Interpolação Baricêntrica e Métodos de Colocação

EP4 - CompIII - **Data de entrega: 21/12/2021**

1 Interpolação polinomial

Interpolação polinomial será estudada em breve no curso. É uma técnica de aproximação de funções que permite, entre outras coisas, aproximar derivadas e integrais. Dados $n+1$ pontos distintos x_i e $n+1$ valores f_i, $1 \leq i \leq n$, existe um único polinômio p_n de grau menor ou igual a n tal que $p_n(x_i) = f_i$. Este polinômio é chamado de polinômio interpolador da tabela (x_i, f_i). Quando estamos aproximando uma função, os números f_i são os valores da função nos pontos x_i.

Como os polinômios de grau menor ou igual a n formam um espaço vetorial de dimensão $n+1$, p_n pode ser representado de maneiras diferentes de acordo com a escolha de uma base para este espaço vetorial. A fórmula de Lagrange usa como base os ploinômios L_j, $0 \leq j \leq n$, definidos por

$$L_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{n} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}.$$

Note que, como $L_j(x_i)$ é igual a 0 se $j \neq i$ e igual a 1 se $j = i$, o polinômio interpolador pode ser escrito como

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f_j L_j(x).$$

Veremos a seguir que esta fórmula pode ser reescrita em uma forma muito conveniente para usos computacionais.

2 A fórmula baricêntrica

Para $x \neq x_i$, $0 \leq i \leq n$, o numerador de L_j pode ser escrito como o quociente da função

$$L(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

por $x - x_j$. Logo, o polinômio interpolador pode ser escrito na forma

$$p_n(x) = L(x) \sum_{j=0}^{n} \frac{\omega_j}{x - x_j} f_j$$

onde os *pesos baricêntricos* são definidos como

$$\omega_j = \frac{1}{\prod_{k\neq j}(x_j - x_k)}.$$

Se usarmos o fato que

$$1 = \sum_{j=0}^{n} L_j(x) = L(x)\sum_{j=0}^{n} \frac{\omega_j}{x - x_j} \quad \text{(por quê?)},$$

obtemos a fórmula baricêntrica para o polinômio interpolador:

$$p_n(x) = \frac{\sum_{j=0}^{n} \frac{\omega_j}{x-x_j} f_j}{\sum_{j=0}^{n} \frac{\omega_j}{x-x_j}} \tag{1}$$

O cálculo dos pesos baricêntricos (que não dependem de x) envolve $O(n^2)$ operações aritméticas. Após isso, são necessárias $O(n)$ operações para se calcular o valor de p_n em um ponto x. Se quisermos incluir um nó adicional x_{n+1}, os novos pesos podem ser calculados a partir dos conhecidos com $O(n)$ operações aritméticas. Estas quantidades de operações são comparáveis às respectivas quantidades de operações quando se usa a forma de Newton para o polinômio interpolador.

A fórmula (1) tem algumas propriedades notáveis. O cálculo dos coeficientes ω_j não usa os dados f_j. Portanto, uma vez calculados estes coeficientes, podemos interpolar qualquer outra função usando os mesmos nós com $O(n)$ operações. Além disso, a fórmula baricêntrica não depende da ordem na qual os nós são arranjados. Isto não vale para a forma de Newton, para a qual a ordem dos nós pode gerar instabilidades numéricas.

Observe que em (1) os pesos ω_j aparecem no numerador e no denominador, e portanto fatores comuns a todos os pesos podem ser cancelados sem alterar o valor de p_n. Esta propriedade é útil por exemplo quando já temos os pesos calculados para nós em um intervalo $[a, b]$, e desejamos interpolar em nós linearmente transportados para um intervalo $[c, d]$ (mudança de variável). Neste caso, podemos usar os mesmos pesos.

Finalmente, para alguns conjuntos específicos de nós, há fórmulas explícitas para os pesos ω_j. Nestes casos, não é necessário o seu cálculo e a interpolação pode ser feita com apenas $O(n)$ operações aritméticas. Dois casos relevantes são exemplificados abaixo:

a) Pontos equidistantes no intervalo $[-1, 1]$ com espaçamento $h = 2/n$. Os pesos são dados por $\omega_j = (-1)^{n-j}\binom{n}{j}/(h^n n!)$. Cancelando-se os fatores independentes de j, pode-se usar $\omega_j = (-1)^j\binom{n}{j}$. Os mesmos pesos são usados em qualquer intervalo $[a, b]$ para pontos equidistantes com espaçamento $h = (b - a)/n$.

b) Pontos de Chebyshev de segunda espécie. Estes pontos são definidos no intervalo $[-1, 1]$ por

$$x_j = -\cos\left(\frac{j\pi}{n}\right), \quad j = 0, \ldots, n$$

e possibilitam boas aproximações por interpolação em $[-1, 1]$. Neste caso temos

$$\omega_0 = 0.5, \quad \omega_j = (-1)^j,\ 1 \le j \le n-1 \quad \text{e} \quad \omega_n = (-1)^n 0.5 \tag{2}$$

Estes pontos transladados linearmente para um intervalo $[a, b]$ são muito bons para a aproximação de funções por interpolação neste intervalo, e os pesos dados acima podem ser usados.

No caso de pontos equidistantes, os pesos alternam sinais e as ordens de grandeza variam muito para n grande. O polinômio interpolador pode oscilar muito com amplitudes grandes, e em geral não se pode garantir que o polinômio interpolador de uma função, em pontos equidistantes, convirja para ela quando n tende a infinito. Com os pontos de Chebyshev estas dificuldades não ocorrem, e para funções suficientemente diferenciáveis a convergência é rápida.

3 Problemas de contorno e métodos de colocação

Problemas de contorno modelam vários fenômenos em física e engenharia tais como elasticidade, mecânica dos fluidos, distribuições estacionárias de temperatura, eletrostática, etc. Em alguns casos, métodos de colocação propiciam uma ferramenta poderosa para tratar problemas lineares com coeficientes varáveis e problemas não lineares.

A técnica será ilustrada aplicando-se um método de colocação à resolução numérica do problema de contorno linear

$$\begin{aligned} -u''(x) + q(x)u(x) = f(x), \quad a < x < b, \\ u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta \end{aligned} \tag{3}$$

onde q e f são funções com derivadas contínuas de qualquer ordem no intervalo $[a, b]$ (i.e. $q, f \in C^\infty([a, b])$) e $q(x) \ge 0$, $\forall x \in [a, b]$. Estas hipóteses garantem a existência de uma única solução $u \in C^\infty([a, b])$ para o problema de contorno acima.

Nos métodos de colocação, escolhem-se espaços vetoriais m-dimensionais V de funções definidas em $[a, b]$ satisfazendo as condições de contorno, e m *pontos de colocação* $x_1, \dots, x_m$ em (a, b). Procura-se então aproximar u por uma função $y \in V$ exigindo que ela satisfaça a equação diferencial nos pontos de colocação:

$$-y''(x_i) + q(x_i)y(x_i) = f(x_i), \quad 1 \le i \le m.$$

Uma escolha adequada de espaços V, bases de V e pontos de colocação podem gerar bons métodos de aproximação.

Vamos descrever agora o caso de métodos de colocação para (3) usando polinômios. Para isso, considere uma partição

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$$

do intervalo $[a, b]$. Os pontos de colocação serão os pontos $x_1, \dots, x_{n-1}$. Aproximaremos u com o método de colocação por um polinômio y de grau menor ou igual a n. Sendo y um polinômio de grau menor ou igual a n, podemos representá-lo como

$$y(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j L_j(x)$$

onde y_j são os valores de y em x_j.

Impondo-se as condições de contorno a y, obtemos $y_0 = \alpha$ e $y_n = \beta$. Os valores $y_1, \ldots, y_{n-1}$ são incógnitas a serem determinadas exigindo-se que y satisfaça a equação diferencial nos pontos de colocação. Usando a representação acima para y obtemos

$$-\sum_{j=1}^{n-1} L_j''(x_i)y_j + q(x_i)y_i = f(x_i) + L_0''(x_i)\alpha + L_n''(x_i)\beta,\ i = 1, \ldots, n-1,$$

que é um sistema linear para as incógnitas $y_1, \ldots, y_{n-1}$.

Os termos que aparecem na expressão acima podem ser calculados usando-se os pesos baricêntricos. Verifique como exercício que

$$L_j''(x_i) = -2\frac{\omega_j/\omega_i}{x_i - x_j}\left[\sum_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{\omega_k/\omega_i}{x_i - x_k} - \frac{1}{x_i - x_j}\right], \quad \begin{array}{l} 0 \le j \le n \\ 1 \le i \le n-1, \\ j \neq i \end{array} \tag{4}$$

e que

$$L_i''(x_i) = -\sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} L_j''(x_i), \quad 1 \le i \le n-1. \tag{5}$$

Uma vez resolvido o sistema linear, a fórmula baricêntrica pode ser usada para calcular $y(x)$ em qualquer ponto $x \neq x_i$ no intervalo $[a, b]$.

Devido às boas propriedades de aproximação, os pontos de Chebyshev de segunda espécies transladados para o intervalo $[a, b]$

$$x_j = -\frac{b-a}{2}\cos\left(\frac{j\pi}{n}\right) + \frac{a+b}{2}, \quad 0 \le j \le n \tag{6}$$

são bons candidatos para o método de colocação. Note que os mesmos pesos baricêntricos para o intervalo $[-1, 1]$ podem ser usados, pois no cálculo dos parâmetros do sistema linear aparecem razões entre eles, cancelando fatores decorrentes da mudança de variável.

4 Tarefa

Escreva um programa em Python para calcular aproximações da solução do problema (3) pelo método de colocação descrito acima usando os pontos (6). O sistema linear é construído usando-se as fórmulas (4) e (5) com os pesos baricêntricos definidos em (2). O programa deve permitir calcular também valores da aproximação em pontos $x \neq x_j$ usando a fórmula baricêntrica. O sistema linear pode ser resolvido usando-se *numpy.linalg.solve* ou *scipy.linalg.solve*.

Teste o seu programa com os exemplos

$$-u'' + \frac{6x^2}{(1+x^2)^2}u = \frac{2}{(1+x^2)^3}, \quad u(-5) = \frac{1}{26} = u(5)$$

cuja solução exata é $u(x) = 1/(1+x^2)$ e

$$-u'' + 10000u = 0, \quad u(0) = 0,\ u(1) = 1$$

cuja solução exata é $u(x) = \sinh(100x)/\sinh(100)$. Use $n=$ 16, 32, 64 e 128, e para cada caso calcule, usando a fórmula baricêntrica, os valores das aproximações nos pontos $t_k = a + (k - 0.5)(b - a)/1000$, $1 \leq k \leq 1000$ e calcule os erros $\max_{1\leq k\leq 1000} |u(t_k) - y(t_k)|$. Imprima os erros e também imprima a, b, α, β e n.

5 Referência

Jean-Paul Berrut, Lloyd N. Trefethen, *Barycentric Lagrange Interpolation*, SIAM Review 46(3) (2004), pp. 501–517