INTRODUÇÃO À COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

IVº Trabalho: Interpolação e Aproximação

Tobias J. D. E. Rosa 2022 1º Período

Resumo

Este trabalho apresenta brevemente os métodos da spline cúbica para interpolação e dos mínimos quadrados para aproximação e mostra as etapas da criação de um programa que resolve os métodos. Por fim, os códigos fontes em linguagem fortran são disponibilizados.

Solução do Problema

Ao interpolar utilizando polinômios de grau mais elevado, deparamos com o indesejado fenômeno de Runge. Como forma de contornar esse problema, são apresentadas as funções spline que se resumem em interpolar a função de aproximação a partir de um número menor de pontos por funções porém aumentando-se o número de funções. As funções spline podem ser utilizadas desde que a função de aproximação seja contínua e tenha derivadas contínuas até certa ordem. Entretanto, ao usar spline linear, as derivadas de primeira ordem são descontínuas nos nós, enquanto que a spline cúbica possui derivada contínua até a segunda ordem, o que significa que as curvas serão suaves nos nós, sendo essa uma vantagem da spline cúbica sobre a spline linear. Embora a spline cúbica seja ideal para interpolação, não pode ser usada nos casos de extrapolação, e ainda não é recomendado para os casos em que haja erros não previsíveis como nos casos de resultados de pesquisa ou de experimento físico. Para isso, sugere-se o uso do método dos quadrados mínimos (RUGGIERO, 2008).

Spline cúbica interpolante: É um método que interpola de forma em que são definidas n funções polinomiais cúbicas para n intervalos. Esse método utiliza uma técnica de trabalhar com uma matriz tridiagonal em que a equação para cada linha k é obtida da seguinte forma:

$$h_k \cdot g_{k-1} + 2 \cdot (h_k + h_{k+1}) \cdot g_k + h_{k+1} \cdot g_{k+1} = 6 \cdot \left(\frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} - \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} \right)$$

A solução do sistema linear da matriz tridiagonal é o vetor $(g_1, g_2 \ldots, g_n)^T$.

A função polinomial cúbica respectiva a cada intervalo k é da seguinte forma:

$$S_k(x) = a_k \cdot (x - x_k)^3 + b_k \cdot (x - x_k)^2 + c_k \cdot (x - x_k) + d_k$$

Em que os coeficientes a_k, b_k, c_k, e d_k são obtidos através das seguintes equações:

$$a_k = \frac{g_k - g_{k-1}}{6 \cdot h_k},\ b_k = \frac{g_k}{2},\ c_k = \frac{y_k - y_{k-1}}{2} + \frac{2h_k - g_{k-1} h_k}{6} \text{ e } d_k = y_k \text{ sendo} y_k = f(x_k).$$

A estratégia particular deste trabalho foi montar uma matriz $A_{k\,x\,k}$ e um vetor Y separadamente, a fim de resolver o sistema $A \cdot g = Y$ em que k é o número de linhas:

$$A_k = h_k \cdot g_{k-1} + 2 \cdot (h_k + h_{k+1}) \cdot g_k + h_{k+1} \cdot g_{k+1}$$

$$Y = 6 \cdot \left(\frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} - \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} \right)$$

O método de resolução de sistema utilizado foi o de Gauss Seidel, e como entrada, foi utilizada a matriz $A_{n\,x\,n+1}$ que é a própria matriz $A_{n\,x\,n}$ porém, agora o vetor Y foi inserido como uma coluna adicional à direita.

Uma vez encontrado o vetor solução g, foi utilizado um método iterativo para gerar uma função polinomial $S_n(x)$ para cada intervalo n. Finalmente, para interpolar basta aplicar um ponto x na função do respectivo intervalo. Os intervalos são definidos a partir dos dados originais do problema, apresentados na Tab. 1.

Tabela 1 - Dados originais do problema

x	y
1,59	92,75
4,46	79,16
7,32	76,56
10,29	67,39
13,31	65,92
16,28	61,00
19,33	50,76
22,40	49,86
25,29	43,83
28,17	40,74
31,21	38,44
34,32	34,87
37,22	30,39
40,20	28,70
43,25	25,88
46,25	22,72
49,20	21,48

Como o objetivo deste trabalho não é realizar a interpolação em um ponto específico, mas sim interpolar uma quantidade de pontos em um intervalo especificado, serão definidas três variáveis: número de pontos, limite inferior e limite superior, possibilitando ao usuário escolher a quantidade de pontos e restringir o intervalo desejado.

Retomando as ideias anteriores, temos n funções para n intervalos que não necessariamente estão espaçados e que irão receber uma quantidade de pontos que também não estão distribuídos conforme o tamanho dos intervalos.

Para resolver esse problema, foi criada uma rotina do tipo while que compara o ponto a ser calculado com cada intervalo e encontra a sua posição, os quatro coeficientes do polinômio de terceiro grau e a função $S_n(x)$. Desta forma, é possível interpolar um número infinito de pontos dentro do intervalo escolhido. Para o problema proposto foram utilizados 50 pontos dentro do intervalo de 2 a 40, como apresentado na Tab. 2.

Método dos quadrados mínimos: A estratégia utilizada no método dos mínimos quadrados se resumiu basicamente na montagem da matriz A. Observou se que todos os termos da matriz que se repetiam tinham a soma dos coeficientes i+j iguais, a partir disso e do uso da função "sum(vetor)" que possibilita somar os termos de um ou mais vetores ou fazer o produto interno de ambos, foi possível encontrar coeficientes para polinômios de grau maior, inclusive.

Apresentação e Discussão de Resultados

Os resultados relacionados à aproximação pelo método da spline cúbica podem ser observados na Tab. 2.

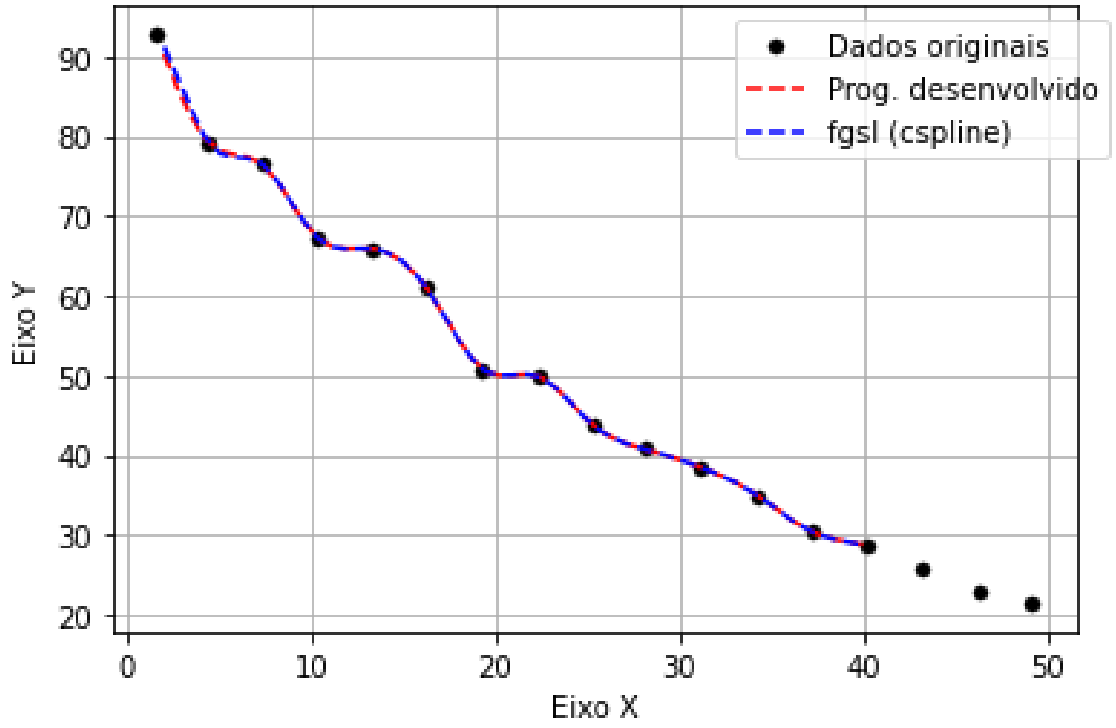
Tabela 2 - Conjunto de pontos gerados por interpolação

Dados: 50 pontos [2 : 40]	**Programa desenvolvido**	**FGSL**	**Erro relativo**
X	**Y1**	**Y2**	**|Y2-Y1|/Y1**
2.00000	90.3142166	91.19991	0,009806799342818
2.76000	86.0090485	87.37768	0,015912645516594
3.52000	82.3097916	83.21339	0,010978018318783
4.28000	79.6100388	79.75919	0,001873522513595
5.04000	78.2181549	77.92108	0,00379803001464
5.80000	77.7411804	77.38708	0,004554862663238
6.56000	77.4368210	77.24044	0,002536015779883
7.32000	76.5599976	76.56000	3,13479633602408E-08
8.08000	74.5985336	74.69278	0,001263381402446
8.84000	71.9629974	72.05846	0,001326551192266
9.60000	69.2968674	69.34487	0,000692709523548
10.36000	67.2433701	67.23971	5,44306449031578E-05
11.12000	66.2148132	66.18854	0,000396787346068
11.88000	65.9260941	65.90071	0,000385038736885
12.64000	65.9585495	65.94616	0,000187837666139
13.40000	65.8936768	65.89488	1,82597186625072E-05
14.16000	65.3966522	65.40348	0,00010440595612
14.92000	64.3658829	64.37230	9,96972264011789E-05
15.68000	62.7413597	62.74431	4,70232078824705E-05

16.44000	60.4638443	60.46331	8,83668589359296E-06
17.20000	57.6349297	57.63304	3,27874087785961E-05
17.96000	54.7055511	54.70377	3,25579390790985E-05
18.72000	52.1719170	52.17105	1,66181357683197E-05
19.48000	50.5289726	50.52909	2,32341949484829E-06
20.24000	49.9738464	49.97430	9,07674779262468E-06
21.00000	50.0333252	50.03382	9,88940866953339E-06
21.76000	50.1431313	50.14343	5,95694748727973E-06
22.52000	49.7395477	49.73955	4,62408707921627E-08
23.28000	48.5074463	48.50743	3,36030882719069E-07
24.04000	46.7577057	46.75766	9,77379007737491E-07
24.80000	44.8975372	44.89748	1,27401197410299E-06
25.56000	43.3300743	43.32999	1,9455309357151E-06
26.32000	42.2418365	42.24163	4,88851851877543E-06
27.08000	41.5023384	41.50213	5,02140380596533E-06
27.84000	40.9561958	40.95611	2,09492113036538E-06
28.60000	40.4524536	40.45266	5,10228630490959E-06
29.36000	39.9177055	39.91823	1,31395327821255E-05
30.12000	39.3437958	39.34442	1,58652714438191E-05
30.88000	38.7245560	38.72487	8,10855003742416E-06
31.64000	38.0529633	38.05239	1,50658437683149E-05
32.40000	37.3076172	37.30594	4,49559667939113E-05
33.16000	36.4550056	36.45281	6,022766870732E-05
33.92000	35.4612198	35.45991	3,69361236694221E-05
34.68000	34.2956467	34.29736	4,99567777504162E-05
35.44000	33.0132103	33.01887	0,000171437432124
36.20000	31.7604008	31.76771	0,000230135634812
36.96000	30.6882515	30.69153	0,000106832414352
37.72000	29.9336720	29.92464	0,000301733779939
38.48000	29.4645901	29.44118	0,000794516398177
39.24000	29.1372948	29.10952	0,000953238802389
40.00000	28.8060818	28.79616	0,000344434209029

Os pontos apresentados na Tab. 2, foram utilizados para comparar os resultados da interpolação feita pelo programa desenvolvido e pela biblioteca FGSL. Para isso foi calculado um erro relativo entre as respostas, que apesar de apresentar um aumento do erro à medida que Y aumenta, foi considerado pequeno, na casa de 10^{-3}. Uma forma de comparar resultados é sobrepor os resultados graficamente, para isso, os resultados obtidos foram inseridos em um programa em linguagem python e plotados com auxílio da biblioteca matplotlib. Conforme mencionado, é possível observar na Fig. 1 a pequena tendência do erro à medida que os valores de Y aumentam.

Figura 1 - Conjunto de pontos gerados por interpolação



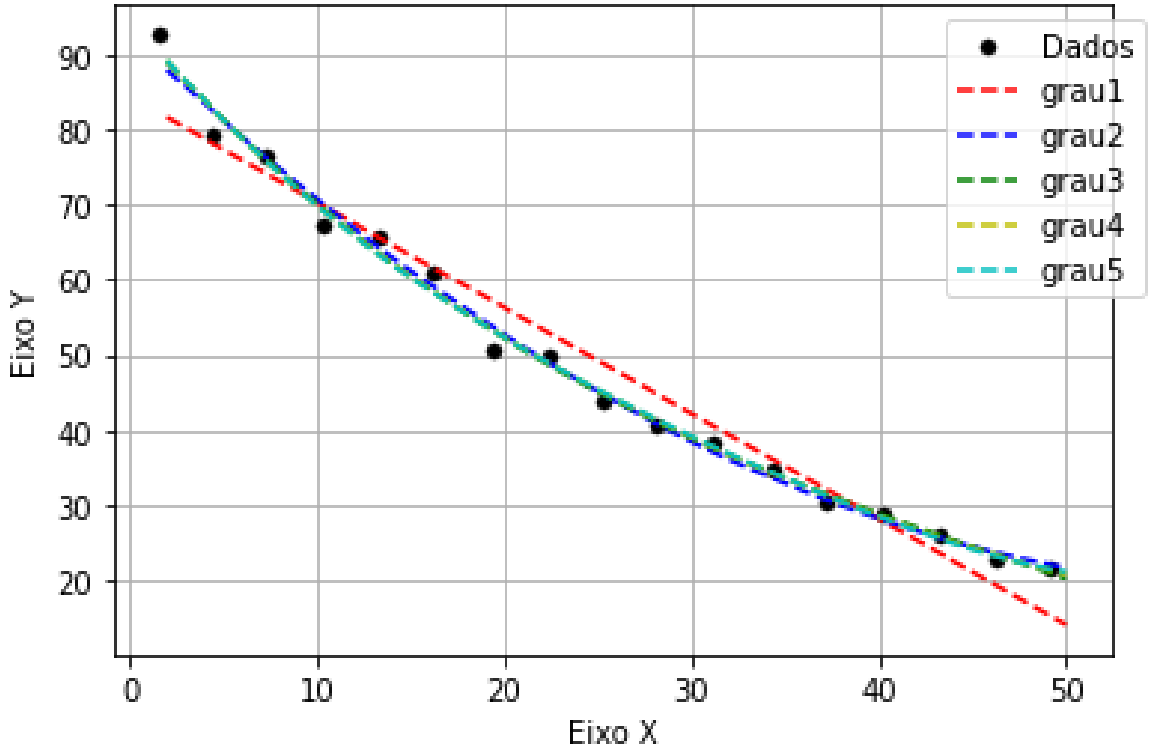
A partir dos mesmos dados de entrada da Tab. 1 foi também testado o programa desenvolvido para aproximação pelo método dos mínimos quadrados. O programa desenvolvido retorna polinômios de até nove graus, e sendo facilmente alterado para solucionar grau maior. Entretanto, não há necessidade de se implementar uma aproximação com polinômio de grau maior, visto que em algumas situações, polinômios de grau menor representam melhor os dados a serem aproximados. Para o problema atual, foram testadas 5 funções polinomiais e comparadas com a tendência dos dados do gráfico, e chegou-se a conclusão que o polinômio de grau 2 pode ser considerado uma boa aproximação para os dados. A extrapolação para x=55 é apresentada na Tab. 3.

Tabela 3 - Aproximação para x=55 usando diferentes polinômios

Grau do polinômio	1	2	3	4	5
f(55)	6.9961	19.8352	15.9925	18.5507	20.5662

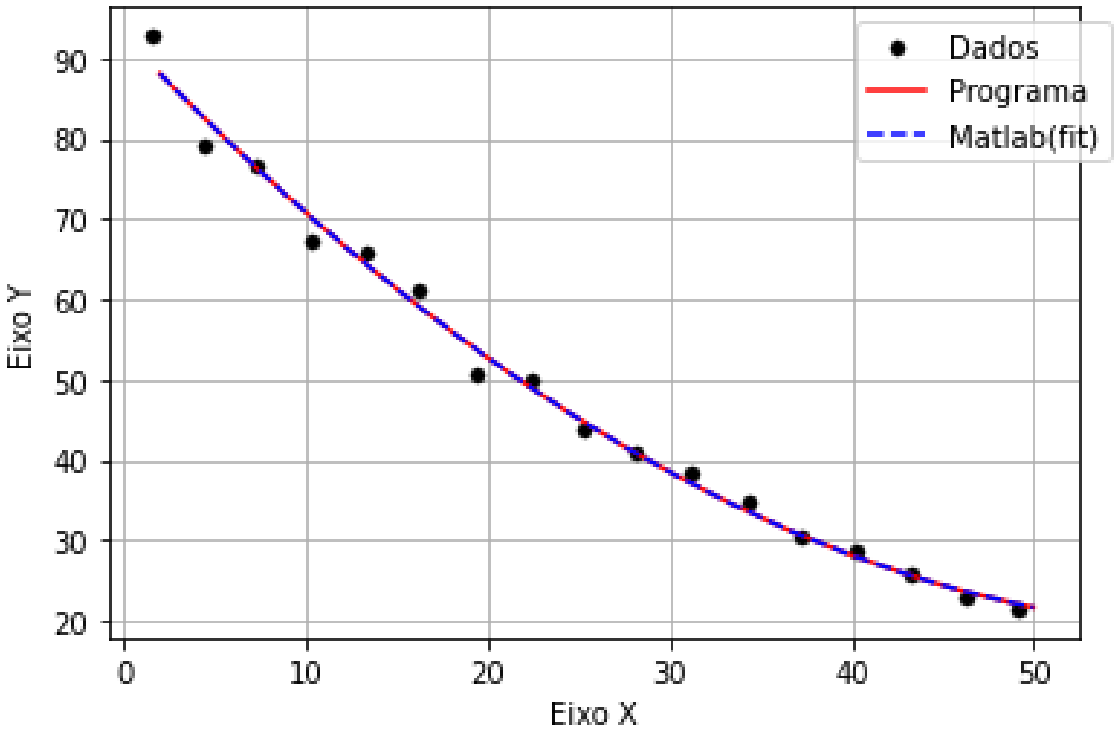
A extrapolação pelo polinômio de grau 3 ficou um pouco fora do previsto a partir da análise visual da curva pela Fig. 1. Os polinômios de grau 2 e grau 3 podem ser boas aproximações, portanto será adotado o polinômio de grau 2.

Figura 2 - Curvas obtidas pelos diferentes polinômios



Uma vez escolhido o polinômio de grau dois, foi utilizada a ferramenta “fit” do matlab para comparar os resultados, que foram praticamente coincidentes, como apresentado na Fig. 3.

Figura 3 - curvas de um polinômio de grau 2 por Matlab e pelo programa.



Conclusões

De modo geral, foi possível observar o poder das ferramentas de interpolação e aproximação e entender como as ferramentas disponibilizadas pelos softwares consagrados funcionam. Além do mais, os programas desenvolvidos chegaram em resultados próximos aos da biblioteca fgs e da ferramenta do Matlab utilizados.

Referências

RUGGIERO, Marcia A. Gomes; LOPES, Vera Lucia da Rocha. *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. São Paulo: Pearson Makron Books, 2008.

CÓDIGOS-FONTE

spline_cubica.f90

```
!gfortran spline_cubica.f90 ; ./a.out entrada_trabalho_4
!esse programa usa o método interpola e gera  "Resultado_spline_cubica.txt"
!Institudo Militar de Engenharia - IME
!Programa utilizado na disciplina de introdução a computação científica
!Aluno: Tobias José Degli Esposte Rosa
program spline
implicit none
real, dimension (:,:), allocatable ::A1,A2
real, dimension (:), allocatable::x,h,vetor_x,g,y,vetor_y,a,b,c,d,y_data
integer:: n_lin,ctd,i,j
character(20)::argument
real::s,g0,x_data,n_pontos,e,x_ant,lim_inf,lim_sup

call get_command_argument(1, argument)
open(1,file=trim(argument)//".txt",status='old')
open(2,file="Resultado_spline_cubica.txt",status='unknown')
read(1,*)
read(1,*)n_lin
read(1,*)
read(1,*)
read(1,*)
read(1,*)lim_inf,lim_sup
read(1,*)
read(1,*)n_pontos
read(1,*)
allocate (A1(n_lin,n_lin),A2(n_lin-2,n_lin-1),x(n_lin),y(n_lin),h(n_lin-1),vetor_x(n_lin),&
& g(n_lin-2),vetor_y(n_lin),a(n_lin-2),b(n_lin-2),c(n_lin-2),d(n_lin-2),y_data(n_lin-2))
read(1,*)x(:)
read(1,*)y(:)
close(1)
do i=2,n_lin
    h(i)=x(i)-x(i-1)
end do
do i=2,n_lin-1
```

```
        vetor_y(i-1)=6*((y(i+1)-y(i))/h(i+1)-(y(i)-y(i-1))/h(i))
          !print*,  'y(',i+1,')=',y(i+1),'y(',i,')=',y(i),'y(',i-1,') = ',y(i-1),'h(',i,') = ',h(i),'vetor_y(',i-1,') = ',vetor_y(i-1)
      end do
      do i=1,n_lin-2
        A1(i,i)=h(i+1)
        A1(i,i+1)=2*(h(i+1)+h(i+2))
        A1(i,i+2)=h(i+2)
      end do
      ! MATRIZ INPUT PARA O SISTEMA DE GAUSS JACOBI
      do i=1,n_lin-2
        A2(i,n_lin-1)=vetor_y(i)
        do j=1, n_lin-2
          A2(i,j)=A1(i,j+1)
       end do
      end do
      ! ENCONTRA O VETOR SOLUÇÃO DO SISTEMA DA MATRIZ A PELO MÉTODO DE GAUSS SEIDEL
       ctd=0 ! CONTA ITERAÇÕES
       e=1 !condição para entrar no while
       do while (e>1e-5)
         do i=1,n_lin-2
          s=0
          do j=1,n_lin-2
           if (i/=j) then
            s=s+A2(i,j)*g(j)
           end if
          end do
          x_ant=g(i)
          g(i)=(A2(i,n_lin-1)-s)/(A2(i,i))
          e=((g(i)-x_ant)**2)**0.5
         end do
         ctd=ctd+1
        end do
        !print*,"vetor g",g,"numero de iterações",ctd,"erro =",e
      ctd=0
      !AQUI INICIA UM PROCESSO ITERATIVO PARA GERAR UMA QUANTIDADE "n_pontos" DE PARES ORDENADOS UTILIZANDO SPLINE CÚBICA
      do while (ctd<n_pontos+1)
```

```
        x_data=lim_inf+(lim_sup-lim_inf)*(1/n_pontos)*ctd
        !DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES a,b,c e d
        do i=1,n_lin-1
           if (i==1) then ! g0 = gn = zero
             g0=0
           else
             g0=g(i-1)
           end if
           a(i)=(g(i)-g0)/(6*h(i+1))
           b(i)=g(i)/2
           c(i)=(y(i+1)-y(i))/h(i+1)+(2*h(i+1)*g(i)+g0*h(i+1))/6
           d(i)=y(i+1)
           y_data(i)=a(i)*(x_data-x(i+1))**3+b(i)*(x_data-x(i+1))**2+c(i)*(x_data-x(i+1))+d(i)
        end do
        s=1 !condição para entrar no while
        i=1
        do while (s>0)! Encontra o intervalo do x_data e chama a função respectiva ao intervalo
          s=x_data-x(i)
          i=i+1
        end do
        write(2,*)x_data,y_data(i-2) !,'função',i-1
        ctd=ctd+1
      end do
      close(2)
      deallocate (A1,A2,x,y,h,vetor_x,vetor_y)
      end program spline
```

min_quad.f90

```
      !gfortran min_quad.f90 ; ./a.out entrada_trabalho_4
      !esse programa usa o método dos mínimos quadrados e gera  "Resultado_min_quad.txt"
      !Institudo Militar de Engenharia - IME
      !Programa utilizado na disciplina de introdução a computação científica
      !Aluno: Tobias José Degli Esposte Rosa
      program min_quad
      implicit none
      real, dimension (:,:), allocatable ::A
      real, dimension (:), allocatable::x,y,g
      integer:: n_lin,x_len,n,i,j,grau
      character(20)::argument
```

```
real::s,e,x_anterior

call get_command_argument(1, argument)
open(1,file=trim(argument)//".txt",status='old')
open(2,file="Resultado_min_quad.txt",status='unknown')
read(1,*)
read(1,*)x_len
read(1,*)
read(1,*)grau
read(1,*)
read(1,*)
read(1,*)
read(1,*)
read(1,*)
n_lin=grau+1
allocate (A(n_lin,n_lin+1),x(x_len),y(x_len),g(n_lin))
read(1,*)x(:)
read(1,*)y(:)
! GERANDO A MATRIZ A (RESOLVE POLINÔMIO ATÉ GRAU 9)
do i=1,n_lin
  A(i,n_lin+1)=sum(y*x**(n_lin-i))
    do j=1, n_lin
      if (i+j==2) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau))
      elseif (i+j==3) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-1))
      elseif (i+j==4) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-2))
      elseif (i+j==5) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-3))
      elseif (i+j==6) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-4))!para resolver um polinomio de grau até 2, bastaria até aqui
      elseif (i+j==7) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-5))
      elseif (i+j==8) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-6))
      elseif (i+j==9) then
        A(i,j)=sum(x**(2*grau-7))
```

```
        elseif (i+j==10) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-8))
        elseif (i+j==11) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-9))
        elseif (i+j==12) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-10))
        elseif (i+j==13) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-11))
        elseif (i+j==14) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-12))
        elseif (i+j==15) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-13))
        elseif (i+j==16) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-14))
        elseif (i+j==17) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-15))
        elseif (i+j==18) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-16))
        elseif (i+j==19) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-17))
        elseif (i+j==20) then
          A(i,j)=sum(x**(2*grau-18))
        end if
      end do
    end do
    ! ENCONTRA O VETOR SOLUÇÃO DO SISTEMA DA MATRIZ A PELO MÉTODO DE GAUSS SEIDEL
    n=0 ! CONTA ITERAÇÕES
    e=1!condição para entrar no while
    do while (e>1e-10)
      do i=1,n_lin
        s=0
        do j=1,n_lin
          if (i/=j) then
            s=s+A(i,j)*g(j)
          end if
        end do
        x_anterior=g(i)
```

```
      g(i)=(A(i,n_lin+1)-s)/(A(i,i))
      e=((g(i)-x_anterior)**2)**0.5
     end do
     n=n+1
    end do
    do i=1,grau+1
     write(2,*)"alpha",(i),"=",g(i)!,"numero de iterações",n,"erro =",e
    end do
    deallocate (A,x,y)
    end program min_quad
```

interpp.f90

```
    !gfortran -I/usr/local/include/fgsl interpp.f90 -lfgsl -lm ; ./a.out
    !esse programa é um template da pasta "examples" da bibli. fgsl_int
    !possui modificações para adaptar ao problema
    !Instituto Militar de Engenharia - IME
    !Programa utilizado na disciplina de introdução a computação científica
    !Aluno: Tobias José Degli Esposte Rosa
    program interpp
     use fgsl
     implicit none
     integer(fgsl_size_t), parameter :: n = 17
     integer(fgsl_int) :: i, status,nnn
     real::nn
     real(fgsl_double) :: xi, yi
      real(fgsl_double)  :: x(17) = (/1.59D0, 4.46D0, 7.32D0, 10.29D0, 13.31D0, 16.28D0,19.33D0,
22.40D0, &
     &25.29D0, 28.17D0, 31.21D0, 34.32D0, 37.22D0, 40.20D0, 43.25D0, 46.25D0, 49.20D0/), &
         y(17) = (/92.75D0, 79.16D0, 76.56D0, 67.39D0, 65.92D0, 61.00D0,50.76D0, &
          &49.86D0, 43.83D0, 40.74D0, 38.44D0, 34.87D0, 30.39D0, 28.70D0, 25.88D0, 22.72D0,
21.48D0 /)
    !      Note: first = last for periodic data
     type(fgsl_interp_accel) :: acc
     type(fgsl_spline) :: spline
     nnn=50
     nn=50
     spline =  fgsl_spline_alloc(fgsl_interp_cspline_periodic, n)
     write(6, '("#m=0,S=5")')
     do i=1,n
       write(6, '(2(F10.5,1X))') x(i), y(i)
```

```
  end do
  write(6, '("#m=1,S=0")')
  status = fgsl_spline_init(spline, x, y)
  do i=0, nnn
    xi = 2+38*(i/nn)
    yi = fgsl_spline_eval(spline, xi, acc)
    write(6, '(2(F10.5,1X))') xi, yi
  end do
  call fgsl_spline_free (spline)
  call fgsl_interp_accel_free (acc)
end program interpp
```