

Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Informática

Cálculo Numérico (IF215)

Prof^a. Máira Santana

Motivação

- Interpolação é utilizada para encontrar relações entre variáveis medidas experimentalmente:
 - Valores tabelados;
 - Não se conhece ao certo a função que pode relacionar essas medidas.
- Qual a relação existente entre x e $f(x)$?
- Qual o valor de $f(x)$ para um determinado x fora do tabelamento?
- Não seria igual ao ajustamento?
 - Curva **aproximada** *versus* curva **exata**.

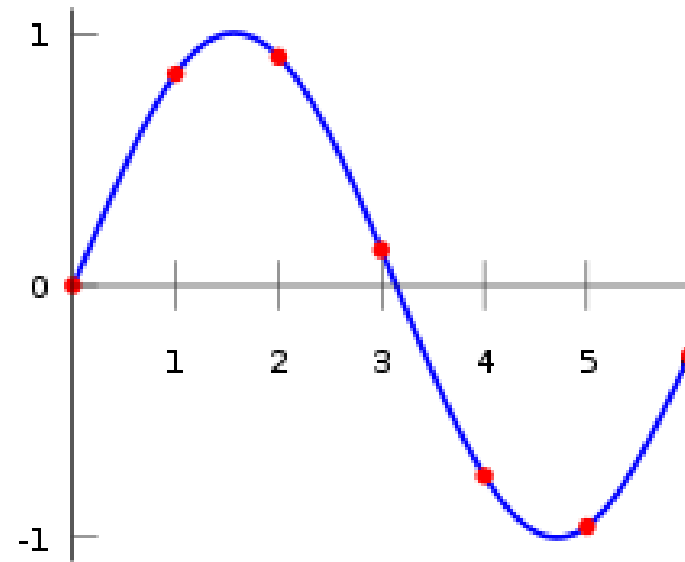
Motivação

- Ajustamento:
 - Constrói uma curva que **se aproxima** (se ajusta) dos pontos;
 - É possível **extrapolar** a análise para além dos extremos.
- Interpolação:
 - Constrói uma curva que **passa por todos os pontos**;
 - Não é possível extrapolar a análise para além dos extremos;
 - Ajuda a **estimar** os pontos entre $[x_0, x_n]$, ou seja, os valores apenas conhecidos pela tabela.

Motivação

- No nosso contexto vamos aproximar $f(x)$ por um polinômio $P(x)$ cuja forma geral é dada por:

$$P(x) = a_0x^m + a_1x^{m-1} + a_2x^{m-2} + \cdots + a_{m-1}x + a_m$$



- Observando o gráfico percebemos que há outras maneiras de conectar esses pontos tabelados por um polinômio.

Interpolação

- Seja uma função $f(x)$, $P_n(x)$ é o polinômio interpolador de $f(x)$, relativamente aos pontos x_0, x_1, \dots, x_n se, e somente se:
 - $P_n(x)$ é de **grau não superior a n** (número de pontos $- 1$);
 - $P_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$.
- Se isso ocorrer, garante-se que o polinômio interpolador é $P_n(x)$.

Interpolação

- **Exemplo:** Dados os pontos tabelados abaixo, descreva um polinômio que passe exatamente por eles.

x_i	-1	1	2
$f(x_i)$	-4	-2	-10

- Como $n = 2$, temos a expectativa de que o grau de $P(x)$ seja igual a dois, logo:

$$P(x) = a_0x^2 + a_1x + a_2$$

- Daí o sistema: $a_0x_i^2 + a_1x_i + a_2 = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2$

Interpolação

- **Exemplo:** Dados os pontos tabelados abaixo, descreva um polinômio que passe exatamente por eles.

x_i	-1	1	2
$f(x_i)$	-4	-2	-10

- Daí o sistema: $a_0x_i^2 + a_1x_i + a_2 = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2$

$$\begin{cases} a_0 - a_1 + a_2 = -4 \\ a_0 + a_1 + a_2 = -2 \\ 4a_0 + 2a_1 + a_2 = -10 \end{cases} \quad (\dots)$$

$$a_0 = -3; a_1 = 1 \text{ e } a_2 = 0 \quad \text{Portanto, } P(x) = -3x^2 + x$$

Interpolação

- A interpolação só é desejável caso tenhamos certeza sobre a corretude dos valores da tabela, pois, de outra forma, não conseguimos justificar questões como:
 - Por que a preocupação de passar por pontos duvidosos?
 - Não seria melhor um ajustamento?
- Conseguimos resolver o problema anterior a partir de sistemas lineares, mas imagine que um outro sistema tenha muitos pontos tabelados, a resolução por sistemas lineares iria se tornar extremamente custosa.

Polinômio Interpolador de Lagrange

- Teorema da existência e unicidade:

Dada uma função f , **existe um único polinômio** P_n interpolador de f , relativamente aos pontos x_0, x_1, \dots, x_n e ele é dado por:

$$P_n = \sum_{i=0}^n f(x_i) \mathcal{L}_i^{(n)}(x)$$

Onde

$$\mathcal{L}_i^{(n)}(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

(coeficiente de Lagrange)

Polinômio Interpolador de Lagrange

- **Exemplo:** Qual o polinômio interpolador de Lagrange para o problema descrito pelos valores tabelados a seguir:

x_i	-1	1	2
$f(x_i)$	-4	-2	-10

$$P_n = \sum_{i=0}^n f(x_i) \mathcal{L}_i^{(n)}(x) = -4\mathcal{L}_0^{(2)}(x) - 2\mathcal{L}_1^{(2)}(x) - 10\mathcal{L}_2^{(2)}(x)$$

Falta explicitar \mathcal{L}

$$\mathcal{L}_i^{(n)}(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

(coeficiente de Lagrange)

Polinômio Interpolador de Lagrange

$$\mathcal{L}_i^{(n)}(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

(coeficiente de Lagrange)

$$\mathcal{L}_i^{(n)}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}$$

- Portanto os valores de $\mathcal{L}_0^{(n)}$, $\mathcal{L}_1^{(n)}$ e $\mathcal{L}_2^{(n)}$ para $n = 2$ são:

$$\mathcal{L}_0^{(2)}(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \quad \mathcal{L}_1^{(2)}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$\mathcal{L}_2^{(2)}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

x_i	-1	1	2
$f(x_i)$	-4	-2	-10

- Portanto os valores de $\mathcal{L}_0^{(n)}$, $\mathcal{L}_1^{(n)}$ e $\mathcal{L}_2^{(n)}$ para $n = 2$ são:

$$\mathcal{L}_0^{(2)}(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{(x-1)(x-2)}{(-1-1)(-1-2)} = \frac{x^2-3x+2}{6}$$

$$\mathcal{L}_1^{(2)}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{(x+1)(x-2)}{(1+1)(1-2)} = \frac{x^2-x-2}{-2}$$

$$\mathcal{L}_2^{(2)}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = \frac{(x+1)(x-1)}{(2+1)(2-1)} = \frac{x^2-1}{3}$$

Polinômio Interpolador de Lagrange

Polinômio Interpolador de Lagrange

- Exemplo: Qual o polinômio interpolador de Lagrange para o problema descrito pelos valores tabelados a seguir:

x_i	-1	1	2
$f(x_i)$	-4	-2	-10

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \mathcal{L}_i^{(n)}(x) = -4\mathcal{L}_0^{(2)}(x) - 2\mathcal{L}_1^{(2)}(x) - 10\mathcal{L}_2^{(2)}(x)$$

$$P_n(x) = -4 \left(\frac{x^2 - 3x + 2}{6} \right) - 2 \left(\frac{x^2 - x - 2}{-2} \right) - 10 \left(\frac{x^2 - 1}{3} \right)$$

$$P_n(x) = -\frac{2}{3}x^2 + 2x - \frac{4}{3} + x^2 - x - 2 - 10\frac{x^2}{3} + \frac{10}{3} = -3x^2 + x$$

Exercício Proposto

Obtenha, usando o método de Lagrange e todos os pontos do tabelamento abaixo, o polinômio interpolador $P(x)$. Qual o valor estimado para $x = 1,5$?

i	0	1	2	3	4
x_i	0,5	1	2	3	5
$f(x_i)$	0,125	1	8	27	125

Revisão

Sistemas de Equações Lineares

- Métodos diretos:
 - Eliminação de Gauss (com e sem pivotação);
 - Fatoração LU;
 - Fatoração de Cholesky.
- Métodos iterativos:
 - Método de Jacobi;
 - Método de Gauss-Seidel.
- * Convergência e mal condicionamento

Eliminação de Gauss

- Eliminação de Gauss:
 - Objetivo: encontrar a matriz triangular superior, ou seja, zerar os elementos abaixo da diagonal principal;
 - Pivô: número da diagonal principal utilizado para zerar os elementos abaixo da diagonal principal.
- 1º passo: definir a matriz dos coeficientes e o vetor de termos independentes;
- 2º passo: multiplicadores:

$$m_{ik} = -\frac{a_{ik}}{a_{kk}}, \quad i = (k + 1), (k + 2), \dots, n$$

- 3º passo: para cada multiplicador:
 - $a_{ij} = a_{ij} + (m * a_{kj})$
 - $b_i = b_i + mb_k$
- 4º passo: calcular as soluções x_j .

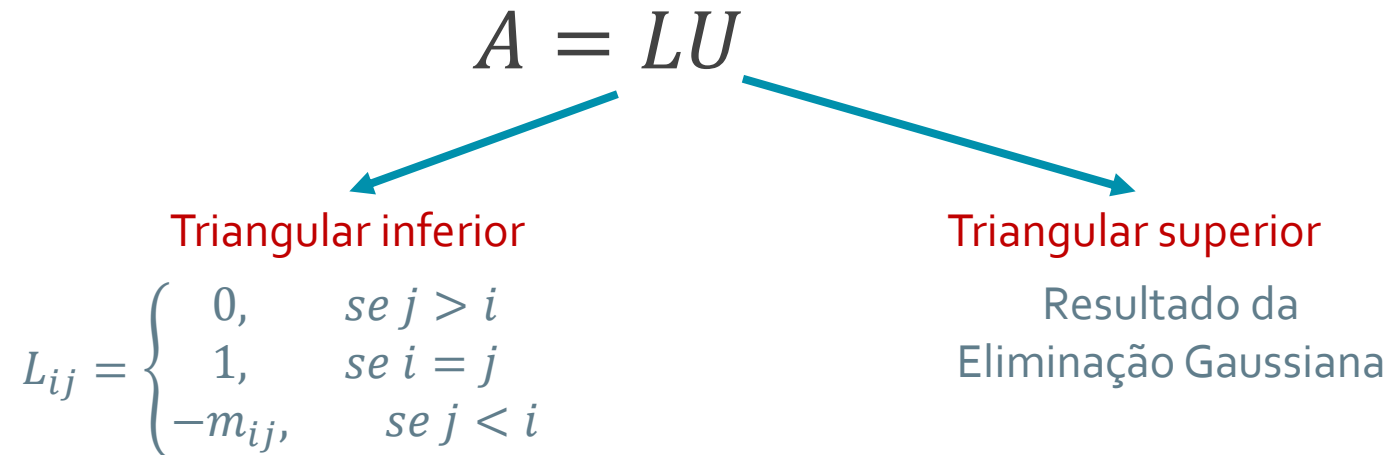
Pivotação ou Pivoteamento

- Os multiplicadores são calculados a partir do pivô:

$$m = - \frac{\text{"elemento que quero zerar"}}{\text{pivô}}$$

- O que acontece se o pivô for nulo ou se estiver próximo de zero?
- Pivoteamento parcial
 - i. Escolher para pivô o elemento de maior módulo entre os coeficientes a_{ij} da coluna de interesse;
 - ii. Trocar as linhas se for necessário.
- Pivoteamento completo ou total
 - i. Escolher para pivô o elemento de maior módulo entre **todos** os elementos a_{ij} que atuam no processo de eliminação.
 - ii. Trocar as linhas e colunas se for necessário.

Fatoração LU



- 1º passo: aplicar o processo de Eliminação Gaussiana. Ao final vamos obter a matriz U , que é a **triangular superior**.
- 2º passo: criarmos a matriz L , **triangular inferior**.
- 3º passo: resolver o sistema de equações $LUx = b_i$:

$$\begin{cases} Ly_i = b_i \\ Ux = y_i \end{cases}$$

Fatoração de Cholesky

- 1º passo: verificar se A é simétrica e positivo definida.

$$\det(A) > 0$$

- 2º passo: Calcular $A = LL^T$:
 - L é uma matriz triangular inferior.

Regra geral:

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=0}^{i-1} l_{ik}^2}$$
$$l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=0}^{j-1} l_{ik} * l_{jk} \right) / l_{jj}$$

- 3º passo: resolver o sistema de equações $LL^T x = b_i$:

$$\begin{cases} Ly_i = b_i \\ L^T x = y_i \end{cases}$$

$$L = \begin{bmatrix} l_{00} & 0 & 0 \\ l_{10} & l_{11} & 0 \\ l_{20} & l_{21} & l_{22} \end{bmatrix}$$

Sistemas de Equações Lineares (métodos iterativos)

Escrever:

$$Ax = b \longrightarrow x = Bx + c$$

$$Ax = b$$

$$x = Bx + c$$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = (b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n)/a_{11} \\ x_2 = (b_2 - a_{21}x_1 - \cdots - a_{2n}x_n)/a_{22} \\ \vdots \\ x_n = (b_m - a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots)/a_{mn} \end{cases}$$

Jacobi

• Algoritmo:

1. Escolher uma aproximação inicial $x^{(0)}$, em geral, $x_i^{(0)} = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$.

2. Para $k = 0, 1, 2, \dots$ faça
 Para $i = 1, 2, \dots, n$ faça

(não necessariamente nessa ordem)

A ordem do cálculo das
componentes é indiferente

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}$$

fim.

Se $\left(\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \varepsilon \text{ OU } \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}|}{|x_i^{(k)}|} < \varepsilon \text{ OU } k > M \right)$ Pare.

(onde ε é uma precisão dada e M um natural que informa a quantidade de iterações a ser realizada)

fim.

Gauss-Seidel

• Algoritmo:

1. Escolher uma aproximação inicial $x^{(0)}$, em geral, $x_i^{(0)} = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$.

2. Para $k = 0, 1, 2, \dots$ faça
 Para $i = 1, 2, \dots, n$ faça
 (necessariamente nessa ordem)

Os valores já atualizados das variáveis são usados na mesma iteração pelas demais variáveis
 A ordem importa!

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}$$

fim.

Se $\left(\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \varepsilon \text{ OU } \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}|}{|x_i^{(k)}|} < \varepsilon \text{ OU } k > M \right)$ Pare.

(onde ε é uma precisão dada e M um natural que informa a quantidade de iterações a ser realizada)

fim.

Condições de convergência para os métodos iterativos

- Antes de aplicar qualquer um dos métodos iterativos **é possível verificar se esse método irá convergir para a solução** do sistema de equações lineares que está sendo observado;
- Se as condições de convergência forem satisfeitas para o método Jacobi, então o método de Gauss-Seidel irá convergir com uma quantidade de iterações **igual** ou **inferior** àquela do método de Jacobi;
- Se as condições suficientes não forem satisfeitas, nada se pode afirmar sobre a convergência:
 - Não converge por nenhum dos métodos;
 - Converte por um deles e diverge pelo outro;
 - Converte por ambos.

Condições de convergência para os métodos iterativos

$$Ax = b \longrightarrow x = Bx + c$$

- Antes de aplicar qualquer um dos métodos iterativos é **possível verificar se esse método irá convergir para a solução** do sistema de equações lineares que está sendo observado;
- Os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel **irão convergir para qualquer vetor aproximação inicial** $x^{(0)}$ se:

I. TODOS os autovalores da matriz B forem, em módulo, menores que 1.

λ (autovalores) fazendo $\det(A - \lambda I) = 0$

OU

II. A matriz A for não singular e de diagonal estritamente dominante.

$\det(A) \neq 0$

Se $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|$, $i = 1, 2, \dots, n$ (por linha)

OU

Se $|a_{jj}| > \sum_{i \neq j}^n |a_{ij}|$, $j = 1, 2, \dots, n$ (por coluna)

Avaliar mal condicionamento

- A partir da comparação dos determinantes de A e A^{-1} .
- Medir o número de condição: $cond(A)$;

$$cond(A) = \|A\| \times \|A^{-1}\|$$

onde $\|A\|$ é a **norma** da matriz.

- Se $cond(A) \gg 1$ é um forte indício de mal condicionamento.

Ajustamento

- Combinação linear de funções elementares:

$$P(x) = a_0 G_0(x) + a_1 G_1(x) + \cdots + a_m G_m(x)$$

(combinação linear das funções G_j)

$$P(x) = \sum_{j=0}^m a_j G_j(x)$$

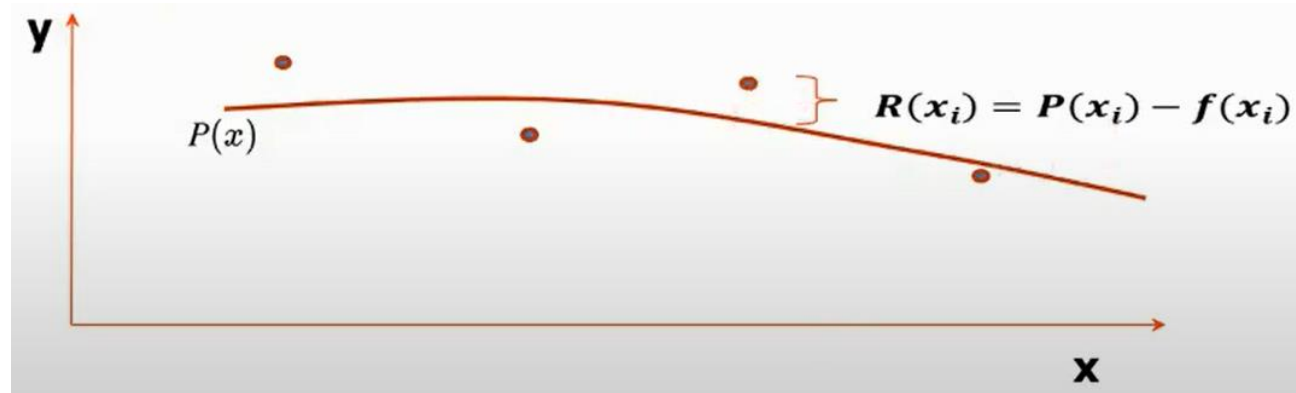
a_j : coeficientes a serem ajustados.

G_j : funções conhecidas (sen(x), ln(x), polinômios, etc.).

- Buscamos a função $P(x)$ que melhor se ajuste/represente o tabelamento utilizado.

Ajustamento

- Geometricamente:



- **Objetivo:** minimizar os resíduos $R(x_i)$;

$$\sum_{i=0}^n R^2(x_i) = 0$$

- Então, buscaremos uma função que minimize a soma dos quadrados dos resíduos;
- **Método dos Mínimos Quadrados (MMQ).**

MMQ

Expandindo $R(x_i) = P(x_i) - f(x_i)$, temos:

$$\sum_{k=0}^m a_k \sum_{i=0}^n G_k(x_i) G_j(x_i) = \sum_{i=0}^n f(x_i) G_j(x_i), j = 0, 1, 2, \dots, m$$

(equação geral do Sistema Normal)

- Possui solução única e ela é o ponto de mínimo de $\phi(a_0, a_1, \dots, a_m)$.

Ajustamento não linear

- Para aplicar o MMO assumimos que $P(x)$ é uma combinação linear de funções elementares:

$$P(x) = a_0 G_0(x) + a_1 G_1(x) + \cdots + a_m G_m(x)$$

- Quando $P(x)$ não é linear em relação aos seus coeficientes podemos tentar linearizá-la, ou seja, encontrar $P'(x)$ linear em relação aos seus parâmetros:

- Exemplos:

$$P(x) = ae^{bx} \rightarrow P'(x) = a' + bx, \text{ onde } a' = \ln(a) \text{ e } P'(x) = \ln(P(x))$$

$$P(x) = \frac{1}{ax+bx^2+cx^3} \rightarrow P'(x) = ax + bx^2 + cx^3, \text{ onde } P'(x) = \frac{1}{P(x)}$$

$$P(x) = \sqrt{a + b \cos(x)} \rightarrow P'(x) = a + b \cos(x), \text{ onde } P'(x) = P^2(x)$$

- Nem sempre é possível realizar essa operação:

$$P(x) = a^2 + bx \rightarrow P'(x) = a' + bx, \text{ onde } a' = a^2 \rightarrow a = \sqrt{a'}, \text{ mas se } a' < 0, \text{ não dá pra aplicar o método.}$$

$$P(x) = a(x + b) = ax + ab \rightarrow P'(x) = ax + c, \text{ onde } c = a * b, \text{ mas em } P'(x) \text{ os parâmetros } a \text{ e } c \text{ não são linearmente independentes.}$$

Interpolação

- Polinômio Interpolador de Lagrange;
- Teorema da existência e unicidade:

Dada uma função f , **existe um único polinômio** P_n interpolador de f , relativamente aos pontos x_0, x_1, \dots, x_n e ele é dado por:

$$P_n = \sum_{i=0}^n f(x_i) \mathcal{L}_i^{(n)}(x)$$

Onde

$$\mathcal{L}_i^{(n)}(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

(coeficiente de Lagrange)

Referências

- Métodos Numéricos. José Dias dos Santos e Zanoni Carvalho da Silva. **(capítulos 3, 4 e 5);**
- Cálculo Numérico – aspectos teóricos e computacionais. Márcia A. Gomes Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes. **(capítulo 3, 5 e 6).**