial. A esses vetores será associada um número real $d(\underline{v}_1, \underline{v}_2)$, chamado distância de \underline{v}_1 a \underline{v}_2 , tal que:

- a) $d(\underline{v}_1, \underline{v}_2) > 0$ se $\underline{v}_1 \neq \underline{v}_2$
- b) $d(\underline{v}_1, \underline{v}_1) = 0$
- c) $d(\underline{v}_1, \underline{v}_2) = d(\underline{v}_2, \underline{v}_1)$
- d) $d(\underline{v}_1, \underline{v}_2) \leq d(\underline{v}_1, \underline{v}_3) + d(\underline{v}_2, \underline{v}_3)$,

para $\underline{v}_1, \underline{v}_2, \underline{v}_3$ pertencentes ao espaço vetorial.

É fácil mostrar que o módulo da diferença entre dois vetores satisfaz as condições acima. Assim, aqui será adotada a distância dada por:

$$d(\underline{v}_1, \underline{v}_2) = |\underline{v}_1 - \underline{v}_2|.$$

18.4 - APROXIMAÇÃO ÓTIMA

Mostrou-se na seção 18.2 que, escolhida uma base com vetores:

$$\underline{u}_i = \int_X \phi_i(x) \bar{x},$$

fica definido um subespaço, \underline{S} , do E_∞ , dado por vetores:

$$\underline{v} = \int_i c_i \underline{u}_i, \quad i = 1, \dots, N$$

invariantes por amostragem no E_N . Assim, $\underline{v} \in \underline{S}$ pode também ser posto na forma:

$$\underline{v} = \int_i \phi(x_i) \bar{x}_i.$$

Considerando-se agora um vetor \underline{w} do E_∞ , expresso como:

$$\underline{w} = \int_X f(x) \bar{x},$$

mostrar-se-á que existe em \underline{S} um vetor \underline{v} , tal que a distância $d(\underline{v}, \underline{w})$ é mínima. Esse vetor é chamado aproximação ótima de \underline{w} em \underline{S} , ou projeção de \underline{w} em \underline{S} .

TEOREMA: dado \underline{w} vetor do E_∞ e um subespaço \underline{S} do E_∞ , existe um único vetor $\underline{v} \in \underline{S}$, tal que a distância $(\underline{v}, \underline{w})$, é mínima.

PROVA DA EXISTÊNCIA: considere um vetor qualquer $\underline{s} \in \underline{S}$. A distância $d(\underline{w}, \underline{s})$ será dada por:

$$d(\underline{w}, \underline{s}) = + \sqrt{\langle \underline{w} - \underline{s}, \underline{w} - \underline{s} \rangle}.$$

Aqui interessa apenas caso em que $\underline{w} \notin \underline{S}$, pois o caso $\underline{w} \in \underline{S}$ é trivial. Para o caso $\underline{w} \notin \underline{S}$, $d(\underline{w}, \underline{s})$ não se anula. Então existe um supremo dos limites inferiores, do conjunto de valores $d(\underline{w}, \underline{s})$. Seja $\nu > 0$ esse supremo.

Tomando-se uma seqüência de vetores $\underline{s}_n \in \underline{S}$, tal que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d(\underline{w}, \underline{s}_n) = \nu$$

deve-se mostrar que essa sequência converge, uma vez que a sequência e valores $d(\underline{w}, \underline{s}_n)$ também converge.

Considere-se primeiramente a sequência convergente de valores $|\underline{w} - \underline{s}_n|^2$, cujo limite é v^2 . Para esta sequência, dado $\epsilon > 0$, é possível encontrar um N , tal que:

$$|\underline{w} - \underline{s}_n|^2 < v^2 + \epsilon$$

para todo $n > N$. Seja $M > N$, então vale a relação:

$$\begin{aligned} & |(\underline{w} - \underline{s}_n) + (\underline{w} - \underline{s}_m)|^2 + |(\underline{w} - \underline{s}_n) - (\underline{w} - \underline{s}_m)|^2 = \\ & 2|\underline{w} - \underline{s}_n|^2 + 2|\underline{w} - \underline{s}_m|^2 < 4(v^2 + \epsilon). \end{aligned}$$

Reagrupando-se esta relação tem-se:

$$|\underline{s}_m - \underline{s}_n|^2 < 4(v^2 + \epsilon) - 4|\underline{w} - 1/2(\underline{s}_n + \underline{s}_m)|^2$$

Como vetor $1/2(\underline{s}_n + \underline{s}_m)$ pertence ao espaço vetorial \underline{S} pela definição do supremo dos limites inferiores, vale a relação:

$$|\underline{w} - 1/2(\underline{s}_n + \underline{s}_m)|^2 \geq v^2$$

Assim, o maior valor para o lado direito da desigualdade reagrupada vale 4ϵ , de onde:

$$|\underline{s}_m - \underline{s}_n|^2 < 4\epsilon$$

o que mostra a convergência da sequência de vetores \underline{s}_n . O limite \underline{v} dessa sequência pertence a \underline{S} .

Prova da Unicidade: para o vetor $\underline{v} \in \underline{S}$, tem-se a igualdade:

$$|\underline{w} - \underline{v}|^2 = v^2.$$

Suponha-se agora que exista outro vetor $\underline{u} \in \underline{S}$, para o qual a mesma igualdade é satisfeita, ou seja:

$$|\underline{w} - \underline{u}|^2 = v^2.$$

Segue-se que :

$$|\underline{w} - \underline{v}|^2 = |\underline{w} - \underline{u}|^2,$$

de onde $\underline{v} = \underline{u}$.

18.5 - ORTOGONALIDADE DO ERRO DA APROXIMAÇÃO ÓTIMA

O teorema abaixo relaciona o erro da aproximação ótima com os vetores do subespaço \underline{S} .

Teorema: o erro da aproximação ótima é ortogonal a todos vetores do subespaço \underline{S} .

Prova: usando-se a mesma notação da seção anterior, o erro será dado pelo vetor $\underline{w} - \underline{v}$. Tomando-se um vetor qualquer $\underline{s} \in \underline{S}$ e considerando-se a um escalar, pode-se escrever a relação

$$|\underline{w} - \underline{v}|^2 \leq |(\underline{w} - \underline{v}) + a\underline{s}|^2 = |\underline{w} - \underline{v}|^2 + 2a \langle \underline{w} - \underline{v}, \underline{s} \rangle + a^2 |\underline{s}|^2$$

de onde segue que:

$$a^2 |\underline{s}|^2 + 2a \langle \underline{w} - \underline{v}, \underline{s} \rangle \leq 0$$

Usando-se:

$$a = - \frac{\langle \underline{w} - \underline{v}, \underline{s} \rangle}{|\underline{s}|^2}$$

resulta:

$$- \left\{ \frac{\langle \underline{w} - \underline{v}, \underline{s} \rangle}{|\underline{s}|} \right\}^2 \geq 0,$$

o que implica necessariamente:

$$\langle \underline{w} - \underline{v}, \underline{s} \rangle = 0$$

18.6. - TEOREMA DE KHAAR GENERALIZADO

Uma versão particularizada do teorema abaixo foi demonstrado por Khaar, para o caso em que as funções $\phi_i(x)$, $i = 1, \dots, N$ são polinômios. Aqui, o que interessa é o caso geral.

Teorema: para que a aproximação ótima seja única, as funções $\phi_i(x)$ da seção 18.2 devem constituir um sistema de Tchebyshev.

Prova: primeiramente, deve-se mostrar a ambiguidade da aproximação ótima para o caso em que

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(x)$$

possui N zeros no intervalo (a, b).

Considere-se a aproximação ótima dada por:

$$\underline{v} = \int_x \phi(x) \bar{x},$$

determinada a partir do teorema da Seção 18.2, usando-se os valores conhecidos de $f(x)$ para um conjunto discreto de pontos $\{x_i\}$, $i=1, \dots, N$.

Supondo-se agora que os N zeros da função $\psi(x)$ sejam exatamente os pontos x_i , para os quais $f(x)$ é conhecida, então:

$$\sum_i \phi_i(x_i) \bar{x}_i = \sum_i [\psi(x_i) + \phi(x_i)] \bar{x}_i,$$

de onde segue-se que os coeficientes que expressam $\phi(x)$, como combinação linear das $\phi_i(x)$, não serão univocamente determinados.

Uma vez que nenhuma combinação linear das $\phi_i(x)$ pode possuir N zeros no intervalo (a, b) , então as $\phi_i(x)$ constituem um sistema de Tchebyshev.

18.7 - DETERMINAÇÃO DA APROXIMAÇÃO ÓTIMA

A determinação da aproximação ótima é feita, em geral, utilizando-se a relação de ortogonalidade do erro:

$$\langle \underline{w} - \underline{v}, \underline{s} \rangle = 0, \underline{s} \in \underline{S}.$$

Considerando-se que:

$$\underline{w} = \sum_x f(x) \bar{x}, \text{ e } \underline{v} = \sum_x \phi(x) \bar{x},$$

e tomando-se a base de vetores \underline{u}_j , resulta da relação de ortogonalidade:

$$\int_a^b f(x) \phi_j(x) dx = \int_a^b \phi(x) \cdot \phi_j(x) dx.$$

O caso em que as $\phi_j(x)$ formam um conjunto ortogonal é de grande interesse. Quando isto acontece, os coeficientes c_j da expressão de $\phi(x)$, em termos das $\phi_j(x)$ valem:

$$c_i = \frac{1}{\int_a^b \phi_i^2(x) dx} \int_a^b f(x) \phi_i(x) dx.$$

18.8 - APROXIMAÇÃO POLINOMIAL ÓTIMA

Quando se tem o conjunto de funções:

$$\phi_i(x) = x^{i-1}, \quad i = 1, \dots, N$$

e $f(x)$ conhecida para um conjunto de pontos $\{x_j\}$, a aproximação ótima será obtida quando:

$$\sum_{j=1}^N f(x_j) \phi_i(x_j) = \sum_{j=1}^N \phi(x_j) \phi_i(x_j),$$

que é satisfeita quando $f(x_j) = \phi(x_j)$.

Neste caso, o polinômio interpolador de Lagrange é a aproximação ótima.

18.9 - APROXIMAÇÃO TRIGONOMÉTRICA ÓTIMA-APROXIMAÇÃO DE FOURIER

Quando a função $f(x)$ pode ser transformada por mudança de variável numa função periódica, de período 2π , um conjunto conveniente de função $\phi_j(x)$ é:

$$\begin{aligned} &\phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x), \phi_4(x) \dots \\ &1, \text{sen } x, \text{cos } x, \text{sen } 2x \dots \end{aligned}$$

É simples mostrar que este conjunto de funções ortogonais, no intervalo $(-\pi, \pi)$

Supondo-se que $f(x)$ seja inteiramente conhecida no intervalo $(-\pi, \pi)$, os coeficientes c_i serão dados por:

$$c_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx$$

$$\left. \begin{aligned} c_{2k+1} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos k x dx \\ c_{2k} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \operatorname{sen} k x dx \end{aligned} \right\} k = 1, 2, \dots$$

Supondo-se que $f(x)$ seja conhecida apenas para um conjunto discreto, contendo $N = 2n + 1$ pontos igualmente espaçados no intervalo $(-\pi, \pi)$, pode-se demonstrar que a ortogonalidade não é destruída e os coeficientes c_i , neste caso, tornam-se:

$$c_1 = \frac{1}{2n} \sum_{j=1}^N f(x_j)$$

$$\left. \begin{aligned} c_{2k+1} &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^N f(x_j) \cos k x_j \\ c_{2k} &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^N f(x_j) \operatorname{sen} k x_j \end{aligned} \right\} k = 1, 2, \dots$$

18.10 - APROXIMAÇÃO EXPONENCIAL ÓTIMA

Supondo-se que o conjunto de funções $\phi_i(x)$ é dado por:

$$\phi_i(x) = \exp(k_i x), \quad i = 1, \dots, N$$

e que $f(x)$ é conhecida para um conjunto de ponto $\{x_j\}$, a aproximação ótima será obtida quando;

$$f(x_j) = \phi(x_j)$$

A determinação dos coeficientes c_i , que expressam $\phi(x)$ como sendo combinação linear das $\phi_i(x)$, é feita, usando-se o método de Prony.

18.10.1 - MÉTODO DE PRONY

Primeiramente, supõe-se que uma transformação linear de variável tenha sido feita, a fim de que o conjunto de pontos $\{x_j\}$, para os quais $f(x)$ é conhecida, seja o conjunto dos inteiros:

$$\{0, 1, 2, \dots, N-1\}.$$

Introduzindo-se a notação $z_i = \exp k_i$, $i = 1, \dots, N$, o sistema que permite determinar os coeficientes c_i torna-se:

$$c_1 + c_2 + \dots + c_N = f(0)$$

$$c_1 z_1 + \dots + c_N z_N = f(1)$$

.

.

.

$$c_1 z_1^m + \dots + c_N z_N^m = f(m).$$

No caso em que o valor dos k_i não é prefixado, será necessário o conhecimento de $f(x)$ para $2N$ pontos: $0, 1, 2, \dots, 2N-1$.

Quando os k_i são conhecidos, o sistema acima é um sistema linear de N equações, com N incógnitas: c_1, \dots, c_N . Neste caso $m = N-1$.

Quando os k_i não são conhecidos, o sistema acima é um sistema não-linear de $2N$ equações, com $2N$ incógnitas:

$$c_1, \dots, c_N, z_1, \dots, z_N; \text{ Neste caso } m = 2N-1.$$

A determinação dos c_i e k_i do sistema não linear é feita, usando-se o método já apresentado no capítulo anterior, Seção 17.3.3. O polinômio auxiliar, neste caso, será:

$$\pi(z) = \prod_{i=1}^N (z - z_i) = \sum_{j=0}^N a_j z^j.$$

A técnica de concentrar a não-linearidade do sistema no polinômio $\pi(z)$ é chamada método de Prony.

18.11 - MELHORIA DA APROXIMAÇÃO POLINOMIAL ÓTIMA PELA ESCOLHA DAS AB CISSAS

Quando o valor de $f(x)$ é conhecido para um conjunto de pontos $\{x_j\}$, o polinômio interpolador de Lagrange constitui a aproximação polinomial ótima, que pode ser escrita na forma:

$$f(x) = \phi(x) + \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} \pi(x),$$

onde

$$\pi(x) = \prod_{j=1}^N (x - x_j).$$

Neste caso, não se tem controle sobre o erro que está univocamente determinado pelo valor das abscissas x_j e pela natureza da função $f(x)$.

Quando, entretanto, o valor de $f(x)$ é conhecido para todos os pontos do intervalo (a, b) , a fórmula interpoladora de Lagrange pode ser melhorada pela escolha conveniente das abscissas x_j , como mostrado a seguir.

Uma vez que a natureza da função $f(x)$ não é conhecida a priori, o único elemento de controle que se dispõe no termo corretivo é $\pi(x)$. Usando-se a notação:

$$M = \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}$$

o erro máximo da aproximação será descrito pelo vetor:

$$\underline{w} - \underline{v} = \int_x M \pi(x) \hat{x},$$

cujo valor mínimo ocorre quando é satisfeita a relação de ortogonalidade, como respeito aos vetores da base vetorial:

$$\underline{u}_i = \int_x \phi_i(x) \hat{x} = \int_x x^{i-1} \hat{x}$$

o que leva à relação:

$$\int_a^b \pi(x) x^{i-1} dx = 0.$$

Considerando-se, para maior generalidade, o produto escalar ponderado por uma função peso $\omega(x) > 0$, esse resultado é transformado em:

$$\int_a^b \omega(x) \pi(x) x^{i-1} dx = 0.$$

Lembrando-se do que foi exposto na Seção 17.3.2, vê-se que esta relação é satisfeita quando $\pi(x)$ pertence ao conjunto de função ortogonais em (a, b) , com relação ao peso $\omega(x)$.

Considerando-se agora o aspecto do erro individualizado, interessa saber, dentre os vários conjuntos de polinômios ortogonais, qual deles minimiza o máximo valor absoluto da amplitude de $\pi(x)\bar{x}$. Resolve-se este problema pelo teorema de Tchebyshev..

Teorema (Tchebyshev): dentre todos os polinômios de grau N , com coeficiente de x^N unitário, o polinômio de Tchebyshev de grau N , multiplicado por $1/2^{N-1}$, oscila com mínima amplitude máxima no intervalo $(-1,1)$.

Prova: primeiramente considere-se a expressão do polinômio de Tchebyshev de grau N :

$$T_N(x) = \cos (N \cos^{-1} x),$$

que possui N zeros em:

$$x = \cos \left[\frac{(2j + 1)\pi}{2N} \right], \quad j = 0, \dots, N-1$$

e $N + 1$ pontos extremos (máximos e mínimos), com amplitude unitária em:

$$x = \cos \left\{ \frac{j\pi}{N} \right\}, \quad j = 0, \dots, N.$$

Tomando-se em seguida:

$$\pi(x) = 2^{-(N-1)} T_N(x),$$

resulta que $\pi(x)$ possuirá $N + 1$ pontos extremos, com amplitudes $\pm 2^{-(N-1)}$ no intervalo $(-1, 1)$.

Para provar por contradição, considere-se a existência de outro polinômio $\bar{\pi}(x)$, com coeficiente de x^N unitário e cujo máximo valor absoluto, no intervalo $(-1, 1)$, é menor que $2^{-(N-1)}$. Então, o polinômio dado pela diferença:

$$D(x) = \bar{\pi}(x) - \pi(x)$$

é negativo para os máximos de $T_N(x)$, e positivo para os mínimos deste polinômio. Como $T_N(x)$ assume valores extremos em $N + 1$ pontos, no intervalo $(-1, 1)$, a diferença $D(x)$ deve anular-se em N pontos desse intervalo. Mas, por hipóteses, o coeficiente de x^N , dos polinômios $\pi(x)$ e $\bar{\pi}(x)$, é unitário, de onde se segue que $D(x)$ é um polinômio de grau $N-1$. Logo, $D(x)$ não pode possuir N zeros no intervalo $(-1, 1)$; assim, chega-se à contradição. Então, $\pi(x)$ é o polinômio que possui mínima amplitude máxima no intervalo $(-1, 1)$.

18.12 - INTERPOLAÇÃO DE TCHEBYSCHEV

Uma vez que os polinômios de Tchebyshev satisfazem a condição de mínimo erro, tanto do ponto de vista de distribuição, como do aspecto individualizado, a escolha desses polinômios para a base do espaço vetorial E_N , parece lógica.

Tomando-se os vetores base como:

$$\underline{b}_i = \int_x T_{i-1}(x) \bar{x}, \quad i = 1, \dots, N,$$

a função interpoladora de Lagrange, $\phi(x)$, passará a ser expressa como:

$$\phi(x) = \sum_{i=0}^{N-1} d_i T_i(x).$$

Generalizando-se o polinômio interpolador, para o caso em que $f(x)$ é conhecida para todos os pontos do intervalo $(-1,1)$, e usando-se a condição de ortogonalidade do erro, os coeficientes d_i serão dados por:

$$d_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x) T_0(x)}{(1-x^2)^{1/2}} dx$$

$$d_i = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x) T_i(x)}{(1-x^2)^{1/2}} dx, \quad i = 1, \dots, N-1$$

Analogamente ao caso da aproximação de Fourier, demonstra-se facilmente que, no caso discreto, a ortogonalidade não é perdida e, neste caso, os coeficientes d_i serão calculados por:

$$d_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j)$$

$$d_i = \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j) T_i(x_j), \quad i = 1, \dots, N-1$$

O erro da aproximação é facilmente calculado, valendo:

$$E(x) = \frac{1}{2^N} \left[\int_{-1}^1 \frac{f^{(N)}(\xi) T_N(x)}{(1-x^2)^{1/2}} dx \right] T_N(x)$$

para o caso contínuo, e:

$$E(x) = \frac{1}{2^N} \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} T_N(x)$$

para o caso discreto.

Cumpra ressaltar que se $f(x)$ é conhecida para todo intervalo $(-1, 1)$, então ela poderá ser expressa exatamente por uma série infinita de polinômios de Tchebyshev. A necessidade de truncamento no polinômio de grau N aparece apenas no caso discreto, devido à limitação do conhecimento de $f(x)$, a um conjunto de N pontos $\{x_j\}$.

18.13 - REDUÇÃO DO NÚMERO DE TERMOS NAS SÉRIES DE POTÊNCIA

A implementação das funções "intrínsecas", nos compiladores das várias linguagens de programação, deu origem ao problema de encontrar o menor número de termos de uma série de potências, para aproximar uma função dada com um erro estipulado.

Como mostrado na Seção 18.12, o polinômio de Tchebyshev é o que minimiza o máximo erro de $f(x)$ para $x \in (-1, 1)$. Assim, a solução desse problema torna-se simples, bastando exprimir $f(x)$ em série de Tchebyshev, determinando-se o menor valor de N , tal que:

$$\left| \frac{1}{2^N} \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} T_N(x) \right| < \epsilon,$$

onde ϵ é o máximo erro estipulado e, em seguida, determinar a série de potências, usando-se uma tabela de conversão de polinômios de Tchebyshev em série de potência.

18.14 - APROXIMAÇÃO POR FUNÇÕES RACIONAIS

Este tópico é também concernente ao problema de implementação de funções intrínsecas em computadores.

A idéia que será aqui desenvolvida, é a de aproximar não $f(x)$, mas $\phi_b(x) f(x)$, por meio de uma função $\phi_a(x)$. Então, escreve-se a equação básica, como:

$$\phi_b(x) f(x) = \phi_a(x) + E(x),$$

onde $\phi_a(x)$ e $\phi_b(x)$ são expressos como sendo combinação linear dos vetores de uma base do espaço N dimensional.

Como nos casos precedentes, o menor erro ocorre quando as funções $\phi_a(x)$ e $\phi_b(x)$ são expressas como sendo combinação linear dos polinômios de Tchebyshev:

$$\phi_a(x) = \sum_{i=0}^n a_i T_i(x)$$

$$\phi_b(x) = \sum_{j=0}^m b_j T_j(x)$$

sendo $m + n = N - 2$.

Os coeficientes a_i e b_j são calculados, impondo-se que o vetor do erro, $\int_x E(x) \bar{x}$, seja ortogonal aos vetores da base do espaço N dimensional, dados por:

$$\underline{u}_k = \int_x T_{k-1}(x) \bar{x}, \quad k = 1, \dots, N,$$

resultando assim as relações:

$$\sum_{j=0}^m b_j \int_{-1}^1 \frac{f(x) T_j(x) T_0(x)}{(1-x^2)^{1/2}} dx = \pi a_0$$

$$\sum_{j=0}^m b_j \int_{-1}^1 \frac{f(x) T_j(x) T_i(x)}{(1-x^2)^{1/2}} dx = \frac{\pi}{2} a_i \quad i = 1, \dots, n$$

$$\sum_{j=0}^m b_j \int_{-1}^1 \frac{f(x) T_j(x) T_i(x)}{(1-x^2)^{1/2}} dx = 0 \quad i = n+1, \dots, N-1$$

Esta última relação mostra que os coeficientes b_j são determinados por um sistema homogêneo de equações lineares. Assim, pode-se admitir, pelo menos, um valor arbitrário, por exemplo $b_m = 1$. Determinados os b_j , pelas duas relações anteriores, os a_i são facilmente determinados.

Uma vez determinados todos os coeficientes, a aproximação racional, $\phi(x)$, para $f(x)$ é escrita como:

$$\phi(x) = \frac{\phi_a(x)}{\phi_b(x)}$$

Uma crítica a este tipo de aproximação é que nem sempre as integrais, que envolvem $f(x)$, são facilmente calculáveis analiticamente. Por essa razão, muitos algoritmos têm sido desenvolvidos, visando contornar esse problema.

O erro da aproximação racional é determinado por analogia, com a fórmula interpoladora de Lagrange, e vale:

$$\frac{E(x)}{\phi_b(x)} = \frac{[f(x) \phi_b(x)]^{(N)}}{N! \phi_b(x)} \frac{T_N(x)}{2^{N-1}}$$

Embora os valores de n e m possam ser quaisquer, apenas o caso em que os valores de n e m diferem, no máximo de uma unidade, apresenta interesse prático.

EXERCÍCIOS

1. Detalhe a obtenção da identidade:

$$\sum_{i=1}^N a_{ij} C_i = \sum_{i=1}^N C_i \phi_i(x_j).$$

2. Usando o teorema da Seção 18.2, mostre que para determinar completamente um polinômio de grau N , é necessário o conhecimento dos valores do polinômio para $N + 1$ pontos distintos.

3. Mostre que $|\underline{v}_1 - \underline{v}_2|$ satisfaz a definição de distância entre vetores.

4. Demonstre a relação

$$\begin{aligned} |(\underline{w} - \underline{s}_n) + (\underline{w} - \underline{s}_m)|^2 + |(\underline{w} - \underline{s}_n) - (\underline{w} - \underline{s}_m)|^2 = \\ 2|\underline{w} - \underline{s}_n|^2 + 2|\underline{w} - \underline{s}_m|^2. \end{aligned}$$

5. Mostre que o critério usado para a determinação da aproximação ótima (Seção 18.4) é equivalente ao critério dos resíduos ponderados (Seção 4.2).

6. Mostre que o teorema da Seção 18.2 aplica-se ao conjunto de funções $\phi_i(x) = x^{i-1}$, $i = 1, \dots, N$, embora a simplificação de ortogonalidade dos vetores base não possa ser usada.

7. Demonstre a ortogonalidade das funções: $1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \dots$, no caso discreto.

8. Mostre que o método de Prony pode ser usado para a determinação do período de $f(x)$, quando $f(x) = \cos(2\pi/T)x$.
(Sugestão: expresse o cos através de uma combinação linear de exponenciais).

9. Detalhe o procedimento para determinação dos c_i e k_i no método de Prony.
10. Mostre que a métrica associada ao produto escalar ponderado satisfaz a definição da distância.
11. Mostre que os polinômios de Tchebyshev estão associadas ao critério minimax (Seção 4.3).
12. Desenvolva $\cos(x)$ em séries de Tchebyshev e de Taylor em torno do ponto zero. Compare o número de termos necessários para uma precisão $\epsilon = 0,001$.
13. Converta a série de Tchebyshev, do exercício anterior, em série de potências. Verifique o menor número de termos desta, em relação à série Taylor.
14. Mostre que a função $f(x) = \cos^{-1}x$ pode ser aproximada, por funções racionais, conforme o método da Seção 18.14.
(Sugestão: mostre que as integrais para determinação dos coeficientes possuem solução analítica).

BIBLIOGRAFIA

- BEREZIN, I.S.; ZHIDKOV, N.P. *Computing Methods*. Reading, MA Addison-Wesley, 1965. v. 1.
- CARNAHAN, B.; LUTHER, H.A.; WILKES, J.O. *Applied Numerical Methods*. New York, John Wiley, 1969.
- FRIEDMAN, B. *Principles and techniques of applied Mathematics*. New York, Wiley, 1966.
- HILDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis*. New York MacGraw-Hill, 1965.
- LEGRAS, J. *Précis d'analyse numérique*. Paris, Dunod, 1963.
- RALSTON, A. *A First course in numerical analysis*. New York, McGraw-Hill, 1964.
- RALSTON, A.; WILF, H.S. *Mathematical methods for digital computers*. New York, John Wiley, 1968. v. 1.
- SELLY, S.M. *Standard mathematical tables*. Cleveland, The Chemical Rubber, 1964.

CAPÍTULO XIX

AJUSTE DE FUNÇÕES

19.1 - INTRODUÇÃO

Quando se trabalha com resultados experimentais, nem sempre a solução desejada $f(x)$ é obtida, conhecendo-se apenas uma aproximação $g(x)$ para ela. Via de regra, a diferença entre essas funções é uma flutuação aleatória indesejável, devendo, portanto, ser removida para conveniente interpretação do resultado.

Em geral, a relação funcional $f(x)$ é também desconhecida, usando-se para ela uma aproximação $\phi(x)$, dada pela combinação de funções mais simples $\phi_j(x)$.

O problema da determinação de $\phi(x)$, quando se dispõe de uma medida, $g(x)$, para $f(x)$ será objeto deste capítulo.

19.2 - PRINCÍPIOS DOS MÍNIMOS QUADRADOS DE LEGENDRE

O princípio de Legendre é obtido do critério dos resíduos ponderados, usando-se como função peso, $\omega(x)$, o valor:

$$\omega(x) = q(x) r(x) ,$$

onde $q(x)$ é um valor relativo à qualidade da medida, e $r(x)$ é o resíduo dado pela diferença:

$$r(x) = q(x) - \phi(x).$$

O erro, ϵ , da aproximação é dado por:

$$\epsilon = \langle U r(x) \bar{x}, U w(x) \bar{x} \rangle = \int_a^b q(x) r^2(x) dx.$$

No caso discreto a integral reduz-se a uma somatória.

O princípio de Legendre estabelece como melhor aproximação aquela que minimiza o valor de ε acima.

A utilização do método dos resíduos ponderados, neste caso, é mais conveniente, uma vez que os erros aleatórios, presentes em $g(x)$, invalidam o significado isolado do valor para um ponto particularizado x .

Para conveniência de notação, será usada a simbologia:

$$\{qr^2\} = \langle U_r(x) \bar{x}, U_w(x) \bar{x} \rangle ,$$

e o resultado do produto escalar é chamado "agregado" da expressão entre chaves.

19.3 - AJUSTE LINEAR PARA VALORES EXATOS

Este caso é de pouco interesse prático, mas possui importância teórica, pois relaciona o princípio de Legendre com os critérios de minimização de erro do capítulo anterior.

Considere-se a situação ideal em que $g(x) = f(x)$. Tomando-se $\phi(x)$ como combinação linear de um conjunto de funções $\phi_i(x)$, $i=1, \dots, N$, o agregado pode ser escrito como:

$$\{qr^2\} = \left\{ q \left[f - \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \right]^2 \right\}$$

cujo mínimo ocorre quando todas as derivadas parciais em relação aos coeficientes a_i forem nulas, isto é:

$$\frac{\partial}{\partial a_\kappa} \{qr^2\} = - \left\{ 2q \left[f - \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \right] \phi_\kappa \right\} = - \{2qr\phi_\kappa\} = 0$$

$$\kappa = 1, \dots, N$$

de onde:

$$\sum_{i=1}^N a_i \{q \phi_i \phi_k\} = \{q \phi_k f\} \quad k=1, \dots, N$$

Pode-se notar que esta relação coincide com a relação da Seção 18.7, generalizada para a determinação dos coeficientes. Assim, o princípio de Legendre nada mais é do que a utilização da ortogonalidade do erro da aproximação ótima (Seção 18.5).

O sistema de equações lineares em a_i pode ser escrito em forma matricial como:

$$\underline{P} \underline{a} = \underline{b} ,$$

onde $\underline{a}^t = (a_1, \dots, a_N)$, \underline{P} é uma matriz com elementos $P_{ik} = \{q \phi_i \phi_k\}$ e $\underline{b}^t = (b_1, \dots, b_N)$ com $b_i = \{q \phi_i f\}$.

O valor dos coeficientes a_i é dado pela solução:

$$\underline{a} = \underline{P}^{-1} \underline{b}$$

Para medir a qualidade da aproximação, usa-se o erro médio quadrático definido por:

$$E^2 = \frac{\{qr^2\}}{\{q\}}$$

19.4 - AJUSTE LINEAR NA PRESENÇA DE ERROS

O caso de maior interesse prático é aquele para o qual $g(x)$ difere de $f(x)$, por um erro experimental $s(x)$, dado por:

$$s(x) = g(x) - f(x).$$

O ajuste é feito para a função $g(x)$ e deseja-se obter uma estimativa do efeito que isto acarreta na aproximação para $f(x)$.

Nesta seção, tratar-se-á do problema em que a função aproximadora $\phi(x)$ é uma combinação linear de um conjunto de funções $\phi_i(x)$, $i=1, \dots, N$. Examinar-se-ão duas possibilidades:

- . ser conhecida uma estimativa, $\overline{q s^2}$, do valor médio quadrático do erro.
- . não ser conhecido o valor de $\overline{q s^2}$.

19.4.1 - AJUSTE LINEAR COM VALOR DO ERRO MÉDIO QUADRÁTICO CONHECIDO

Supõe-se que a variável aleatória $s(x)$ seja gaussiana, com valor médio nulo. Admite-se também que seja conhecido o valor médio quadrático desta variável, $\overline{q s^2}$. Seja:

$$\tilde{\phi}(x) = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i \phi_i(x)$$

a função aproximadora que se obtém, usando-se $g(x)$ no lugar de $f(x)$. Deve-se calcular uma estimativa do erro médio quadrático para cada coeficiente:

$$\overline{(\tilde{a}_i - a_i)^2}, i=1, \dots, N,$$

onde os a_i são os coeficientes que seriam obtidos se $s(x) = 0$ para todo x .

Os valores dos \tilde{a}_i são obtidos como na Seção 19.2, usando-se o resíduo $r(x)$, dado por:

$$r(x) = g(x) - \tilde{\phi}(x)$$

e vale:

$$\underline{\tilde{a}} = \underline{P}^{-1} \underline{b}$$

onde:

$$\underline{\tilde{a}}^t = (\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_N), \underline{b}^t = (b_1, \dots, b_N)$$

$$\text{e } b_i = \{q \tilde{r} s_i\}$$

a matriz \underline{p} é a mesma já determinada na Seção 19.3.

O vetor \underline{b} será decomposto em duas partes:

$$b_i = \{q \tilde{r} \phi_i\} = \{q (f+s) \phi_i\} =$$

$$\{q f \phi_i\} + \{q s \phi_i\} = b_i + s_i ,$$

sendo os b_i os mesmos valores definidos para o caso linear sem erro. Assim, resulta:

$$\underline{\tilde{a}} = \underline{p}^{-1} (\underline{b} + \underline{s}) ,$$

sendo \underline{s} o vetor com elementos $s_i = \{q s \phi_i\}$

Então, escrever-se-á o vetor diferença como:

$$\underline{\tilde{a}} - \underline{a} = \underline{p}^{-1} \underline{s}$$

Chamando-se d_{ij} os elementos da matriz \underline{p}^{-1} , pode-se escrever:

$$\tilde{a}_j - a_j = \sum_{k=1}^N d_{jk} s_k$$

O erro médio quadrático é dado pelo valor esperado de $(\tilde{a}_j - a_j)^2$, i.e.:

$$\overline{(\tilde{a}_j - a_j)^2} = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N d_{ji} d_{jk} \overline{s_i s_k}$$

Desenvolvendo-se o lado direito desta igualdade, tem-se:

$$\overline{(\tilde{a}_j - a_j)^2} = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N d_{ji} d_{jk} \overline{\{q s \phi_i\} \{q s \phi_k\}}$$

Para calcular o valor esperado do segundo membro, deve-se explicitar a variável para cada agregado. Assim:

$$\overline{\{q s \phi_i\} \{q s \phi_k\}} = \overline{\left\{ \left\{ q(x) s(x) \phi_i(x) q(y) s(y) \phi_k(y) \right\}_y \right\}_x}$$

O tratamento do caso contínuo envolve o processamento analógico do erro, fugindo assim aos escopos do curso. Oferece maior interesse o caso discreto, em que a amostragem é feita de tal forma que a separação entre os pontos elimina a correlação dos erros. Para este caso resulta:

$$\begin{aligned} \overline{\left\{ \left\{ q(x_m) s(x_m) \phi_i(x_m) q(x_n) s(x_n) \phi_k(x_n) \right\}_m \right\}_n} &= \\ = \overline{\left\{ q(x_m) \phi_i(x_m) \phi_k(x_m) q(x_m) s^2(x_m) \right\}_n} \end{aligned}$$

Pode-se agora dispensar a variável dentro do agregado e escrever a expressão do erro como:

$$\overline{(\tilde{a}_j - a_j)^2} = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N d_{ji} d_{jk} \left\{ q \phi_i \phi_k \overline{q s^2} \right\}$$

A função peso, $q(x)$, é escolhida de modo que $\overline{q s^2}$ tenha o mesmo valor, qualquer que seja o ponto x escolhido. Com esta escolha tem-se:

$$\overline{(\tilde{a}_j - a_j)^2} = \overline{q s^2} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N d_{ji} d_{jk} \left\{ q \phi_i \phi_k \right\}$$

Por outro lado, para $g(x) = \phi_i(x)$ deve-se ter $\tilde{a}_i = 1$ e $\tilde{a}_m = 0$ para $m \neq i$.

Então, segue-se que:

$$\tilde{a}_m = \sum_{k=1}^N d_{mk} \left\{ q \phi_i \phi_k \right\} = \delta_{mi} = \begin{cases} 1 & \text{se } m=i \\ 0 & \text{se } m \neq i \end{cases}$$

Substituindo-se este resultado na expressão acima, obtêm:

$$\overline{(\tilde{a}_j - a_j)^2} = \overline{q s^2} \sum_{i=1}^N d_{ji} \delta_{ji} = \overline{q s^2} d_{jj},$$

que é o valor desejado do erro médio quadrático, para cada coeficiente a_j , $j=1, \dots, N$.

19.4.2 - AJUSTE LINEAR COM VALOR DO ERRO MÉDIO QUADRÁTICO DESCONHECIDO

A situação típica, que ocorre nos problemas de ajuste de funções, é aquela em que se necessita determinar, além dos coeficientes da função interpoladora, o valor de uma estimativa para $\overline{q s^2}$.

Partindo-se da expressão do resíduo para o ajuste linear com erro, pode-se escrever:

$$r(x) = g(x) - \tilde{\phi}(x) = f(x) + s(x) - \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i \phi_i(x)$$

que, por sua vez, pode ser reagrupada como:

$$s(x) - r(x) = \sum_{i=1}^N (\tilde{a}_i - a_i) \phi_i(x) = \sum_{i=1}^N \phi_i(x) \sum_{j=1}^N d_{ij} \{q \phi_j s\},$$

que é a expressão básica para o desenvolvimento do presente caso.

Multiplicando-se a expressão básica por qr e calculando-se o agregado, obtém-se:

$$\{qrs\} - \{qr^2\} = \sum_{i=1}^N \{qr\phi_i\} \sum_{j=1}^N d_{ij} \{qs\phi_j\}$$

Como pelo princípio de Legendre já foi mostrado que $\{qr\phi_i\} = 0, i=1, \dots, N$, então:

$$\{qrs\} = \{qr^2\}$$

Por outro lado, multiplicando-se a expressão básica por qs e calculando-se o agregado, resulta:

$$\{qs^2\} - \{qrs\} = \sum_{i=1}^N \{qs\phi_i\} \sum_{j=1}^N d_{ij} \{qs\phi_j\}$$

Usando-se o valor $\{q r s\}$, obtidos acima, tem-se:

$$\{q s^2\} - \{q r^2\} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N d_{ij} \{q \phi_i s\} \{q \phi_j s\}$$

Tomando-se o valor esperado de ambos os lados resulta:

$$\overline{\{q s^2\}} - \overline{\{q r^2\}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N d_{ij} \overline{\{q \phi_i s\}} \overline{\{q \phi_j s\}}$$

Usando-se o resultado da Seção 19.4.1, pode-se escrever

$$\sum_{j=1}^N d_{ij} \overline{\{q \phi_j s\}} \overline{\{q \phi_j s\}} = \delta_{ij} \overline{q s^2},$$

de onde segue-se que:

$$\overline{\{q s^2\}} - \overline{\{q r^2\}} = \sum_{i=1}^N \overline{q s^2} \delta_{ij} = N \overline{q s^2}$$

Considerando-se apenas o caso discreto, pois o caso contínuo apresenta as mesmas restrições discutidas na Seção 19.4.1, o agregado torna-se uma somatória. Assim:

$$\sum_{k=1}^M q(x_k) s^2(x_k) - \sum_{k=1}^N q(x_k) r^2(x_k) = N q(x) s^2(x),$$

onde M é o número de pontos observados.

Na hipótese de que o valor esperado seja o mesmo para todos os pontos, tem-se:

$$\overline{q s^2} = \frac{1}{M-N} \sum_{k=1}^M \overline{q r^2}$$

Esta expressão mostra que o número de pontos observados, M , deve ser maior que o número de parâmetros, N , a serem determinados. Quando o número de observações cresce muito dentro de um intervalo limitado, a expressão acima pode perder a validade, se a distância entre pontos diminuir de tal modo que a correlação entre erros torne-se importante.

19.5 - AJUSTE NÃO-LINEAR

Por vezes a expressão analítica da função a ser aproximada é conhecida, mas depende de uma forma não-linear de um conjunto de parâmetros a_i , $i=1, \dots, N$. O problema, neste caso, é a determinação do conjunto de parâmetros, baseado no resultado de medidas experimentais.

Represente-se por $f(x, \underline{a})$ a expressão analítica da função dependente de um vetor de parâmetros \underline{a} . Seja $g(x, \underline{a})$ a medida experimental para $f(x, \underline{a})$. O problema da determinação do vetor \underline{a} pode apresentar um dos aspectos:

- . forma redutiva para o caso linear;
- . forma não-redutiva para o caso linear.

19.5.1 - FORMA REDUTÍVEL PARA O CASO LINEAR

Neste caso, a expressão analítica $f(x, \underline{a})$ pode ser transformada numa dependência linear dos a_i por meio de uma transformação T . Pode-se então escrever que:

$$T \left[f(x, \underline{a}) \right] = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i(x)$$

A aproximação é obtida, transformando-se as medidas experimentais pela relação T . O resíduo $r(x)$ torna-se então:

$$r(x) = T \left[g(x, \underline{\tilde{a}}) \right] - \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i \phi_i(x)$$

A aplicação dos métodos da Seção 19.4 é então imediata para a função transformada.

19.5.2 - FORMA NÃO-REDUTÍVEL PARA O CASO LINEAR

O procedimento neste caso consiste na linearização da função $f(x, \underline{a})$, usando-se o desenvolvimento de Taylor em torno de um vetor \underline{a}_0 , admitido como solução. Obtém-se assim:

$$f(x, \underline{a}) = f(x, \underline{a}_0) + \langle \underline{d}_0, \Delta \underline{a}_0 \rangle ,$$

onde \underline{d}_0 é o vetor das derivadas parciais, calculadas para o vetor \underline{a}_0 .

O resíduo é então calculado por:

$$r(x) = g(x, \tilde{\underline{a}}) - f(x, \underline{a}_0) = \langle \underline{d}_0, \Delta \underline{a}_0 \rangle = \sum_{i=1}^N d_{0i} \Delta a_{0i} ,$$

sendo as incógnitas os valores Δa_{0i} . Recai-se, assim, no caso do ajuste linear, e o vetor $\Delta \underline{a}_0$ será a solução dada por:

$$\Delta \underline{a}_0 = \underline{P}^{-1} \underline{b} ,$$

onde os elementos da matriz \underline{P} são $p_{ik} = \{q d_{0i} d_{0k}\}$ e os elementos do vetor \underline{b} são $b_j = \{q r d_{0j}\}$.

Determinando-se o valor de $\Delta \underline{a}_0$, estabelece-se a recorrência do processo de relaxação, tomando-se:

$$\underline{a}_1 = \underline{a}_0 + \Delta \underline{a}_0$$

como uma melhor aproximação para o vetor \underline{a} . Repete-se então todo o processo, desde o desenvolvimento em série de Taylor, para a obtenção de um vetor correção $\Delta \underline{a}_1$.

O cálculo das estimativas de erros é o mesmo do caso linear.

EXERCÍCIOS

1. Mostre que quando $g(x) = f(x)$ é conhecido para um conjunto discreto de pontos, a relação

$$\{q r^2\} = 0$$

pode ser satisfeita. Discuta também a impossibilidade dela ser satisfeita quando $f(x)$ é conhecida para todo intervalo (a,b) .

2. Demonstre a relação:

$$\{q r^2\} = \{q f^2\} - \sum_{k=1}^N a_k \{q f \phi_k\}$$

no ajuste linear, quando $g(x) = f(x)$.

3. Mostre que, se os polinômios são ortogonais no caso de ajuste linear com $g(x) = f(x)$, é válida a relação:

$$\{q r^2\} = \{q f^2\} - \sum_{k=1}^N \{q \phi_k^2\}$$

4. Usando-se $q(x) = 1$, calcule o "agregado" da aproximação da função $f(x) = \sin x$, por meio das funções $\phi_1(x) = x$ e $\phi_2(x) = x^3$, com os coeficientes $a_1 = 1$ e $a_2 = 1/6$ no intervalo $(-\pi/2, \pi/2)$. Usando ainda $\phi_1(x) = x$ e $\phi_2(x) = x^3$ encontre os coeficientes a_1 e a_2 pelo método da Seção 19.3. Qual a diferença observada e qual o valor do agregado neste caso? Qual o erro médio quadrático cometido em cada caso?

5. Repita o exercício anterior para $f(x) = \sin x$, dada por:

a) 5 pontos igualmente espaçados em $(-\pi/2, \pi/2)$;

b) 11 pontos igualmente espaçados em $(-\pi/2, \pi/2)$.

Verifique o que acontece quando o número de pontos aumenta. Compare os resultados dos dois exercícios.

6. Em um aparelho foram registrados os valores, abaixo, para x e $g(x)$.

x	0,00	0,09	0,18	0,24	0,30	0,36	0,42	0,48
$g(x)$	1,00	1,01	1,03	1,06	1,09	1,13	1,18	1,23

Sabe-se que $g(x)$ é uma estimativa truncada a duas decimais de $f(x) = 1+x^2$, e os valores de x são exatos. Então:

- Encontre uma estimativa para o erro de truncamento com peso unitário, i.e. $q(x) = 1$ para todo x , calculando o valor esperado, como na Seção 19.4.2.
- Supondo-se que $f(x)$ seja desconhecida, calcule os valores de \tilde{a}_1 e \tilde{a}_2 para aproximar $f(x)$ por $\tilde{a}_1 \phi_1(x) + \tilde{a}_2 \phi_2(x)$, onde $\phi_1(x) = 1$ e $\phi_2(x) = x^2$. Use o valor de $\overline{q(x) s^2(x)}$, calculado na primeira parte. Calcule $\overline{(\tilde{a}_i - a_i)^2}$, $i=1,2$, usando 4 pontos da tabela e 8 pontos da tabela. Qual o efeito do aumento de número de pontos?
- Supondo $f(x)$ e $\overline{q(x) s^2(x)}$ desconhecidas, calcule $\overline{q(x) s^2(x)}$ e compare como o valor obtido no item a.

7. No ajuste linear as funções $\phi_i(x)$ podem pertencer a um conjunto de funções ortogonais como no caso de aproximação de funções (Capítulo XVIII). Considere, em particular, o problema de aproximar uma função $\phi(x)$, dada por:

$$\phi(x) = a_1 \sin x + a_2 \cos x,$$

sendo conhecidos os valores experimentais da tabela abaixo.

x	0,00	1,57	3,14
$g(x)$	0,49	1,01	-0,49

8. Chamando $R(x)$ o resíduo: $R(x) = g(x, \tilde{a}) - f(x, a)$ e $r(x)$ o resíduo: $r(x) = T [g(x, \tilde{a})] - T [f(x, a)]$, mostre, usando o desenvolvimento de Taylor, que para resíduos pequenos $r(x) \approx R(x) \frac{d}{df(x, a)} T [f(x, a)]$, e assim o ajuste de $g(x, \tilde{a})$ para $f(x, a)$ com $q(x) = 1$, para todo x , é equivalente a um ajuste $T [g(x, \tilde{a})]$, para $T [f(x, a)]$, com peso $q(x) = \frac{d}{df(x, a)} T [f(x, a)]$.

9. São conhecidos os resultados experimentais dados pela tabela abaixo

x	0,0000	0,9000	1.8000	2.7000	3.6000
$g(x, \tilde{a})$	1,0000	0,6216	-.2272	-.9041	-.8968

Sabendo-se que eles correspondem a medidas da função $f(x, a) = \cos ax$, determine a aproximação \tilde{a} para a . Empregue os dois processos de ajuste não-linear. Discuta os resultados.

BIBLIOGRAFIA

- BEREZIN, I.S.; ZHIDKOV, N.P. *Computing methods*. Reading, MA. Addison Wesley, 1965. v.1.
- HIDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis*. New York, MacGraw-Hill, 1956.
- PENNINGTON, R.H. *Introductory computer methods and numerical analysis*. London, MacMillan, 1970.
- SCARBOROUGH, J.B. *Numerical mathematical analysis*. Baltimore, The Johns Hopkins Press, 1930.

APÊNDICE A

DISTRIBUIÇÕES*

A.1 - INTRODUÇÃO

Na busca pelo indivisível, uma das primeiras formas, na Física, foi a criação do conceito de densidade, como a quantidade de massa contida numa unidade de volume. Este conceito foi generalizado posteriormente, no campo da Física, e assimilado pela Matemática.

Se por um lado o conceito de densidade permitia uma quantificação, por relações matemáticas (integral, derivada, etc.), das grandezas físicas, por outro lado criava um impasse, quando se tratava do relacionamento de grandezas discretas ideais, como uma carga pontual. Assim, não existia nenhuma densidade que integrada reproduzisse uma carga pontual ideal.

Também na matemática semelhante impasse aparecia, quando se trabalhava com a transformada de Fourier, definida pelas relações:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

Para que estas relações tivessem sentido, era necessário que

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(t-x)\omega} d\omega dx$$

admitisse solução, o que exigia da integral:

* Este Apêndice complementa o 1º volume deste trabalho, ao qual pertence.

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(t-x)\omega} d\omega,$$

vista como função de x , as seguintes características:

- a) a função deveria anular-se para todos os pontos, exceto $x = t$;
- b) a integral, em relação a x , deveria ter valor 1 para qualquer intervalo de integração, incluindo o ponto t .

A solução desses problemas só teve resultado satisfatório com a criação da teoria de distribuições.

A.2 - FUNÇÃO DENSIDADE

Definição: Denomina-se densidade a medida local, de uma propriedade escolhida, associada ao elemento unitário do espaço de observação.

É costume representar a densidade por um relacionamento funcional, $\rho(\underline{s})$, indicando que se trata de uma medida associada ao ponto \underline{s} , do espaço de observação \underline{S} . O "conteúdo", R , da propriedade escolhida, presente no espaço \underline{S} , é dado pela integral:

$$R = \int_{\underline{S}} \rho(\underline{s}) d\underline{s}$$

Assim, pode-se falar em: densidade numérica de partículas, para indicar o número de partículas contidas numa unidade de volume; densidade de probabilidade, indicando a probabilidade associada a cada ponto do espaço, etc.

A função densidade quantifica a forma de "distribuição" da propriedade escolhida, dentro do espaço. Assim, aparece a primeira noção de "distribuição".

Os espaços para os quais o valor $\rho(\underline{s})$ é o mesmo, para qualquer ponto $\underline{s} \in \underline{S}$, são chamados homogêneos, para a propriedade escolhida. Caso contrário, o espaço é chamado não-homogêneo.

A.3 - ASSOCIAÇÃO GEOMÉTRICA AO ESPAÇO VETORIAL DE FUNÇÕES

Considere-se a função $f(x)$ definida no intervalo $[a, b]$.

Tomando-se cada posição de x como uma propriedade distinta, constroi-se um espaço vetorial infinito, cujos vetores são simbolicamente representados por:

$$\underline{v} = \int_x f(x) \hat{x}, \quad x \in [a, b]$$

Sendo cada posição x considerada como uma propriedade, distinta das demais, um vetor elementar, $f(x) \hat{x}$, será sempre ortogonal a outro vetor elementar, $f(y) \hat{y}$, para $x \neq y$.

Pode-se então considerar o produto escalar entre dois vetores:

$$\left. \begin{aligned} \underline{v} &= \int_x f(x) \hat{x}, \\ \underline{u} &= \int_x g(x) \hat{x} \end{aligned} \right\} x \in [a, b]$$

cujo resultado, pelo exposto acima, vale:

$$\langle \underline{v}, \underline{u} \rangle = \int_x f(x) g(x)$$

Aqui, a união não pode ser tomada no sentido individualizado, pois o resultado da somatória dos infinitos elementos, contidos em $[a, b]$, será ilimitado.

Lembrando-se do conceito de plano, estabelecido na geometria elementar, infinitos segmentos de retas adjacentes constituem uma área. Este resultado permite associar uma "medida" do produto escalar por:

$$\int_a^b f(x) g(x) dx$$

A forma de colecionar segmentos de reta, adjacentes ou não, para unidos produzirem uma área, constituem o fundamento de integração de Lebesgue.

Portanto, é neste sentido que deve ser considerada a integral acima. É fácil verificar que, para funções contínuas, a integral de Lebesgue coincide com a de Riemann.

A.4 - FUNÇÕES GENERALIZADAS

A "medida" introduzida na seção anterior apresenta uma séria restrição, quando o vetor contém apenas um número finito de componentes não-nulas, no intervalo $[a, b]$. Pelo sentido da geometria elementar, esses vetores teriam medida nula.

Para resolver o impasse, faz-se necessária a criação de uma "função densidade", inteiramente concentrada em um ponto particular, anulando-se para todos os outros pontos num intervalo $(-\infty, +\infty)$ e cuja integral possua valor unitário. Tal função, denominada delta de Dirac, deu início à chamada teoria de distribuições.

As funções, cujo valor para pontos individuais não apresentam importância prática, mas que quando integradas possuem resulta

dos bem definidos, foram primeiramente chamadas "funções simbólicas". A razão deste nome derivou do fato delas serem usadas apenas pelos resultados de sua integral. Posteriormente, tais funções foram englobadas dentro de um contexto mais geral, com o nome de "funções generalizadas" ou "distribuições".

A.4.1 - FUNÇÃO DELTA DE DIRAC

A função delta de Dirac foi criada para que fosse satisfeita a relação:

$$f(x_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_j) f(x) dx,$$

para qualquer função contínua $f(x)$.

Nenhuma função matemática possui essa propriedade, mas pode-se imaginar uma sequência de funções, com área unitária, que se estreite progressivamente nas vizinhanças do ponto x_j , aumentando indefinidamente o valor neste ponto. No limite, esta sequência teria a propriedade acima estabelecida.

Existem infinitas sequências, satisfazendo a condição para definir a função delta. Assim, pode-se impor maiores restrições, exigindo-se que essa função possua derivada de todas as ordens.

Para estabelecer a equivalência das múltiplas sequências, será convencionado que duas sequências distintas constituem a mesma função generalizada, somente quando o resultado da integral, usado para a definição da função, for o mesmo em ambos os casos. Elimina-se, assim, o problema de ambiguidade, necessitando-se portanto encontrar uma sequência para definir cada função generalizada.

Pode-se mostrar facilmente que a sequência:

$$\left(\frac{n}{\pi}\right)^{1/2} \exp \left[-n(x - x_i)^2 \right] = \phi_n(x)$$

define a função $\delta(x - x_i)$. Para isto basta considerar a integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{n}{\pi}\right)^{1/2} \exp \left[-n(x - x_i)^2 \right] f(x) dx$$

para $f(x)$ contínua e derivável no ponto x_i . Pode-se escrever que:

$$\begin{aligned} & \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-n(x-x_i)^2} (n/\pi)^{1/2} f(x) dx - f(x_i) \right| \\ &= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-n(x-x_i)^2} (n/\pi)^{1/2} [f(x) - f(x_i)] dx \right| \\ &\leq \max |f'(x)| \int_{-\infty}^{+\infty} |x - x_i| e^{-n(x-x_i)^2} (n/\pi)^{1/2} dx \\ &= (\pi n)^{-1/2} \max |f'(x)|, \end{aligned}$$

cujo limite, quando $n \rightarrow \infty$, é zero. Assim, a integral tende para $f(x_i)$ quando $n \rightarrow \infty$.

A.4.2 - OUTRAS FUNÇÕES GENERALIZADAS

Definidas por limites de sequência, as funções generalizadas possuem derivadas, na medida em que a sequência também seja derivável.

Por construção escolhem-se seqüências de funções contínuas, com derivadas de qualquer ordem, para definir uma função generalizada. Sendo as integrais convergentes, as funções da seqüência devem anular-se nos extremos infinitos de integração. Daí decorre o relacionamento entre a função generalizada e sua derivada

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n'(x) f(x) dx = - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x) f'(x) dx,$$

em virtude da validade da regra de integração por partes, para cada função ϕ_j da seqüência.

Do que foi estabelecido, dada a presença passiva de uma função $f(x)$ contínua, com derivadas contínuas de todas as ordens e que se anule fora de algum intervalo finito, pode-se estabelecer a validade de uma seqüência para definir uma função generalizada. As funções $f(x)$, com essas características, foram por isso chamadas "funções teste".

Resumindo-se, na construção de funções generalizadas tem-se os seguintes passos:

- a) estabelecimento da regra de operação simbólica;
- b) escolha de uma seqüência de funções contínuas, com derivadas contínuas de todas as ordens, que no limite satisfaça a regra de operação simbólica.
- c) definição da função generalizada, por meio da seqüência encontrada no item anterior.

EXERCÍCIOS

1. Discuta o problema da identidade simbólica:

$$\underline{v} = \left[\int_a^b f(x) dx \right] \hat{f}.$$

Tendo em vista o fato de que a identidade $\underline{v} = \underline{0}$ não possui solução unívoca, mostre a impropriedade de tal definição para caracterizar o vetor \underline{v} .

2. Considerando-se "a medida" no sentido geométrico, estabeleça a necessidade de definir os vetores no sentido de distribuição, ou seja, pela relação:

$$\underline{v} = \underset{x}{U} f(x) \hat{x} = \underset{x}{U} \left[\int_a^b f(t) \delta(t-x) dx \right] \hat{x}$$

3. Mostre que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) f(x) dx = -f(0)$$

4. Discuta o comportamento da função

$$U(t) = \int_{-\infty}^t \delta(x) dx$$

BIBLIOGRAFIA

BYRON, F.W.Jr.; FULLER, R.W. *Mathematics of classical and quantum physics*. Reading, MA, Addison-Wesley, 1969.

FRIEDMAN, B. *Principles and techniques of applied mathematics*. New York, Wiley, 1966.

LIGHTHILL, M.J., F.R.S. *Introduction to fourier analysis and generalised functions*. Cambridge, University Press, 1964.

SCHWARTZ, L. *Théorie des distributions*. Paris, Hermann, 1973.

APÊNDICE B

POLINÔMIOS ORTOGONAIS

B.1 - INTRODUÇÃO

As funções e os polinômios ortogonais ocupam lugar de destaque em Análise Numérica. Isto se deve ao fato de eles simplificarem significativamente o desenvolvimento da teoria de aproximações.

O tratamento completo sobre a teoria de conjuntos de funções ortogonais é bastante extenso e não pode ser aqui abrangido em suficiente detalhe. Optou-se por isso pela apresentação do mínimo material para compreensão do texto.

B.2 - RELAÇÃO DE ORTOGONALIDADE

Dado um conjunto de funções $F_i(x)$, $i = 0, 1, 2, \dots$, diz-se que ele é ortogonal num intervalo (a, b) relativamente a uma função peso $\omega(x) > 0$, se forem satisfeitas as condições:

$$1) \int_x F_k(x) \bar{x}, \omega(x) \int_x F_j(x) \bar{x} > = 0, \quad k \neq j;$$

2) o grau de $F_k(x)$ é exatamente k , quando $F_k(x)$ é um polinômio.

Se, além dessas condições, ainda for satisfeita a condição adicional:

$$3) \int_x F_k(x) \bar{x}, \omega(x) \int_x F_k(x) \bar{x} > = 1, \text{ o conjunto de funções ortogonais é denominado ortonormal.}$$

Os conjuntos de funções ortogonais são determinados a menos de uma constante multiplicativa arbitrária. Quando a condição de ortonormalidade também é satisfeita, o conjunto fica univocamente determinado.

O conjunto de pontos, para os quais as funções $F_i(x)$ são consideradas, pode eventualmente ser um conjunto discreto de pontos x_m , $m = 1, \dots, N$, contido no intervalo (a, b) .

B.3 - CONSTRUÇÃO DE CONJUNTOS DE POLINÔMIOS ORTONORMAIS

Apresentar-se-á, aqui, o tratamento para o caso contínuo. A extensão para o caso discreto pode, entretanto, ser facilmente desenvolvida de maneira análoga.

Resolve-se o problema de construção de polinômios ortogonais, em particular, obrigando-se o polinômio $Q_k(x)$ ser ortogonal em (a, b) a todos os polinômios de grau inferior a k .

B.3.1 - FÓRMULA DE RECORRÊNCIA DE 3 PARCELAS

Considere-se o conjunto de polinômios ortogonais, $Q_i(x)$, $i = 0, 1, 2, \dots$ e note-se primeiramente que:

$$Q_k(x) - \frac{A_k}{A_{k-1}} \times Q_{k-1}(x)$$

é um polinômio de grau máximo $k-1$, sendo A_i o coeficiente do termo em x^i do polinômio $Q_i(x)$.

Chamando-se:

$$\alpha_{k-1} = \frac{A_k}{A_{k-1}},$$

a diferença acima pode ser representada como combinação linear dos polinômios $Q_i(x)$, na forma

$$Q_k(x) - \alpha_{k-1} \times Q_{k-1}(x) = \sum_{i=0}^{k-1} C_i Q_i(x)$$

Os polinômios do lado esquerdo da expressão acima são ortogonais a todos os polinômios de grau inferior a $k-2$, portanto, o mesmo devendo acontecer na somatória à direita da igualdade. Para que isto seja possível, todos os C_i , $i = 0, \dots, k-3$ devem ser nulos. A expressão acima torna-se então:

$$Q_k(x) - \alpha_{k-1} x Q_{k-1}(x) = C_{k-1} Q_{k-1}(x) + C_{k-2} Q_{k-2}(x)$$

que reagrupada produz a forma de recorrência de 3 parcelas:

$$Q_k(x) = (\alpha_{k-1} x + C_{k-1}) Q_{k-1}(x) + C_{k-2} Q_{k-2}(x)$$

Tomando-se o produto escalar ponderado da expressão acima por $Q_k(x)$, $Q_{k-1}(x)$ e $Q_{k-2}(x)$, resultam as relações:

$$\gamma_k = \alpha_{k-1} \int_a^b \omega(x) x Q_k(x) Q_{k-1}(x) dx$$

$$0 = \alpha_{k-1} \int_a^b \omega(x) x Q_{k-1}^2(x) dx + C_{k-1} \gamma_{k-1}$$

$$0 = \alpha_{k-1} \int_a^b \omega(x) x Q_{k-1}(x) Q_{k-2}(x) dx + C_{k-2} \gamma_{k-2}$$

onde:

$$\gamma_i = \int_a^b \omega(x) Q_i^2(x) dx$$

A completa determinação do sistema acima exige que leis de formação sejam estabelecidas para o cálculo de dois parâmetros importantes, que são A_i e γ_i , que por sua vez estão ligados entre si. Para determinar a relação entre A_i e γ_i basta desenvolver $Q_i(x)$, obtendo-se:

$$\gamma_i = \int_a^b \omega(x) Q_i(x) [A_i x^i + \dots] dx,$$

mas sendo $Q_i(x)$ ortogonal a todos os polinômios de grau inferior a i , resulta a relação:

$$\gamma_i = A_i \int_a^b \omega(x) x^i Q_i(x) dx.$$

O cálculo de A_i é feito mais facilmente pela utilização da função geratriz, que será discutida a seguir.

B.3.2 - EQUAÇÃO DIFERENCIAL E FUNÇÃO GERATRIZ

Para a determinação do polinômio ortogonal $Q_k(x)$ será imposta a condição de que ele seja ortogonal a $P_{k-1}(x)$, um polinômio arbitrário de grau $k-1$ ou menor. Primeiramente será introduzida uma função geratriz $G_k(x)$, tal que:

$$\omega(x) Q_k(x) \equiv \frac{d^k G_k(x)}{d x^k}$$

A condição de ortogonalidade torna-se então:

$$\int_a^b G_k^{(k)}(x) P_{k-1}(x) dx = 0,$$

que integrada por partes, k vezes, resulta:

$$\left[\sum_{i=0}^{k-1} (-1)^i G_k^{(k-i)}(x) P_{k-1}^{(i)}(x) \right]_a^b = 0,$$

como $P_{k-1}(x)$ é arbitrária, segue-se que esta equação só será satisfeita quando:

$$G_k^{(i)}(a) = G_k^{(i)}(b) = 0, \quad i = 0, \dots, k-1$$

Por outro lado, sendo $Q_k(x)$ um polinômio de grau k , a função geratriz satisfaz a equação diferencial:

$$\frac{d^{k+1}}{dx^{k+1}} \left[\frac{1}{\omega(x)} \frac{d^k G_k(x)}{dx^k} \right] = 0,$$

com as condições de contorno, acima determinadas, de todas as derivadas até ordem $k-1$, nulas nos extremos de integração.

Uma vez determinada a função geratriz, é simples calcular o valor de A_k .

B.3.3 - CÁLCULO DOS COEFICIENTES DA FÓRMULA DE RECORRÊNCIA, UTILIZANDO A FUNÇÃO GERATRIZ

O uso da função geratriz pode facilitar o cálculo dos coeficientes da fórmula de recorrência. Para isto, tomando-se o valor de γ_i :

$$\gamma_i = A_i \int_a^b \omega(x) x^i Q_i(x) dx = A_i \int_a^b x^i G_i^{(i)}(x) dx$$

e integrando-se por partes, i vezes, consideradas as condições de contorno da função geratriz, chega-se a:

$$\gamma_i = (-1)^i i! A_i \int_a^b G_i(x) dx$$

Usa-se o mesmo processo para o cálculo das outras integrais que permitem determinar C_{k-1} e C_{k-2} . Assim:

$$\int_a^b \omega(x) x Q_{k-1}(x) Q_{k-2}(x) dx = A_{k-2} \int_a^b \omega(x) x^{k-1} Q_{k-1}(x) dx =$$

$$A_{k-2} \int_a^b x^{k-1} G_{k-1}^{(k-1)}(x) dx = (-1)^{k-1} (k-1)! A_{k-2} \int_a^b G_{k-1}(x) dx$$

A outra integral implica considerar o desenvolvimento de $Q_{k-1}(x)$ até o segundo termo. Seja:

$$Q_{k-1}(x) = A_{k-1} x^{k-1} + B_{k-1} x^{k-2} + \dots,$$

então, tem-se:

$$\int_a^b \omega(x) x Q_{k-1}^2(x) dx = A_{k-1} \int_a^b \omega(x) x^k Q_{k-1}(x) dx +$$

$$B_{k-1} \int_a^b \omega(x) x^{k-1} Q_{k-1}(x) dx =$$

$$(-1)^{k-1} (k-1)! A_{k-1} \int_a^b x G_{k-1}(x) dx +$$

$$(-1)^{k-1} (k-1)! B_{k-1} \int_a^b G_{k-1}(x) dx$$

Os coeficientes determinados a partir da função geratriz escrevem-se como:

$$\alpha_{k-1} = \frac{A_k}{A_{k-1}}$$

$$C_{k-1} = - \frac{\alpha_{k-1}}{\gamma_{k-1}} \left[(-1)^{k-1} (k-1)! A_{k-1} \int_a^b x G_{k-1}(x) dx + \right.$$

$$\left. (-1)^{k-1} (k-1)! B_{k-1} \int_a^b G_{k-1}(x) dx \right]$$

$$C_{k-2} = - \frac{\alpha_{k-1}}{\gamma_{k-2}} \left[(-1)^{k-1} (k-1)! A_{k-2} \int_a^b G_{k-1}(x) dx \right]$$

Para completar a construção do conjunto de polinômios ortogonais, resta determinar os dois primeiros componentes de cada conjunto.

B.3.4 - DETERMINAÇÃO DOS DOIS PRIMEIROS POLINÔMIOS ORTOGONAIS

Os dois primeiros polinômios ortogonais podem ser escritos formalmente como:

$$Q_0(x) = A_0$$

$$Q_1(x) = A_1x + B_1$$

O valor da constante A_0 é escolhido arbitrariamente, exceto quando a condição de ortonormalidade é imposta.

A condição de ortogonalidade entre $Q_1(x)$ e $Q_0(x)$ fornece a relação:

$$A_1 = - \frac{\int_a^b \omega(x) dx}{\int_a^b \omega(x) x dx} B_1$$

Não sendo imposta nenhuma outra condição, o valor de B_1 pode ser escolhido arbitrariamente, sendo em geral escolhido $B_1 = A_0$. Esta escolha favorece a extensão da fórmula de recorrência de 3 parcelas para todos os polinômios do conjunto.

Outra forma de determinar os primeiros polinômios é usar a função geratriz e as relações:

$$Q_0(x) = \frac{1}{\omega(x)} G_0(x)$$

$$Q_1(x) = \frac{1}{\omega(x)} G_1'(x)$$

B.3.5 - EXEMPLOS ILUSTRATIVOS

Considere-se a determinação dos conjuntos ortogonais de Hermite, cujas limitações são:

a) função peso:

$$\omega(x) = \exp(-\alpha^2 x^2);$$

b) intervalo de integração:

$$(a, b) = (-\infty, +\infty).$$

A função geratriz deve satisfazer a equação diferencial:

$$\frac{d^{k+1}}{dx^{k+1}} \left[e^{\alpha^2 x^2} \frac{d^k G_k(x)}{dx^k} \right] = 0,$$

com a condição de contorno das $k-1$ primeiras derivadas, nulas nos extremos de integração.

Verifica-se facilmente que a função:

$$G_k(x) = C_k \exp(-\alpha^2 x^2)$$

satisfaz esses requisitos para a função geratriz.

Na forma clássica dos polinômios de Hermite são usados $C_k = (-1)^k$ e $\alpha^2 = 1$. Para esses valores tem-se as seguintes integrais auxiliares:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \pi^{1/2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2} dx = 0$$

A expressão formal do polinômio de Hermite torna-se:

$$H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{d^k e^{-x^2}}{dx^k},$$

de onde determina-se facilmente o valor de A_k como:

$$A_k = (-1)^k (-2)^k = 2^k$$

Pode-se então determinar α_k e γ_k como:

$$\alpha_k = 2$$

$$\gamma_k = 2^k k! \pi^{1/2}$$

Pode-se mostrar por indução finita que $B_{k-1} = 0$, para todo valor de k , no polinômio de Hermite.

Daí decorre que:

$$C_{k-1} = 0$$

$$C_{k-2} = -2(k-1)$$

Com esses valores determinados, a fórmula de recorrência torna-se

$$H_k(x) = 2x H_{k-1}(x) - 2(k-1) H_{k-2}(x)$$

A determinação dos dois primeiros polinômios, feita a partir da função geratriz, conduz a:

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

B.4 - RELAÇÃO DE CHRISTOFFEL-DARBOUX PARA POLINÔMIOS ORTOGONAIS

Usando-se a primeira equação do sistema para determinação dos coeficientes da fórmula de recorrência de 3 parcelas (Seção B.3.1), tem-se:

$$\gamma_{k-1} = \alpha_{k-2} \int_a^b \omega(x) \times Q_{k-1}(x) Q_{k-2}(x) dx,$$

e o valor de C_{k-2} resultante da terceira equação é:

$$C_{k-2} = - \frac{\alpha_{k-1} \gamma_{k-1}}{\alpha_{k-2} \gamma_{k-2}}$$

Eliminando-se esta constante na fórmula de recorrência de três parcelas, resulta:

$$Q_k(x) = (\alpha_{k-1} x + C_{k-1}) Q_{k-1}(x) - \frac{\alpha_{k-1} \gamma_{k-1}}{\alpha_{k-2} \gamma_{k-2}} Q_{k-2}(x)$$

Para eliminar a constante C_{k-2} , multiplica-se essa relação por $Q_{k-1}(y)$, obtendo-se:

$$Q_k(x) Q_{k-1}(y) = (\alpha_{k-1} x + C_{k-1}) Q_{k-1}(x) Q_{k-1}(y) - \frac{\alpha_{k-1} \gamma_{k-1}}{\alpha_{k-2} \gamma_{k-2}} Q_{k-2}(x) Q_{k-1}(y)$$

Trocando-se de posição x com y nessa relação e subtraindo-se membro a membro, uma da outra, C_{k-1} é eliminado, obtendo-se:

$$Q_k(x) Q_{k-1}(y) - Q_k(y) Q_{k-1}(x) = (x-y) \alpha_{k-1} Q_{k-1}(x) Q_{k-1}(y) + \frac{\alpha_{k-1} \gamma_{k-1}}{\alpha_{k-2} \gamma_{k-2}} [Q_{k-1}(x) Q_{k-2}(y) - Q_{k-1}(y) Q_{k-2}(x)]$$

que pode ser reescrita na forma mais conveniente:

$$(x-y) \frac{Q_{k-1}(x) Q_{k-2}(y)}{\gamma_{k-1}} = \frac{Q_k(x) Q_{k-1}(y) - Q_k(y) Q_{k-1}(x)}{\alpha_{k-1} \gamma_{k-1}} - \frac{Q_{k-1}(x) Q_{k-2}(y) - Q_{k-1}(y) Q_{k-2}(x)}{\alpha_{k-2} \gamma_{k-2}}$$

Usando-se, para efeito de simetria das fórmulas, $Q_{-1}(x) \equiv 0$ e efetuando-se a somatória para $k = 1, \dots, m+1$, em virtude do cancelamento de termos consecutivos no segundo membro, resulta:

$$\sum_{k=1}^{m+1} \frac{Q_k(x) Q_k(y)}{\gamma_k} = \sum_{k=0}^m \frac{Q_k(x) Q_k(y)}{\gamma_k}$$

$$= \frac{Q_{m+1}(x) Q_m(y) - Q_m(x) Q_{m+1}(y)}{\alpha_m \gamma_m(x-y)},$$

conhecida como identidade de Christoffel Daboux.

B.5 - OUTRAS PROPRIEDADES DOS POLINÔMIOS ORTOGONAIS

1) O polinômio ortogonal $Q_k(x)$, relativo a uma função peso $\omega(x) > 0$, $x \in (a, b)$, possui k zeros, todos dentro do intervalo (a, b) .

Prova: considere-se primeiramente a integral:

$$\int_a^b \omega(x) Q_k(x) Q_0(x) dx = A_0 \int_a^b \omega(x) Q_k(x) dx = 0$$

para $k \geq 1$. Como $\omega(x)$ não muda de sinal em (a, b) , $Q_k(x)$ deve anular-se, pelo menos uma vez, nesse intervalo para $k \geq 1$.

Sejam $z_1, \dots, z_j, j < k$, os zeros reais de $Q_k(x)$ de multiplicidade ímpar e que estão dentro do intervalo (a, b) . Segue-se que o produto:

$$(x - z_1) (x - z_2) \dots (x - z_j) Q_k(x)$$

não muda de sinal em (a, b) . Mas a "produtória" dos zeros é um polinômio de grau $j < k$ e, pela relação de ortogonalidade, resulta:

$$\int_a^b \omega(x) (x - z_1) \dots (x - z_j) Q_k(x) dx = 0,$$

que é uma contradição. Então, deve-se ter $j = k$ e assim todas as raízes reais em (a, b) .

$$2) \sum_{k=0}^m \frac{[Q_k(x)]^2}{\gamma_k} = \frac{1}{a_m \gamma_m} [Q'_{m+1}(x) Q_m(x) - Q'_m(x) Q_{m+1}(x)]$$

Prova: Basta fazer $y \rightarrow x$ na identidade de Christoffel Darboux.

EXERCÍCIOS

1. Mostre que o conjunto de funções:

$$F_i(x) = \cos ix, \quad i = 0, 1, \dots$$

é ortogonal.

2. Usando a função geratriz mostre, por indução finita que $B_{K-1} = 0$, no polinômio de Hermite para todo valor de K.
3. Usando o desenvolvimento de Taylor, mostre que $\cos k \theta$ pode ser expresso exatamente por um polinômio de grau K em $\cos \theta$.
4. Encontre a fórmula de recorrência de 3 parcelas para os polinômios Tchebyshev, com as seguintes características:

• intervalo de integração $(-1, +1)$

• função peso $\omega(x) = \frac{1}{(1-x^2)^{1/2}}$

Mostre que, neste caso, é mais simples encontrar diretamente a forma do polinômio ortogonal $T_k(x)$, usando-se a transformação variãvel de $x = \cos \theta$.

5. Determine a fórmula de recorrência de 3 parcelas para os polinômios de Legendre, com as seguintes características:

• intervalo de integração $(-1, +1)$,

• função peso $\omega(x) = 1$.

6. Detalhe o cancelamento de termos na somatória que leva à identidade de Christoffel-Darboux.

BIBLIOGRAFIA

HILDEBRAND, F.B. *Introduction to numerical analysis*. McGraw-Hill, New York, 1956.

HOCHSTADT, H. *The functions of mathematical physics*. New York, Wiley-Interscience, 1971.

LEGRAS, J. *Précis d'analyse numérique*. Paris, Dunod, 1963.

SANSONE, G. *Orthogonal Functions*. New York, Interscience Publishers, 1959.

WENDROFF, B. *Theoretical numerical analysis*. London, Academic, 1967.