Computação Científica I
Lista 2: Interpolação, integração, derivação: tudo é Álgebra Linear

Professor: Bernardo Costa
Monitores: Gabriela Lewenfuss, Rodrigo Lima e Vitor Luiz

05 de outubro de 2017

"Numerical linear algebra [...] is often a fundamental part of engineering and computational science problems, such as image and signal processing, telecommunication, computational finance, materials science simulations, structural biology, data mining, bioinformatics, fluid dynamics, and many other areas."
Wikipedia (June 20, 2017).

Esta lista apresenta uma abordagem unificada para três temas do curso: derivadas, integrais e interpolação polinomial. A abordagem mais natural vai "de trás pra frente", então começaremos com interpolação — que inclusive pode ser usada nos dois outros — e que também ajuda a fixar a notação.

Esta lista combina as duas componentes do curso: tanto a construção teórica dos métodos numéricos como a análise de seus resultados.

Calendário de entrega:

1. Interpolação. 16 de Outubro de 2017.
2. Integração. 23 de Outubro de 2017.
3. Derivação. 30 de Outubro de 2017.

1 Interpolação polinomial como aplicação linear

Seja f uma função qualquer de $\mathbf{R}$ em $\mathbf{R}$. O conjunto de todas as funções será denotado por $\mathcal{F}$, e o dos polinômios de grau d, por Pol_d. 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. Mostre que $\mathcal{F}$ e Pol_d são espaços vetoriais. Mostre ainda que Pol_d é um subespaço vetorial de $\mathcal{F}$.

2. 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.

3. 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.

4. 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.

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

6. 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 $\phi_X(e_i)$ para os vetores e_i da base canônica de $\mathbf{R}^4$, *sem* usar π_X: quais são as raízes do polinômio $\phi_X(e_i)$? Deduza a regra para um X qualquer.

7. Mostre que, para toda função $f \in \mathcal{F}$, o polinômio $L_X f$ é igual ao polinômio $\phi_X(\pi_X f)$. Explique porque isto dá uma forma explícita para a interpolação polinomial.

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 polinômio interpolador de f nos pontos de X (ou seja, $g(z) = \sum g_j z^j = \big(L_X(f)\big)(z)$) 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 será linear.

1. Escreva I_X como a composta de duas aplicações lineares. Depois, decomponha L_X como a composta de duas aplicações lineares.

2. Use a decomposição acima para mostrar que $I_X(f)$ só depende de $\pi_X(f)$.

3. Deduza que existem reais w_i tais que $I_X(f) = \sum w_i f(x_i)$.

4. 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 $f(x_i)$.

5. 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 $I_g = \langle (g_j), v \rangle$.

6. O vetor $g = (g_j)$ pode ser escrito como a solução de um sistema linear da forma $Mg = \pi_X(f)$. Demonstre que $I_g = \Big\langle \pi_X(f), (M^{-1})^T v \Big\rangle$.

7. Deduza que $w = (M^{-1})^T v$.

8. Escreva uma função `matrix_nodes(xs)` que cria a matriz M^T correspondente aos pontos X.

9. 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.

10. Escreva uma função `rule_nodes(xs)` que retorna uma função $rule(f, a, b)$ para integrar f no intervalo $[a, b]$. Faça as contas primeiro no intervalo-padrão $[-1, 1]$, e depois "normalize" de volta para o intervalo $[a, b]$.

11. Enfim, veja (finalmente!) erros numéricos ao calcular integrais: Use regras de ordem bem grande de forma "iterada", e faça o gráfico do erro em função do número de intervalos. Até quando aumentar a ordem acelera a convergência? (Integre pelo menos três funções "bem diferentes" para não analisar apenas um caso particular)

3 Derivação

O mesmo que foi feito para integrais serve para encontrar aproximações de derivadas. Em vez de considerar a aplicação linear de "integração no intervalo $[-1, 1]$", vamos considerar outra aplicação linear: "calcular a derivada em 0". Denotamos esta aplicação por $d_0(f) = f'(0)$.

1. Observe novamente que podemos construir uma aplicação linear D_X compondo L_X e d_0. Explique porque $d_0(f) \neq d_0(L_X f)$, em geral.

2. Conclua novamente que esta aplicação composta só depende de $\pi_X f$. Deduza que existe um vetor a de pesos tal que $D_X(f) = \langle a, \pi_X f \rangle$.

3. Encontre um método para determinar os pesos dado um conjunto X qualquer, por analogia ao que foi feito acima.

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. Mostre que os pesos são *divididos* por h ao realizarmos uma homotetia levando o intervalo-padrão em $[-h, h]$. Sugestão: considere $Y = h \cdot X$ os novos pontos, e a transformação $g(x) = f(h \cdot x)$. Note que f está definida em $[-h, h]$ e g em $[-1, 1]$. Relacione as derivadas de f e g em zero, e também os valores de f e g, e conclua.

6. O método D_X é exato para polinômios de grau $n - 1$. Qual deve ser a ordem de convergência deste método ao tomar pontos mais próximos num intervalo $[-h, h]$?

7. Implemente os métodos `diff_weights_nodes(xs)` e depois `diff_rule_nodes(xs)`. Veja a ordem que eles obtém na prática (com gráficos).

8. Qual o limite de precisão numérica que você obtém (tanto aumentando o número de nós, quanto diminuindo intervalos)?