Computação Científica I
Lista 1: Interpolação, Integrais e Derivadas

Professor: Bernardo Costa

02 de novembro de 2016... para 16 de novembro

"[...] thiſ principle, by which each ſlight variation, if uſeful, iſ preſerved, by the term of Natural Selection [...]"
– Darwin, Sir Charles (1859)

Dizem que não há nada a que você não se acostume
Cala a boca e aumenta o volume então.
– Titãs

1 A interpolação de Lagrange como aplicação linear

Seja f uma função qualquer de $\mathbf{R}$ em $\mathbf{R}$. O conjunto de todas as funções será denotado por $\mathcal{F}$. Se $g(x)$ é o polinômio interpolador de Lagrange de f nos pontos x_i, podemos escrever $g(z) = \sum g_j z^j$ para coeficientes g_j. O objetivo deste exercício é estudar algumas "linearidades" desta operação.

Começamos com um conjunto de "nós de interpolação" fixos: $X = \{x_i\}$ está dado, com n pontos.

1. Seja a aplicação L_X de $\mathcal{F}$ em Pol_{n-1}, que para cada função $f \in \mathcal{F}$ dá o polinômio interpolador. Mostre que L_X é linear.

2. Seja π_X a aplicação de $\mathcal{F}$ em $\mathbf{R}^n$ que a cada função f dá o vetor $(f(x_i))$. Mostre que esta aplicação também é linear.

3. Mostre que L_X é uma projeção, ou seja, que $L_X(L_X(f)) = L_X(f)$. Em "português", o polinômio interpolador de um polinômio de grau menor do que n é ele próprio.

4. Mostre que π_X é injetiva e sobrejetiva de Pol_{n-1} em $\mathbf{R}^n$.

5. Seja $\phi_X : \mathbf{R}^n \to \mathrm{Pol}_{n-1}$ a aplicação inversa de π_X restrita aos polinômios de grau menor do que n. Fixe $X = \{1, 2, 3, 4\}$ e calcule ϕ_X da base canônica, *sem* usar π_X: quais são as raízes do polinômio $\phi_X(e_1)$? Deduza a regra para um X qualquer.

6. Implemente este novo método de interpolação de Lagrange, que permite construir o polinômio $L_X(f)$ *sem* calcular os coeficientes! Este método retorna uma função g mais rápido do que o feito em sala? O cálculo de $g(x)$ com este método é mais rápido?

2 Métodos de integração via interpolação de Lagrange

Supomos agora que $X \subset [-1, 1]$, o intervalo-padrão para integrais.

Retomando a notação da questão anterior, se g é o PIL de f nos pontos de X (ou seja, $g = \sum g_j z^j = L_X(f)$), a integral de g no intervalo $[-1, 1]$ é

$$I_g = \sum g_j \frac{1 - (-1)^{1+j}}{1 + j}.$$

Como a integral é linear, a operação $I_X : \mathcal{F} \to \mathbf{R} : f \mapsto \int_{-1}^{1} \Big(L_X(f)\Big)(t)\, dt$ também é linear.

1. Mostre que $I_X(f)$ só depende de $\pi_X(f)$. (você pode fazer isso tanto explicitamente quanto usando a função ϕ_X)
2. Deduza que existem reais w_i tais que $I_X(f) = \sum w_i f(x_i)$.
3. Queremos calcular w_i, para descobrir uma nova regra de integração. Escreva a equação matricial que determina g_j a partir dos x_i e dos $f(x_i)$.
4. Escreva a integral I_g como o produto interno do vetor de coeficientes g_j com um vetor v. Ou seja, encontre v tal que $I_g = \langle (g_j), v \rangle$.
5. O vetor $g = (g_j)$ pode ser escrito como a solução de um sistema linear da forma $Mg = \pi_X(f)$. Demonstre que $I_g = \langle \pi_X(f), (M^{-1})^T v \rangle$.
6. Deduza que $w = (M^{-1})^T v$.
7. Escreva uma função `matrix_nodes(xs)` que cria a matriz M^T correspondente aos pontos X.
8. Escreva uma função `weight_nodes(xs)` que retorna o vetor de pesos w para integrar no intervalo $[-1, 1]$. Verifique que w corresponde aos pesos certos para os métodos do ponto médio, trapézio e Simpson.
9. Escreva uma função `rule_nodes(xs)` que retorna uma função $rule(f, a, b)$ para integrar f no intervalo $[a, b]$. Note que todas as contas serão feitas no intervalo-padrão $[-1, 1]$, e depois "normalizadas" de volta no intervalo $[a, b]$.
10. Aplique isso em métodos adaptativos (use o `improve` da Lista 7!) e veja quantas subdivisões são necessárias. Compare métodos de ordem 20 e 30 com Gauss-Legendre de 2 e 3 pontos. Observe também o número *total* de vezes que f é chamada, já que em cada intervalo isso é diferente segundo a regra empregada.
11. Enfim, veja (finalmente!) erros numéricos ao calcular integrais: Use estas regras de ordem alta de forma "iterada" e faça o gráfico do erro em função do número de intervalos.

3 Derivação

O mesmo que foi feito para integrais serve para encontrar aproximações de derivadas. Agora, vamos usar "eliminação de Taylor" para determinar os coeficientes da fórmula

$$f'(x) \sim \sum \alpha_i f(x_i).$$

1. Fixe um conjunto X como acima, no intervalo $[-1, 1]$, para aproximar a derivada em $x = 0$. Explique como modificar o método para calcular num ponto x qualquer.
2. Dados três pontos, até que ordem você garante ser possível cancelar a expansão de Taylor do lado direito da fórmula?
3. Idem, para n pontos. Existem conjuntos "melhores" de pontos? A simetria ajuda?
4. No caso de integrais, vimos que a soma dos pesos é igual ao comprimento do intervalo. Qual a regra aqui para a soma dos pesos? Explique.
5. Encontre um método para determinar os pesos dado um conjunto X qualquer, por analogia ao que foi feito acima.
6. Implemente um método `diff_weights_nodes(xs)` e depois `diff_rule_nodes(xs)`. Veja a ordem que eles obtém na prática (com gráficos).
7. Qual o limite de precisão numérica que você obtém (tanto aumentando o número de nós, quanto diminuindo intervalos)?