## UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

MCBM003-23 Aproximação Teórica e Numérica I (3º 2025) Prof. André Pierro de Camargo Data de entrega: até 02/11/2025

# Projeto 1: Um estudo sobre a convergência de splines cúbicos interpoladores

# 1 Orientações gerais

- A linguagem de programação utilizada na implementação dos métodos é de livre escolha.
- Peça ajuda ao professor sempre que necessário.
- Realize testes preliminares com cada método para identificar possíveis erros de implementação. Por exemplo: teste o método de eliminação de Gauss em sistemas de equações cuja solução seja previamente conhecida e veja se o resultado obtido é coerente.
- Discuta com o professor caso encontre resultados aparentemente sem sentido. Isso pode (ou não) ser um erro de implementação, ou mesmo um indicativo de que o método utilizado possui as suas limitações.

Cada grupo deverá entregar

- Um relatório **em pdf** contendo a resolução dos exercícios teóricos e **TUDO** o que foi solicitado nos exercícios práticos (leiam a descrição com bastante atenção).
- O arquivo contendo o código fonte utilizado nos exercícios práticos.

Enviar o material por e-mail para andre.camargo@ufabc.edu.br, especificando o número do grupo.

Observação: Na Seção 3 encontram-se alguns dos algoritmos que serão utilizados nos exercícios práticos.

## 1.1 Demais instruções (IMPORTANTE)

A implementação dos métodos deve ser feita **pelos interantes do grupo** e nunca por assistentes de Inteligência Artificial (AI). Para inibir o uso de IAs, os algoritmos devem ser implementados conforme os speudo códigos descritos na Seção 3, **SEMPRE QUE SOLICITADO**. **Lembrem-se**: você são os autores e, portanto, responsáveis pelos seus códigos. Dessa forma, **TUDO** o que for entregue será avaliado e **TUDO** o que constar no código/relatório que não foi visto em sala de aula (e que não constar nos algoritmos da Seção 3) e que não for devidamente explicado implicará em descontos na nota.

- O código fonte deverá ser entregue em formato legível que possa ser aberto por um editor de texto.
- A entrega do relatório em pdf é imprescindível. NÃO SERÂO ACEITOS trabalhos contendo apenas o código fonte, mas esse pode ser anexado ao relatório.
- Os exercícios são sequênciais, ou seja, a resolução do próximo depende da resolução do anterior. Dessa forma, a correção também será sequêncial. Dessa forma, para pontuar na Tarefa 3, por exemplo, é necessário ter pontuado nas Tarefas 1 e 2.
- Paralelo à entrega do trabalho, também poderá ser solicitado ao grupo explicações adicionais sobre a implementação dos métodos utilizados.

# 2 Splines cúbicos interpoladores

Dado um conjunto de dados observados  $\Delta : \{(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\},$  um Spline cúbico interpolador de  $\Delta$  é uma função  $S_{\Delta} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$  tal que

- $S_{\Delta}$  é duas vezes continuamente diferenciável.
- Para cada  $i = 0, 1, ..., n 1, S_{\Delta}$  coincide com um polinômio de grau menor ou igual a 3 no intervalo  $[x_i, i_{i+1}]$ .
- $S_{\Lambda}(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n.$

É possível mostrar (veja, por exemplo, Introduction to Numerical Analysis de Stoer. J., and Bulirsch, R.) que, dados números  $y_0''$  e  $y_n''$ , existe um único Spline cúbico interpolador de  $\Delta$  satisfazendo

$$S_{\Delta}(x_0)'' = y_0'' \in S_{\Delta}(x_n)'' = y_n''.$$

Existem inúmeras aplicações de splines, por exemplo, reconstrução de imagens e aproximação de funções. O foco desse projeto é fazer uma análise empírica da ordem de convergência dos splines cúbicos interpoladores quando os dados amostrais  $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$  vem de uma função suave  $f: [x_0, x_n] \to \mathbb{R}$ , isto é,

$$y_i = f(x_i), i = 0, 1, \dots, n.$$

### 2.1 Exercício 1: cálculo de splines cúbicos

O objetivo desse exercício é implementar a função spline cúbico, que recebe como dados de entrada os dados amostrais  $\Delta: \{(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$  e também o ponto x onde o spline  $S_{\Delta}$  será avaliado.

Para calcular  $S_{\Delta}(x)$ , utilizamos a expressão polinomial de  $S_{\Delta}(x)$  em cada um dos intervalos  $[x_i, x_{i+1}], i = 0, 1, \ldots, n-1$ . Defina

$$h_{i+1} := x_{i+1} - x_i, i = 0, 1, \dots, n-1.$$

Vale que  $S_{\Delta}(x) =$ 

$$\frac{M_i}{6h_{i+1}}(x_{i+1}-x)^3 + \frac{M_{i+1}}{6h_{i+1}}(x-x_i)^3 + A_i(x-x_i) + B_i, \quad \text{em } [x_i, x_{i+1}], \quad (1)$$

sendo  $M_i$ ,  $A_i$  e  $B_i$  constantes que dependem de  $\Delta$  e podem ser determinadas da seguinte forma:  $M_0, M_1, \ldots, M_n$  formam o vetor solução do seguinte sistema de equações

$$\begin{bmatrix}
2 & \lambda_0 & 0 & \dots & 0 \\
\mu_1 & 2 & \lambda_1 & \dots & 0 \\
0 & \mu_2 & 2 & \ddots & \vdots \\
\vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & & & \ddots & \ddots & \vdots \\
0 & \dots & \dots & \mu_n & 2
\end{bmatrix} \times \begin{bmatrix}
M_0 \\
M_1 \\
M_2 \\
\vdots \\
\vdots \\
M_{n-1} \\
M_n
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
d_0 \\
d_1 \\
d_2 \\
\vdots \\
\vdots \\
d_{n-1} \\
d_n
\end{bmatrix}, (2)$$

sendo  $\lambda_0 = 0, \ \mu_n = 0, \ d_0 = 2y_0'', \ d_n = 2y_n''$  e

$$\begin{cases} \mu_i = \frac{h_i}{h_i + h_{i+1}}, & \lambda_i = \frac{h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}, \\ d_i = \frac{6}{h_i + h_{i+1}} \left( \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right), \end{cases}$$

 $i=1,2,\ldots,n-1$ . As constantes  $A_i$  e  $B_i$  são calculadas a partir de  $M_0,M_1,\ldots,M_n$ :

$$\begin{cases}
B_i = y_i - \frac{M_i}{6} h_{i+1}^2 \\
A_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{M_{i+1} - M_i}{6} h_{i+1}, i = 0, 1, \dots, n-1.
\end{cases}$$
(3)

### 2.1.1 Tarefa 1

Considere o seguinte conjunto de dados:

i =	0	1	2	3	4	5	6	7
$x_i$	-0.9	-0.83	-0.6	-0.49	0	0.2	0.6	0.83
$y_i$	0.0	1	2.4	4.1	6	8.2	10.6	13.4

Tabela 1: Um conjunto de dados observados  $\Delta$ .

Para o conjunto de dados  $\Delta$  da Tabela 1, com  $y_0''=1$  e  $y_n''=-1,$ 

1. (0.5) Calcule a matriz T e o vetor de termos independentes v do sistema de equações (2). Exiba os valores calculados com **todas as casas decimais disponíveis**.

**Importante:** O conjunto de dados da Tabela 1 é apenas um conjunto de dados para teste (outros conjuntos de dados serão utilizados posteriormente). Dessa forma, os dados de entrada para o seu programa deverão ser dois vetores x e y genéricos (os que formam  $\Delta$ ) de mesmo tamanho, e também os números  $y_0''$  e  $y_n''$ .

2. (2.0) Ulizando os valores calculados no item anterior, resolva o sistema de equações resultante pelo método da Eliminação de Gauss. Implemente o método: use o pseudo-código da Seção 3. Exiba a matriz e o vetor de termos independentes após a etapa de triangularização (eliminação). Exiba as soluções obtidas com **TODAS** as casas decimais disponíveis.

Observação: o uso de solvers, isto é, métodos prontos resolver sistemas de equações, implicará em descontos na pontuação.

Para identificar possíveis erros de implementação, encontre abaixo as saídas esperadas para o programa para o seguinte conjunto de dados (também com  $y_0'' = 1$  e  $y_n' = -1$ )

i =	0	1	2	3	4	5	6	7
$x_i$	-0.9	-0.83	-0.6	-0.49	0	0.2	0.6	0.83
$y_i$	0.0	2	2.6	0.1	6	-5	3	1

Tabela 2: Conjunto de dados  $\Delta$  para teste

a. Matriz T e vetor v antes da etapa de eliminação

```
[6,] 0.0000000000 0.000000000 0.000000000 0.000000000 0.3333333333 2.0000000000 0.6666666667 0.0000000000
[1,]
    2.0000000
[2,] -519.2546584
[3,] -447.1053243
[4,] 347.6808905
[5,] -582.9636202
[6,] 750.0000000
[7,] -273.2919255
[8,]
   -2.0000000
b. Matriz T e vetor v após a etapa de eliminação
    Т
  [,1] [,2]
            [,3]
                   [,4]
                          [,5]
                                 [,6]
                                        [,7]
                                               [,8]
      [1,]
[2,]
       [3,]
      0
      [4,]
    0
[5,]
    0
      0\;\; 0.0000000000\;\; 0.0000000000\;\; 1.7049980728\;\; 0.2898550725\;\; 0.0000000000\;\; 0.00000000000
      0 0.000000000 0.000000000 0.000000000 1.9433322776 0.6666666667 0.0000000000
[6,]
[7,]
      [8,]
      [,1]
[1,]
    2.0000000
[2,] -519.4879917
[3,] -271.3961507
[4,] 376.2649965
[5,] -718.8806396
[6,] 890.5437834
[7,] -564.2481510
[8,]
   -2.0000000
c. solução do sistema
М
[1,]
    1.0000000
[2,] -171.0100091
[3,] -231.4799653
[4,] 406.5715296
[5,] -517.9887857
[6,] 566.7978840
[7,] -316.3992593
[8,]
   -1.0000000
```

3. (1.0) Utilizando os resultados obtidos no item anterior, calcule as constantes  $A_i$  e  $B_i$ , i = 0, 1, ..., n-1 definidas em (3).

Para identificar possíveis erros de implementação, encontre abaixo as saídas esperadas para o programa para o conjunto de dados da Tabela 2 (também com  $y_0''=1$  e  $y_n'=-1$ )

A 30.578212011 4.926710639 -34.424883467 87.546575408 -91.159555658 78.879809552 -20.785957112 B -8.166666667e-04 3.507738247e+00 3.066817930e+00 -1.616963738e+01 9.453258571e+00 -2.011461024e+01 5.789586802e+00

4. (2.0) Uma vez calculados os coeficientes M, A e B que aparecem em (1), temos condições de calcular o spline interpolador para um dado valor  $x^*$  da variável x, utilizando a fórmula (1). Para isso, precisamos saber quais dos coeficientes  $M_i$ s  $A_i$  e  $B_i$  devemos utilizar, isto é, devemos descobrir em qual intevalo dos intervalos  $[x_i, x_{i+1}], i = 0, 1, \ldots, n-1$ , está o ponto  $x^*$ . A forma mais simples de verificar isso é fazer um laço sobre i e ir verificando se

$$x_i < x^*, \tag{4}$$

parando o laço quando a condição (4) for falsa. Porém, observe que, no pior caso (por exemplo, quando  $x^* \in [x_{n-1}, x_n]$ ), será necessário percorrer todos os intervalos e isso é muito custoso computacionalmente quando n é grande, por exemplo  $n = 10^7$ ,  $n = 10^8$ , etc.

Para contornar esse problema, iremos utilizar um algoritmo de busca binária. Essencialmente, começamos com os índices  $i_0=0$  e  $I_0=n$ , que correspondem ao intervalo de busca  $[x_0,x_n]$ , e, a cada passo, descartamos (a grosso modo) metade dos índices comparando o valor  $x^*$  com o valor  $x_{\alpha_0}$ , sendo o índice  $\alpha_0$  mais ou menos na metade entre  $i_0$  e  $I_0$ , ou seja:

$$\alpha_0 = \frac{i_0 + I_0}{2},$$

arrendondado (sempre para cima, ou sempre para baixo).

Tome, por exemplo, os dados da Tabela 1 e suponha que  $x^* = -0.47$ . Nesse caso, temos  $i_0 = 0, I_0 = 7$  e  $\alpha_0 = 4$  (se decidirmoa arredondar para cima). Como  $x^* < x_4 = 0$ , sabemos, então, que  $x^*$  está no intervalo  $[x_0, x_4]$  e, assim, reduzimos o intervalo de busca inicial. Daí repetimos o processo definindo  $i_1 = 0, I_1 = 4$  e  $\alpha_1 = \frac{0+4}{2} = 2$ .

Comparando  $x^*$  com  $x_2=-0.6$ , temos que  $x^*\geq -0.6$ . Isso nos diz que  $x^*$  está no intervalo  $[x_2,x_4]$ . Repetindo o processo mais uma vez, fazemos  $i_2=2, I_2=4$  e  $\alpha_2=\frac{2+4}{2}=3$ . Como  $x^*>x_3=-0.49$ , temos, então, que  $x^*$  está no intervalo  $[x_3,x_4]$ . Logo, o índice "i" é i=3 e as constantes a ser utilizadas para avaliar  $S_{\Delta}(x)$  no ponto  $x^*$  são  $M_3,M_4,A_3$  e  $B_3$ .

Implemente o método de busca binária descrito na seção 3 e utilize-o para calcular o interpolador  $S_{\Delta}$ , com os dados dos da Tabela 1, nos pontos  $-0.9, -0.8, -0.7, \dots 0.7, 0.8$ .

Para identificar possíveis erros de implementação, encontre abaixo as saídas esperadas para o programa para  $x^* = -0.6, x^* = 0.25$  e  $x^* = 0.5$ 

```
x^* = -0.6
 i_j
    I_j
  1
S(-0.6) = 2.4
OBSERVAÇÃO IMPORTANTE: no R, os índices dos vetores começam com ''1'' ao invés de ''zero''.
Assim, no exemplo acima, em linguagens começando do índice ''zero'', as saídas para x^* = -0.6 são:
    I_j
7
  i_j
  0
1
  0
      3
x^* = 0.25
  i_j I_j
   1
   6
S(0.25) = 8.63723321
i_j I_j
   4
      8
```

### 2.1.2 Tarefa 2

Nessa tarefa, iremos usar pontos igualmente espaçados em [0,1], isto é: [a,b] = [0,1],

$$x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, n \quad h = \frac{b - a}{n}.$$
 (5)

Dada uma função contínua  $f:[0,1] \to \mathbb{R}$ , defina

$$y_i = f(x_i), i = 0, 1, \dots, n.$$
 (6)

O objetivo dessa tarefa e analisar o quão bem f(x) é aproximada pelo spline cúbico interpolador  $S_{\Delta}(x)$  com  $\Delta$  definido em (5) e (6) (para as nossas simulações, utilizaremos  $f(x) = \exp(x)$ ). Para  $f(x) = \exp(x)$ , n = 10 e  $y_0'' = y_n'' = 0$ ,

1. (0.5) Para m=13, calcule  $S_{\Delta}(x)$  nos pontos  $x=t_{j}^{*}$  definidos por

$$t_j^* = a + jh^*, \quad j = 0, 1, \dots, m, \quad h^* = \frac{b - a}{m}.$$

Para identificar possíveis erros de implementação, encontre abaixo as saídas esperadas para a função  $f(x) = \cos(x)$ 

- 2. (0.5) Calcule o erro máximo  $E_n$  entre f e  $S_{\Delta}$  nos pontos  $t_j^*$ :

$$E_n = \max_{0 \le j \le m} e_j, \quad e_j = |f(t_j^*) - S_{\Delta}(t_j^*)|$$

Para identificar possíveis erros de implementação, encontre abaixo as saídas esperadas para a função  $f(x) = \cos(x)$ 

# Tarefa 3

2.2

Pode-se verificar que a segunda derivadas do spline cúbico  $S''_{\Delta}(x)$  satisfaz  $S''_{\Delta}(x_0) = y''_0$  e  $S''_{\Delta}(x_n) = y''_n$ . É esperado, portanto, que  $S''_{\Delta}(x)$  aproxime melhor f quando  $y''_0 = f''(x_0)$  e  $y''_n = f''(x_n)$ .

1. (1.0) Calcule os erros  $E_n$  no item 2 da Tarefa 2 (com a mesma f) com m = 10117 fixado e  $n = 10, 20, 30, \ldots, 200$  em dois cenários:

```
caso 1 : y_0'' = y_n'' = 0;
caso 2 : y_0'' = f''(x_0) e y_n'' = f''(x_n).
```

Em qual caso o erro fica menor para valores grandes de n?

Para identificar possíveis erros de implementação, encontre abaixo as saídas esperadas para a função  $f(x) = \cos(x)$  e n = 10, 20, 30 e 40

```
# caso 1: y''_0 = y''_n = 0
n    1.000000e+01 2.000000e+01 3.000000e+01 4.000000e+01
E_n    4.915632e-04 1.227706e-04 5.455482e-05 3.068514e-05
# caso 2: y''_0 = f''(x_0) e    y''_n = f''(x_n)

n    1.000000e+01 2.000000e+01 3.000000e+01 4.000000e+01
E_n    6.551877e-07 4.093091e-08 8.084419e-09 2.557849e-09
```

#### 2.2.1 Tarefa 4

Sob algumas hipóteses sobre a função interpolada f, pode-se provar que existem constantes positivas K e  $\rho$  tais que, para n suficientemente grande, o erro  $E_n$  calculado na tarefa anterior se comporta como  $K\frac{1}{n^{\rho}}$ . As constantes K e  $\rho$  dependem apenas de f e de como são escohidos  $y_0''$  e  $y_n''$ . Em geral, o número

$$\rho$$
 (7)

é um número inteiro positivo e é chamado de a ordem de convergência. Para estimar a ordem de convergência  $\rho$ , escrevemos

$$E_n \approx K \frac{1}{n^{\rho}}$$

e aplicamos o logaritmo (natural) dos dois lados:

$$\log(E_n) \approx \log(K) - \rho \log(n). \tag{8}$$

1. (0.5) Calcule os valores

$$(\log(n_1), \log(E_{n_1})), (\log(n_2), \log(E_{n_2})), \dots, (\log(n_{20}), \log(E_{n_{20}}))$$
 (9)

utilizando os erros  $E_n$  calculados na Tarefas 3 para os casos 1 e 2  $(n_1 = 10, n_2 = 20, \dots n_{20} = 200)$ .

2.(2.0)

Observe que, se o erro  $E_n$  obedece aproximadamente (8), então os pontos calculados em (9) deverão estar próximos a uma reta com coeficiente angular próximo a  $-\rho$ . Verifique essa afirmação ajustando os dados calculados (9) nos casos 1 e 2 por duas retas pelo método dos mínimos quadrados discreto. Faça um gráfico exibindo os valores (9) e também as retas de mínimos quadrados, assim, como na Figura 1. Qual é a orden de convergência sugerida pelos ajustes de mínimos quadrados em cada caso?

A fim de validar o seu código, encontre na Figura 1 os valores obtidos aplicando o mesmo procedimento para a função  $f(x) = \cos(x)$ .

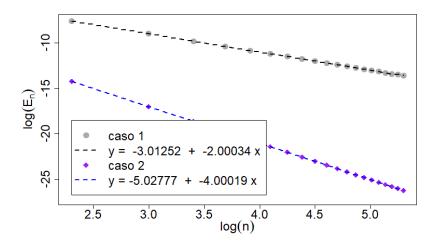


Figura 1: O erro  $\log(E_n)$  nos casos 1 e 2 e as suas aproximações de mínimos quadrados para  $f(x) = \cos(x)$ .

# 3 Algoritmos

Considere um sistema linear de m equações com m incógnitas dado na forma matricial por

$$A \times x = y,\tag{10}$$

sendo A a matriz (quadrada  $m \times m$ ) do sistema e  $y \in \mathbb{R}^m$  o vetor de termos independentes. A seguir são listados os algoritmos para resolver o sistema de equações (10). Nesses algoritmos, os índices da matriz e do vetor são representados por números de 1 até m. Para implementação em linguagens que utilizam outro tipo de indexação (a maioria das linguagens começa com o índice zero) será preciso fazer os ajustes necessários.

# 3.1 Método da eliminação de Gauss

Entrada: A, y, m = ordem da matriz A. Saída: O vetor x, solução do sistema (10).

### Parte 1: Escalonar (triangularizar o sistema)

Para j de 1 até m-1, faça

- Se  $A_{j,j} = 0$ , encontre k tal que  $A_{k,j} \neq 0$  e troque as linhas j e k da Matriz A. Se isso não for possível, então a matriz A é singular e convém exibir uma mensagem de erro.
- Para i de j+1 até m, faça // elimina todos os elementos de A da // coluna j que estão abaixo da diagonal
  - Defina  $\mu = -\frac{A_{i,j}}{A_{j,j}}$  // define o multiplo da linha j a ser somado à linha i da matriz A.
  - Para k de j até m, faça
    - \*  $A_{i,k} = A_{ik} + \mu A_{j,k} //$  faz a operação desejada entre as linhas // da matriz A.
  - $-y_i = y_i + \mu y_j$  // atualiza o vetor de termos independentes.

### Parte 2: Resolver o sistema triangular resultante

- Para i de m até 1, faça
  - $-x_i=y_i.$
  - Para j de i+1 até m faça

$$* x_i = x_i - A_{i,i} x_i.$$

 $-x_i = x_i/A_{i.i}.$ 

## 3.2 Algoritmo de busca binária

No nosso problema, dado um valor  $x^*$ , devemos encontrar a qual intervalo  $[x_i; x_{i+1}]$  o ponto  $x^*$  pertence, isto é devemos encontrar o índice i tal que

$$x_i \le x^* < x_{i+1}. \tag{11}$$

Dado um vetor ordenado  $X = (x_0, x_1, \dots x_n)$ , com  $x_0 < x_1 < \dots < x_n$  e um valor de  $x^*$  (supondo  $t_0 < x^* \le t_n$ ), o seguinte algoritmo retorna o índice i que satisfaz (11).

- Faça m=0; M=n;
- Enquanto |M-m| > 1, faça
  - -k = valor arredondado (inteiro) de (M+m)/2;
  - se  $x^{\ast}>x_{k},$  façam=ke M=M;
  - se  $x^* \leq x_k$ , faça m = m e M = k;
- retorne i = m.