

Trabalho 2

Ajuste de Curvas

&

Splines

Dayanne Fernandes da Cunha, 13/0107191
Yurick Hauschild, 12/0024136
Grupo 6

¹Dep. Matemática – Universidade de Brasília (UnB)
Cálculo Numérico – Turma A

dayannefernandesc@gmail.com, yurick.hauschild@gmail.com

Resumo. Este relatório corresponde aos informativos das resoluções do Trabalho 2 de Cálculo Numérico da Turma A do semestre 2016/2.

1. Parte I : Ajuste de Curvas

Esta primeira parte de trabalho será dedicada aos ajustes de curvas pelo método dos mínimos quadrados. Para tal, considere o conjunto de dados apresentado na Figura 1.

i	t_i	y_i
1	0.1	8.3827801
2	0.2	8.9531612
3	0.3	1.2518859
4	0.4	7.7934885
5	0.5	1.7538714
6	0.6	1.6550660
7	0.7	5.3359199
8	0.8	0.42043209
9	0.9	2.8155446
10	1.0	0.11795521
11	1.1	5.7835269
12	1.2	4.6180773
13	1.3	2.5036669
14	1.4	2.6098585
15	1.5	3.3071423
16	1.6	3.3925891
17	1.7	4.1093898

Figura 1. Tabela de pontos.

1.1. Questão 1

Determine, para o conjunto de pontos da Figura 1, os melhores ajustes polinomiais de grau 1, 2, 3, 5 e 10. Trace os seus resultados e comente sobre a adequação de cada um

destes ajustes. É possível encontrar uma maneira quantitativa de se julgar qual dentre estes cinco ajustes é o melhor?

Resolução:

O método dos quadrados mínimos foi implementado e pode ser encontrado no arquivo '**parte1/q1.f90**'. A partir dele, foi possível encontrar os seguintes ajustes:

$$y_1 = 5.4491559 - 1.819038x$$

$$y_2 = 8.7060667 - 12.10402x + 5.7138785x^2$$

$$y_3 = 11.099895 - 26.10301x + 24.612525x^2 - 6.999498x^3$$

$$y_5 = 11.820173 - 30.99526x + 29.737760x^2 - 0.489529x^3 - 10.879890x^4 + 3.668555x^5$$

$$y_{10} = 10.767245 - 21.21473x + 8.5667448x^2 + 7.315704x^3 + 0.6093679x^4 - 1.894178x^5 - 1.310241x^6 - 0.297909x^7 + 0.1513477x^8 + 0.159235x^9 + 0.025067x^{10}$$

Cada um deles está representado graficamente e podem ser encontrados nos arquivos '**parte1/graficos/q1.1.png**', '**parte1/graficos/q1.2.png**', '**parte1/graficos/q1.3.png**', '**parte1/graficos/q1.5.png**' e '**parte1/graficos/q1.10.png**', respectivamente. É fácil de verificar pelos gráficos que nenhum dos ajustes realmente cobriu perfeitamente os pontos da tabela, mas dada a grande discrepância entre vários valores muitas vezes consecutivos, isto é um comportamento bastante compreensível.

Utilizando-se do coeficiente de determinação R^2 , é possível mensurar a adequação de cada um destes ajustes e, por conseguinte, decidir qual dentre eles é o melhor.

O coeficiente R^2 é calculado a partir da fórmula

$$R^2 = 1 - \frac{SQ_{err}}{SQ_{tot}} \quad (1)$$

Onde SQ_{err} é a soma dos quadrados dos erros e SQ_{tot} é a soma dos quadrados total.

Temos, então, o resultado:

- 71,9055769% da variância de y_1 é explicada pela tabela;
- 78,8906477% da variância de y_2 é explicada pela tabela;
- 80,7774013% da variância de y_3 é explicada pela tabela;
- 81,0324401% da variância de y_5 é explicada pela tabela;
- 81,3383318% da variância de y_{10} é explicada pela tabela.

Concluimos, então, que y_{10} , dentre os ajustes calculados, é o que melhor aproxima a função proposta na tabela. Por outro lado, é notável que a melhora entre y_5 e y_{10} foi mínima.

1.2. Questão 2

Encontre o polinômio interpolador para estes dados e trace o seu resultado num gráfico. Apresente, igualmente, o polinômio interpolador encontrado teoricamente, usando polinômios de Lagrange (talvez seja recomendado usar algum programa de manipulação

simbólica!). Comente seus resultados. Se você precisasse de uma função para descrever os dados da tabela, qual dentre o polinômio interpolador e os ajustes encontrados na questão 1 você escolheria? Por quê?

Resolução:

Para tentar ajustar os pontos da Figura 1 foi utilizado o método de mínimos quadrados na questão 1, já nesta questão foi requisitado que ajustasse a curva utilizando o polinômio interpolador utilizando polinômios de Lagrange.

Para uma determinada função $f(x)$ se tivermos $n+1$ pontos (x_i, y_i) com $t_i \neq t_j \forall i, j$ sempre encontraremos um único polinômio interpolador de grau menor ou igual a n tal que $y(x_i) = y_i \forall i = 1, \dots, n+1$.

Logo, no nosso exemplo da Figura 1 iremos encontrar um polinômio interpolador de grau menor ou igual a $n = 16$ do formato apresentado na Equação 2.

$$P(t) = \alpha_1 + \alpha_2 t + \dots + \alpha_{n+1} t^n \quad (2)$$

Após manipulação do sistema linear apresentado na Equação 2 podemos chegar a uma expressão mais elegante para representar o polinômio interpolador, por polinômios de Lagrange (Equação 3).

$$\mathcal{L}_i(t) = \prod_{1 \leq k \leq n+1, k \neq i} \frac{(t - t_k)}{(t_i - t_k)} \quad (3)$$

Na Equação 3 sendo $i = 1, \dots, n+1$ e $k = 1, \dots, n+1$, tal que, $k \neq i$. Com o polinômio de Lagrange podemos aproximar qualquer distribuição de pontos além de, por propriedade do polinômio interpolador, a de passar exatamente em todos os pontos (x_i, y_i) , o erro do ajuste é **nulo** ($\mathcal{E} \equiv 0$)!

Com os polinômio de Lagrange podemos construir uma nova expressão para o polinômio interpolador, que denominaremos por **Polinômio Interpolador de Lagrange** $P(t)$ de $n+1$ pontos como é mostrado na Equação 4.

$$P_i(t) = y_1 \mathcal{L}_1(t) + y_2 \mathcal{L}_2(t) + \dots + y_{n+1} \mathcal{L}_{n+1}(t) = \sum_{k=1}^{n+1} y_k \mathcal{L}_k(t) \quad (4)$$

Na nossa Questão 1.2 utilizando o algoritmo implementado no arquivo '**parte1/q2.f90**' foi possível encontrar um Polinômio Interpolador de Lagrange utilizando os 17 ponto da tabela da Figura 1, o gráfico encontrado está apresentado na Figura 2.

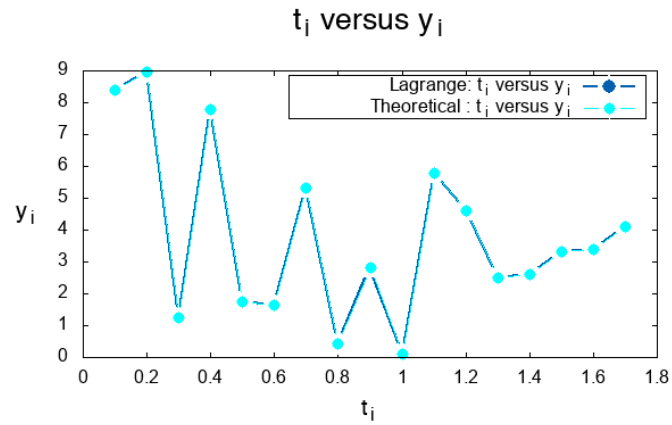


Figura 2. Gráfico de número de pontos t_i a cada y_i .

Foi implementado outro algoritmo de nome '**parte1/assistq2.cc**' para encontrar o valor teórico do Polinômio Interpolador de Lagrange devido à extensão da quantidade de pontos. Sendo os polinômios de Lagrange apresentados nas equações abaixo:

$$\mathcal{L}_1(t) = 477.947733 * t^{16} + -7264.805545 * t^{15} + 50949.228363 * t^{14} +$$

$$\begin{aligned}
& -218670.646911 * t^{13} + 642316.921975 * t^{12} + -1367942.542711 * t^{11} + \\
& 2182792.564685 * t^{10} + -2659094.855792 * t^9 + 2496269.449097 * t^8 + \\
& -1809422.218701 * t^7 + 1007801.986291 * t^6 + -426054.256882 * t^5 + \\
& 133763.333550 * t^4 + -30083.449528 * t^3 + 4559.068304 * t^2 + \\
& -414.723929 * t + 17.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_2(t) = & -7647.163732 * t^{16} + 115472.172350 * t^{15} + -803716.908214 * t^{14} + \\
& 3419505.734321 * t^{13} + -9943042.639802 * t^{12} + 20926179.230577 * t^{11} + \\
& -32928153.257188 * t^{10} + 39452355.144733 * t^9 + -36304391.925880 * t^8 + \\
& 25683908.232596 * t^7 + -13883125.684062 * t^6 + 5652726.151367 * t^5 + \\
& -1691354.917535 * t^4 + 357085.542625 * t^3 + -49661.503588 * t^2 + \\
& 3997.791431 * t + -136.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_3(t) = & 57353.727989 * t^{16} + -860305.919830 * t^{15} + 5942993.294184 * t^{14} + \\
& -25068970.381470 * t^{13} + 72181387.285554 * t^{12} + -150206492.003367 * t^{11} + \\
& 233288470.673763 * t^{10} + -275298352.269148 * t^9 + 248871966.480458 * t^8 + \\
& -172424309.689153 * t^7 + 90922012.072611 * t^6 + -35943531.039562 * t^5 + \\
& 10381191.796691 * t^4 + -2100816.406981 * t^3 + 277844.668751 * t^2 + \\
& -21122.290487 * t + 680.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_4(t) = & -267650.730614 * t^{16} + 3987995.886144 * t^{15} + -27343198.639495 * t^{14} + \\
& 114371439.602921 * t^{13} + -326194456.692142 * t^{12} + 671539788.871965 * t^{11} + \\
& -1030352703.066824 * t^{10} + 1199188421.639232 * t^9 + -1067144834.763252 * t^8 + \\
& 726209597.716723 * t^7 + -375212917.483644 * t^6 + 144942128.092822 * t^5 + \\
& -40789653.936149 * t^4 + 8021616.840154 * t^3 + -1029104.687882 * t^2 + \\
& 75911.350039 * t + -2380.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_5(t) = & 869864.874495 * t^{16} + -12874000.142519 * t^{15} + 87612790.159087 * t^{14} + \\
& -363446941.861294 * t^{13} + 1027091384.802612 * t^{12} + -2093011415.132366 * t^{11} + \\
& 3175142302.934550 * t^{10} + -3649249732.847102 * t^9 + 3202540794.688023 * t^8 + \\
& -2146199080.427569 * t^7 + 1090414918.639800 * t^6 + -413631249.710509 * t^5 + \\
& 114175516.957898 * t^4 + -22009046.368547 * t^3 + 2768168.943543 * t^2 + \\
& -200463.510101 * t + 6188.000000
\end{aligned}$$

$$\mathcal{L}_6(t) = -2087675.698787 * t^{16} + 30688832.772166 * t^{15} + -207306196.889530 * t^{14} +$$

$$\begin{aligned}
& 853024290.524290 * t^{13} + -2389341079.445246 * t^{12} + 4822132410.413660 * t^{11} + \\
& -7238675778.953555 * t^{10} + 8225164654.982363 * t^9 + -7130098793.678349 * t^8 + \\
& 4715867470.444774 * t^7 + -2362914218.981731 * t^6 + 883464370.283940 * t^5 + \\
& -240300118.181200 * t^4 + 45652260.725269 * t^3 + -5663104.671597 * t^2 + \\
& 405052.353535 * t + -12376.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_7(t) = & 3827405.447776 * t^{16} + -55880119.537527 * t^{15} + 374702993.337252 * t^{14} + \\
& -1529622587.203604 * t^{13} + 4248049554.183809 * t^{12} + -8495216585.219469 * t^{11} + \\
& 12628599636.549564 * t^{10} + -14201992145.398521 * t^9 + 12178134407.111917 * t^8 + \\
& -7964171617.216579 * t^7 + 3944543486.904145 * t^6 + -1457709878.900890 * t^5 + \\
& 391964108.747244 * t^4 + -73651065.205908 * t^3 + 9044099.718254 * t^2 + \\
& -641141.317460 * t + 19448.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_8(t) = & -5467722.068251 * t^{16} + 79281969.989642 * t^{15} + -527744534.027602 * t^{14} + \\
& 2137682490.691748 * t^{13} + -5888118814.912789 * t^{12} + 11673578195.424250 * t^{11} + \\
& -17197210652.522308 * t^{10} + 19159391322.243896 * t^9 + -16271813954.906149 * t^8 + \\
& 10538071267.782116 * t^7 + -5168776727.139668 * t^6 + 1891964789.336541 * t^5 + \\
& -504086774.213435 * t^4 + 93910496.813508 * t^3 + -11442810.209751 * t^2 + \\
& 805767.718254 * t + -24310.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_9(t) = & 6151187.326783 * t^{16} + -88577097.505669 * t^{15} + 585346986.016629 * t^{14} + \\
& -2353050595.238094 * t^{13} + 6430302372.685184 * t^{12} + -12644810267.857141 * t^{11} + \\
& 18472753118.898018 * t^{10} + -20406327017.786274 * t^9 + 17183548573.281303 * t^8 + \\
& -11034769019.717260 * t^7 + 5367845841.290509 * t^6 + -1949298185.267857 * t^5 + \\
& 515497564.651931 * t^4 + -95379597.520550 * t^3 + 11550970.849632 * t^2 + \\
& -809144.107143 * t + 24310.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{10}(t) = & -5467722.068251 * t^{16} + 78188425.575992 * t^{15} + -512981684.443324 * t^{14} + \\
& 2046896433.470506 * t^{13} + -5551368373.995686 * t^{12} + 10832704873.358803 * t^{11} + \\
& -15703368335.502916 * t^{10} + 17213791508.758846 * t^9 + -14385535503.942440 * t^8 + \\
& 9169986927.764606 * t^7 + -4429246813.600760 * t^6 + 1597739357.447518 * t^5 + \\
& -419919248.235150 * t^4 + 77260667.949106 * t^3 + -9310539.711451 * t^2 + \\
& 649476.174603 * t + -19448.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{11}(t) = & 3827405.447776 * t^{16} + -54349157.358417 * t^{15} + 354035003.919263 * t^{14} + \\
& -1402476178.228493 * t^{13} + 3776061569.174994 * t^{12} + -7315183547.055652 * t^{11} + \\
& 10528549344.441994 * t^{10} + -11460607612.097050 * t^9 + 9512860535.584154 * t^8 + \\
& -6024719113.052370 * t^7 + 2892272594.598153 * t^6 + -1037390465.675828 * t^5 + \\
& 271231511.734458 * t^4 + -49671278.421076 * t^3 + 5961439.099206 * t^2 + \\
& -414428.111111 * t + 12376.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 748932780.182781 * t^{13} + -2002436317.540486 * t^{12} + 3852813477.032231 * t^{11} + \\
& -5508579052.763086 * t^{10} + 5958075259.038807 * t^9 + -4915507275.821213 * t^8 + \\
& 3095318015.666339 * t^7 + -1478053082.448995 * t^6 + 527549202.734188 * t^5 + \\
& -137319697.070540 * t^4 + 25048695.149341 * t^3 + -2996026.927549 * t^2 + \\
& 207682.843434 * t + -6188.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{13}(t) = & 869864.874495 * t^{16} + -12178108.242923 * t^{15} + 78218249.514546 * t^{14} + \\
& -305569612.571927 * t^{13} + 811574359.389753 * t^{12} + -1551510440.326992 * t^{11} + \\
& 2204684438.075642 * t^{10} + -2370731114.816041 * t^9 + 1945215211.850720 * t^8 + \\
& -1218689702.365643 * t^7 + 579217845.778247 * t^6 + -205855509.518688 * t^5 + \\
& 53378979.438858 * t^4 + -9704131.576980 * t^3 + 1157321.077742 * t^2 + \\
& -80030.580808 * t + 2380.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{14}(t) = & -267650.730614 * t^{16} + 3720345.155530 * t^{15} + -23729913.776210 * t^{14} + \\
& 92086839.772025 * t^{13} + -243021456.852476 * t^{12} + 461787531.955357 * t^{11} + \\
& -652466073.878112 * t^{10} + 697876999.436607 * t^9 + -569792404.207697 * t^8 + \\
& 355358165.731249 * t^7 + -168195324.546585 * t^6 + 59553840.721061 * t^5 + \\
& -15391128.163792 * t^4 + 2789898.985305 * t^3 + -331892.844517 * t^2 + \\
& 22903.242868 * t + -680.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{15}(t) = & 57353.727989 * t^{16} + -791481.446243 * t^{15} + 5013862.900768 * t^{14} + \\
& -19331074.018574 * t^{13} + 50705467.372134 * t^{12} + -95802707.130832 * t^{11} + \\
& 134646357.578525 * t^{10} + -143315357.103489 * t^9 + 116488436.505968 * t^8 + \\
& -72353244.874339 * t^7 + 34119437.667849 * t^6 + -12040978.159572 * t^5 + \\
& 3102783.869202 * t^4 + -560998.142186 * t^3 + 66592.377566 * t^2 + \\
& -4587.124764 * t + 136.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{16}(t) = & -7647.163732 * t^{16} + 104766.143126 * t^{15} + -659185.513683 * t^{14} + \\
& 2525552.294071 * t^{13} + -6586060.116153 * t^{12} + 12377091.572693 * t^{11} + \\
& -17310042.586994 * t^{10} + 18341917.656980 * t^9 + -14847794.703658 * t^8 + \\
& 9188315.091919 * t^7 + -4318603.183511 * t^6 + 1519586.194562 * t^5 + \\
& -390562.236508 * t^4 + 70456.947719 * t^3 + -8347.495762 * t^2 + \\
& +574.098929 * t + -17.000000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{17}(t) = & 477.947733 * t^{16} + -6500.089172 * t^{15} + 40625.557325 * t^{14} + \\
& -154702.122295 * t^{13} + 401190.378766 * t^{12} + -750150.591007 * t^{11} + \\
& 1044330.814244 * t^{10} + -1102011.728045 * t^9 + 888758.997000 * t^8 + \\
& -548158.868711 * t^7 + 256874.131353 * t^6 + -90148.432211 * t^5 + \\
& 23116.424479 * t^4 + -4161.861269 * t^3 + 492.249100 * t^2 + \\
& + -33.807290 * t + 1.000000
\end{aligned}$$

Portanto teremos o Polinômio Interpolador de Lagrange na equação abaixo, dados os y_i da tabela da Figura 1.

$$P_i(t) = 44929590,063424 * t^{16} + -647280370,960326 * t^{15} + 4279914865,346266 * t^{14} + \\ -17217084770,868465 * t^{13} + 47089293478,371513 * t^{12} + -92686703619,757401 * t^{11} + \\ 135548219756,010544 * t^{10} + -149903217054,288818 * t^9 + 126370590293,072205 * t^8 + \\ -81237154218,415482 * t^7 + 39553248124,037933 * t^6 + -14372788603,944166 * t^5 + \\ 3802074486,481803 * t^4 + -703404093,061281 * t^3 + 85142565,074091 * t^2 + \\ -5959309,219498 * t + 178882,175689$$

$$=15*44929590,063424*POWER(A2;14) - 14*647280370,960326*POWER(A2;13) \\ + 13*4279914865,34626*POWER(A2;12) - 12*17217084770,8684*POWER(A2;11) \\ + 11*47089293478,3715*POWER(A2;10) - 10*92686703619,7574*POWER(A2;9) \\ + 9*135548219756,01*POWER(A2;8) - 8*149903217054,288*POWER(A2;7) + \\ 7*126370590293,072*POWER(A2;6) - 6*81237154218,4154*POWER(A2;5) + \\ 5*39553248124,0379*POWER(A2;4) - 4*14372788603,9441*POWER(A2;3) + \\ 3*3802074486,4818*POWER(A2;2) - 2*703404093,061281*A2 + 2*85142565,074091$$

Com o Polinômio Interpolador de Lagrange acima foi possível encontrar o **Fenômeno de Runge** como podemos ver na Figura 3 devido ao grau do polinômio ser alto.

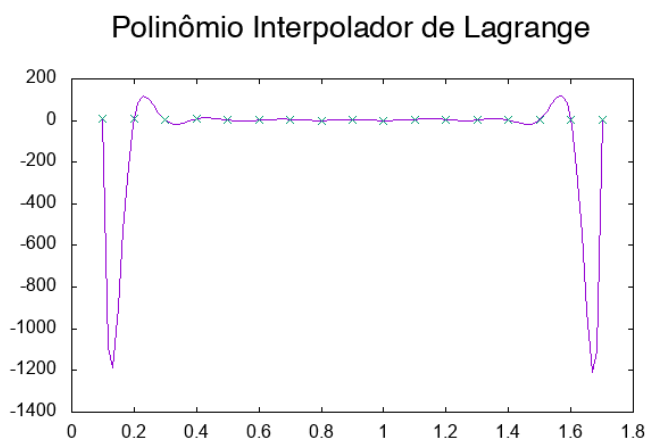


Figura 3. Gráfico do Fenômeno de Runge do Polinômio Interpolador de Lagrange utilizando a tabela da Figura 1.

Utilizando o mesmo critério de avaliação do ajuste da curva apresentado na Questão 1.1 foi também calculado para o Polinômio Interpolador de Lagrange, onde foi encontrado o seguinte resultado: 99.9997441 % da variância é explicada pela tabela. Logo podemos verificar numericamente que o Polinômio Interpolador de Lagrange mapeia quase 100 % dos dados na tabela da Figura 1 sendo então este ajuste mais adequado para ser utilizado.

1.3. Questão 3

Suponha que você precise determinar derivadas da função que gerou os pontos da tabela. Calcule, com ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, as derivadas primeira e segunda em todos os pontos apresentados na tabela. Apresente os esquemas numéricos utilizados e justifique porque eles são de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Compare os valores obtidos com as derivadas calculada utilizando-se a função que você escolheu na questão 2 para representar estes pontos.

Resolução:

Utilizando a definição da derivada temos:

$$f'(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h} \simeq \frac{f(t+h) - f(t)}{h} \quad (5)$$

Dado 2 pontos t_0 e t_1 teremos a **diferença finita**:

$$f'(t_0) \simeq \frac{f(t_0+h) - f(t_0)}{h} \simeq \frac{f(t_0 + (t_1 - t_0)) - f(t_0)}{t_1 - t_0} \simeq \frac{f(t_1) - f(t_0)}{t_1 - t_0} \simeq \frac{\Delta f}{\Delta t} \quad (6)$$

Expandindo-a em torno de um ponto $x = x_0$, teremos a aparição do **Erro de Lagrange**:

$$f(t) = f(t_0) + f'(t_0)(t - t_0) + \frac{f''(t_0)}{2!} \cdot (t - t_0)^2 + \dots + \gamma(t) \quad (7)$$

$$\gamma(t) = \frac{f^{n+1}(\epsilon)}{(n+1)!} \cdot (t - t_0)^{n+1}, \epsilon \in [t_0, t] \quad (8)$$

Logo, para achar $f'(t_0)$:

$$\begin{aligned} f(t) &= f(t_0) + f'(t_0)(t - t_0) + \frac{f''(\epsilon)}{2!} \cdot (t - t_0)^2 \\ f'(t_0) &= \frac{f(t) - f(t_0)}{t - t_0} - \frac{f''(\epsilon)}{2!} \cdot (t - t_0)^2 \end{aligned} \quad (9)$$

Para $t = t_{-1}$, sendo $\Delta t = (t - t_0)$:

$$f(t_{-1}) = f(t_0) - f'(t_0) \cdot \Delta t + \frac{f''(t_0)}{2!} \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (10)$$

$$f(t_1) = f(t_0) + f'(t_0) \cdot \Delta t + \frac{f''(t_0)}{2!} \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (11)$$

$$f(t_{-1}) - f(t_1) = 0 - 2.f'(t_0).\Delta t + 0 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (12)$$

Portanto, achamos a diferença finita centrada de 2ª ordem para $f'(t_0)$:

$$f'(t_0) = \frac{f(t_{-1}) - f(t_1)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (13)$$

Para a segunda derivada teremos:

$$f(t_{-1}) = f(t_0) - f'(t_0).\Delta t + \frac{f''(t_0)}{2!}\Delta t^2 - \frac{f'''(t_0)}{3!}\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (14)$$

$$f(t_1) = f(t_0) + f'(t_0).\Delta t + \frac{f''(t_0)}{2!}\Delta t^2 + \frac{f'''(t_0)}{3!}\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (15)$$

$$f(t_{-1}) + f(t_1) = 2.f(t_0) + 0 + f''(x_0).\Delta t^2 + 0 + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (16)$$

Portanto, achamos a diferença finita centrada de 2ª ordem para $f''(t_0)$:

$$f''(t_0) = \frac{f(t_1) - 2.f(t_0) + f(t_{-1}))}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (17)$$

Para cada ponto da tabela da Figura 1 iremos calcular a primeira e segunda derivada utilizando a diferença finita centrada de 2ª ordem.

t_i	y_i	$f'(t_i)$	$f''(t_i)$
0,1	8,382780080	0,028519059	-827,1656179
0,2	8,953161240	-0,356544742	-827,1655021
0,3	1,251885890	-0,057983634	1424,287967
0,4	7,793488500	0,025099276	-1258,122118
0,5	1,753871440	-0,306921198	594,0808778
0,6	1,655066010	0,179102357	377,9662001
0,7	5,335919860	-0,061731711	-859,6337493
0,8	0,420432091	-0,126018717	731,0605552
0,9	2,815544610	-0,015123848	-509,2699477
1,0	0,117955208	0,148399144	836,3157749
1,1	5,783526900	0,225006171	-683,1017213
1,2	4,618077280	-0,163992837	-94,89626779
1,3	2,503666880	-0,100410969	222,0600698
1,4	2,609858510	0,040173777	59,10918836
1,5	3,307142260	0,039136537	-61,18366753
1,6	3,392589090	0,040112388	63,13534812
1,7	4,109389780	2,883700811	-1,669962002

Tabela 1. Derivadas primeira e segunda do pontos t_i .

Como foi apresentado na Questão 1.2 o Polinômio Interpolador de Lagrange é um bom ajuste para mapear os pontos da tabela, logo, vamos utilizá-lo para encontrar as derivadas da função que gerou os pontos da tabela. Seja $P(t)$ o Polinômio Interpolador de Lagrange:

t_i	y_i	$P'(t_i)$	$P''(t_i)$
0,1	8,382780080	-117616,3947	101853780,1
0,2	8,953161240	8178,000852	89655285,51
0,3	1,251885890	-1224,267131	87126049,85
0,4	7,793488500	324,4320426	86261341,01
0,5	1,753871440	-187,866222	85857711,03
0,6	1,655066010	119,3320959	85639654,26
0,7	5,335919860	-60,61605414	85507533,27
0,8	0,420432091	5,632827797	85422074,85
0,9	2,815544610	-1,485599867	85363402,15
1,0	0,117955208	-7,35008382	85321439,78
1,1	5,783526900	80,91025332	85290470,35
1,2	4,618077280	-102,9395167	85266699,81
1,3	2,503666880	124,0077598	85248506,43
1,4	2,609858510	-335,6595623	85233590,41
1,5	3,307142260	1330,392748	85222953,72
1,6	3,392589090	-8486,514551	85207135,51
1,7	4,109389780	118449,3363	85274136,66

Tabela 2. Derivadas primeira e segunda do pontos t_i utilizando o Polinômio Interpolador de Lagrange.

1.4. Questão 4

Suponha, agora, que você precise determinar uma aproximação para o valor da área que a função que gerou os pontos da tabela descreve. Calcule, com a regra dos trapézios e com a regra $\frac{1}{3}$ Simpson, a integral da função descrita pela tabela. Compare os valores obtidos com a integral calculada utilizando-se a função que você escolheu para representar estes pontos.

Resolução:

Para aproximar o valor da área da função que gerou os pontos da tabela da Figura 1 iremos utilizar de duas regras, sendo elas, a regra dos Trapézios e a regra de $\frac{1}{3}$ Simpson.

A regra do trapézio generalizada é definida por:

$$\int_{t_0}^n f(t)dt = \frac{h}{2}[f(t_0) + 2 * (f(t_1) + \dots + f(t_{n-1})) + f(t_n)] \quad (18)$$

A regra do trapézio foi implementada e encontra-se no arquivo 'parte/question4.f90'. O resultado aproximado da área da função que gerou os pontos da tabela da Figura 1 foi de 5.85582733.

A regra de $\frac{1}{3}$ Simpson generalizada é definida por:

$$\int_{t_0}^{t_{2n}} f(t)dt = \frac{h}{3}[f(t_0) + 4 * f(t_1) + 2 * f(t_2) + 4 * f(t_3) + 2 * f(t_4) + \dots + 2 * f(t_{2n-2}) + 4 * f(t_{2n-1}) + f(t_{2n})]$$