

# 1 Derivação Numérica

Dado um conjunto de pontos  $(x_i, y_i)_{i=1}^n$ , a derivada  $(\frac{dy}{dx})_i$  pode ser calculada de várias formas. Na próxima seção trabalharemos com diferenças finitas, que é mais adequada quando as abscissas estão próximas e os dados não sofrem perturbações significativas. Na seção subsequente trataremos os casos quando os dados oscilam via ajuste ou interpolações de curvas.

## 1.1 Aproximação da derivada por diferenças finitas

A derivada  $f'(x_0)$  de uma função  $f(x)$  no ponto  $x_0$  é

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Da definição, se  $h \neq 0$  é pequeno (não muito pequeno para evitar o cancelamento catastrófico), é esperado que uma aproximação para a derivada no ponto  $x_0$  seja dada por

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Observe que se  $h$  for exatamente a distância entre  $x_0$  e  $x_1$ , então  $x_0 + h = x_1$  e

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} = \frac{y_1 - y_0}{h}.$$

**Exemplo 1.** Calcule a derivada numérica da função  $f(x) = \cos(x)$  no ponto  $x = 1$  usando  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$ ,  $h = 0.001$  e  $h = 0.0001$ .

A tabela abaixo mostra a derivada numérica para cada valor de  $h$ .

$h$	$f(1 + h)$	$\frac{f(1 + h) - f(1)}{h}$
0.1	$f(1.1) = \cos(1.1) = 0.4535961$	$\frac{0.4535961 - 0.5403023}{0.1} = -0.8670618$
0.01	$f(1.01) = \cos(1.01) = 0.4535961$	$\frac{0.5318607 - 0.5403023}{0.01} = -0.8441584$
0.001	$f(1.001) = \cos(1.001) = 0.4535961$	$\frac{0.5403023 - 0.5403023}{0.001} = -0.841741$
0.0001	$f(1.0001) = \cos(1.0001) = 0.4535961$	$\frac{0.5403023 - 0.5403023}{0.0001} = -0.841498$

Observe que quanto menor  $h$ , melhor é a aproximação, visto que o valor exato para a derivada é  $f'(1) = -\sin(1) = -0.8414710$ . Porém, quando  $h = 10^{-13}$ , a derivada numérica é  $-0.8404388$ , resultado pior que aquele para  $h = 0.0001$  (usando aritmética de computador no scilab). Além disso, quando  $h = 10^{-16}$ , a derivada numérica calculada no scilab é zero (cancelamento catastrófico). Isso nos motiva a pensar qual é o melhor  $h$ .

Essa aproximação para a derivada é denominada diferenças progressivas. A derivada numérica também pode ser aproximada usando definições equivalentes:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$$

que é denominada diferenças regressivas ou

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

que é denominada diferenças centrais.

**Exemplo 2.** Calcule a derivada numérica da função  $f(x) = \cos(x)$  no ponto  $x = 1$  usando diferenças progressivas, diferenças regressivas e diferenças centrais com  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$  e  $h = 0.001$ .

A tabela abaixo mostra a derivada numérica para cada valor de  $h$ .

$h$	diferenças progressivas	diferenças regressivas	diferenças centrais
0.1	-0.8670618	$\frac{\cos(1) - \cos(0.9)}{0.1} = -0.8130766$	$\frac{\cos(1.1) - \cos(0.9)}{0.2} = -0.8412007$
0.01	-0.8441584	$\frac{\cos(1) - \cos(0.99)}{0.01} = -0.8387555$	$\frac{\cos(1.01) - \cos(0.99)}{0.02} = -0.8414570$
0.001	-0.841741	$\frac{\cos(1) - \cos(0.999)}{0.001} = -0.8412007$	$\frac{\cos(1.001) - \cos(0.999)}{0.002} = -0.8414708$

## 1.2 Erros de truncamento

Seja  $D_{+,h}f(x_0)$  a aproximação da derivada de  $f$  em  $x_0$  por diferenças progressivas,  $D_{-,h}f(x_0)$  a aproximação por diferenças regressivas e  $D_{0,h}f(x_0)$  a aproximação por diferenças centrais, então

$$\begin{aligned}
D_{+,h}f(x_0) - f'(x_0) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \\
&= \frac{f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \\
&= \frac{h}{2}f''(x_0) + O(h^2) = O(h).
\end{aligned}$$

Analogamente,

$$\begin{aligned}
D_{-,h}f(x_0) - f'(x_0) &= \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} - f'(x_0) \\
&= \frac{f(x_0) - \left(f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3)\right)}{h} - f'(x_0) \\
&= -\frac{h}{2}f''(x_0) + O(h^2) = O(h).
\end{aligned}$$

Também,

$$\begin{aligned}
D_{0,h}f(x_0) - f'(x_0) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - f'(x_0) \\
&= \frac{f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3) - \left(f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3)\right)}{2h} - f'(x_0) \\
&= O(h^2).
\end{aligned}$$

**Exemplo 3.** Calcule a derivada numérica e o erro de truncamento de  $f(x) = e^{-x}$  em  $x = 1.5$  pela fórmula de diferença progressiva para  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$  e  $h = 0.001$ .

Como  $|f''(x)| = |e^{-x}| < 1$ , então  $|f'_+(x_0) - f'(x_0)| < \frac{h}{2}$ .

$h$	diferenças progressivas	erro = $\frac{h}{2}$
0.1	-0.2123364	0.05
0.01	-0.2220182	0.005
0.001	-0.2230186	0.0005

O valor exato da derivada é  $f'(1.5) = -0.2231302$ .

### 1.3 Erros de arredondamento

Para entender como os erros de arredondamento se propagam ao calcular as derivadas numéricas vamos considerar o operador de diferenças finitas progressivas

$$D_{+,h}f(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Nesse contexto temos o valor exato  $f'(x)$  para a derivada, a sua aproximação numérica  $D_{+,h}f(x)$  e a representação em número de máquina do operador  $D_{+,h}f(x)$  que denotaremos por  $\overline{D_{+,h}f(x)}$ . Seja  $\varepsilon(x, h)$  o erro de arredondamento ao calcularmos a derivada e consideremos

$$\overline{D_{+,h}f(x)} = D_{+,h}f(x)(1 + \varepsilon(x, h)) = \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h}(1 + \varepsilon(x, h)).$$

Também, consideremos

$$|\overline{f(x+h)} - f(x+h)| = \delta(x, h) \leq \delta$$

e

$$|\overline{f(x)} - f(x)| = \delta(x, 0) \leq \delta,$$

onde  $\overline{f(x+h)}$  e  $\overline{f(x)}$  são as representação em ponto flutuante dos números  $f(x+h)$  e  $f(x)$ , respectivamente. A diferença do valor da derivada e sua aproximação representada em ponto flutuante pode ser estimada da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left| f'(x) - \overline{D_{+,h}f(x)} \right| &= \left| f'(x) - \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h}(1 + \varepsilon(x, h)) \right| \\ &= \left| f'(x) - \left( \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h} + \frac{f(x+h) - f(x+h)}{h} + \frac{f(x) - f(x)}{h} \right) (1 + \varepsilon) \right| \\ &= \left| f'(x) + \left( -\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\overline{f(x+h)} - f(x+h)}{h} + \frac{\overline{f(x)} - f(x)}{h} \right) (1 + \varepsilon) \right| \\ &\leq \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| + \left( \left| \frac{\overline{f(x+h)} - f(x+h)}{h} \right| + \left| \frac{\overline{f(x)} - f(x)}{h} \right| \right) |1 + \varepsilon| \\ &\quad + \left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| \varepsilon \\ &\leq Mh + \left( \left| \frac{\delta}{h} \right| + \left| \frac{\delta}{h} \right| \right) |1 + \varepsilon| + |f'(x)|\varepsilon \\ &\leq Mh + \left( \frac{2\delta}{h} \right) |1 + \varepsilon| + |f'(x)|\varepsilon \end{aligned}$$

onde

$$M = \frac{1}{2} \max_{x \leq y \leq x+h} |f''(y)|$$

está relacionado com o erro de truncamento.

Esta estimativa mostra que se o valor de  $h$  for muito pequeno o erro ao calcular a aproximação numérica cresce. Isso nos motiva a procurar o valor ótimo de  $h$  que minimiza o erro.

**Exemplo 4.** Estude o comportamento da derivada de  $f(x) = e^{-x^2}$  no ponto  $x = 1.5$  quando  $h$  fica pequeno.

Segue a tabela com os valores da derivada para vários valores de  $h$ .

$h$	$10^{-2}$	$10^{-4}$	$10^{-6}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$	$10^{-9}$
$D_{+,h}f(1.5)$	-0.3125246	-0.3161608	-0.3161973	-0.3161976	-0.3161977	-0.3161977

$h$	$10^{-10}$	$10^{-11}$	$10^{-12}$	$10^{-13}$	$10^{-14}$	$10^{-15}$
$D_{+,h}f(1.5)$	-0.3161976	-0.3161971	-0.3162332	-0.3158585	-0.3178013	-0.3747003

Observe que o valor exato é  $-0.3161977$  e o  $h$  ótimo é algo entre  $10^{-8}$  e  $10^{-9}$ .

## 1.4 Fórmula de três e cinco pontos para a derivada primeira

Para aproximar a derivada de uma função  $f(x)$  em  $x_0$ ,  $x_1$  ou  $x_2$  usaremos os três pontos vizinhos  $(x_0, f(x_0))$ ,  $(x_1, f(x_1))$  e  $(x_2, f(x_2))$ . Uma interpolação usando polinômios de Lagrange para esses três pontos é da forma:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\ &+ \frac{f'''(\xi(x))}{6} (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2). \end{aligned}$$

A derivada de  $f(x)$  é

$$\begin{aligned} f'(x) &= f(x_0) \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\ &+ \frac{f'''(\xi(x))}{6} ((x-x_1)(x-x_2) + (x-x_0)(2x-x_1-x_2)) \\ &+ D_x \left( \frac{f'''(\xi(x))}{6} \right) (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2). \end{aligned} \tag{1}$$

Trocando  $x$  por  $x_0$ , temos

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= f(x_0) \frac{2x_0-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{2x_0-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{2x_0-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\ &+ \frac{f'''(\xi(x_0))}{6} ((x_0-x_1)(x_0-x_2) + (x_0-x_0)(2x_0-x_1-x_2)) \\ &+ D_x \left( \frac{f'''(\xi(x_0))}{6} \right) (x_0-x_0)(x_0-x_1)(x_0-x_2). \end{aligned}$$

Considerando uma malha equiespaçada onde  $x_1 = x_0 + h$  e  $x_2 = x_0 + 2h$ , temos:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= f(x_0) \frac{-3h}{(-h)(-2h)} + f(x_1) \frac{-2h}{(h)(-h)} + f(x_2) \frac{-h}{(2h)(h)} + \frac{f'''(\xi(x_0))}{6} ((-h)(-2h)) \\ &= \frac{1}{h} \left[ -\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2}f(x_2) \right] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \end{aligned}$$

Similarmente, trocando  $x$  por  $x_1$  ou trocando  $x$  por  $x_2$  na expressão (1), temos outras duas expressões

$$\begin{aligned}f'(x_1) &= \frac{1}{h} \left[ -\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_2) \right] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_1))}{6} \\f'(x_2) &= \frac{1}{h} \left[ \frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2}f(x_2) \right] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_2))}{3}\end{aligned}$$

Podemos reescrever as três fórmulas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}f'(x_0) &= \frac{1}{h} \left[ -\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2}f(x_0 + 2h) \right] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \\f'(x_0 + h) &= \frac{1}{h} \left[ -\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_0 + 2h) \right] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0 + h))}{6} \\f'(x_0 + 2h) &= \frac{1}{h} \left[ \frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_0 + h) + \frac{3}{2}f(x_0 + 2h) \right] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0 + 2h))}{3}\end{aligned}$$

ou ainda

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \quad (2)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0))}{6} \quad (3)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)] + h^2 \frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \quad (4)$$

Observe que uma das fórmulas é exatamente as diferenças centrais obtida anteriormente.

Analogamente, para construir as fórmulas de cinco pontos tomamos o polinômio de Lagrange para cinco pontos e chegamos a cinco fórmulas, sendo uma delas a seguinte:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi(x_0)) \quad (5)$$

**Exemplo 5.** Calcule a derivada numérica de  $f(x) = e^{-x^2}$  em  $x = 1.5$  pela fórmula de três e cinco pontos para  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$  e  $h = 0.001$ .

A tabela mostra os resultados:

$h$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$
diferenças progressivas	-0.2809448	-0.3125246	-0.3158289
diferenças regressivas	-0.3545920	-0.3199024	-0.3165667
três pontos usando (2)	-0.3127746	-0.3161657	-0.3161974
três pontos usando (3)	-0.3177684	-0.3162135	-0.3161978
três pontos usando (4)	-0.3135824	-0.3161665	-0.3161974
cinco pontos usando (5)	-0.3162384	-0.316197677	-0.3161976736860

O valor exato da derivada é  $f'(1.5) = -0.3161976736856$ .

## 1.5 Aproximação para a derivada segunda por diferenças centrais

Para aproximar a derivada segunda, considere as expansões em série de Taylor

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + O(h^4)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + O(h^4).$$

Somando as duas expressões, temos:

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + h^2f''(x_0) + O(h^4)$$

ou seja, uma aproximação de segunda ordem para a derivada segunda em  $x_0$  é

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + O(h^2) := D_{0,h}^2 f(x_0) + O(h^2),$$

onde

$$D_{0,h}^2 f(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}.$$

**Exemplo 6.** Calcule a derivada segunda numérica de  $f(x) = e^{-x^2}$  em  $x = 1.5$  para  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$  e  $h = 0.001$ .

A tabela mostra os resultados:

$h$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$
$D_{0,h}^2 f(1.5)$	0.7364712	0.7377814	0.7377944

Observe que  $f''(x) = (4x^2 - 2)e^{-x^2}$  e  $f''(1.5) = 0.7377946$ .

## 1.6 Problemas de valor contorno

Nesta seção usaremos a aproximação numérica da derivada para resolver problemas de valor de contorno da forma

$$\begin{cases} -u_{xx} = f(x, u), & a < x < b. \\ u(a) = u_a \\ u(b) = u_b \end{cases}$$

Resolver numericamente o problema acima exige uma discretização do domínio  $[a, b]$ , ou seja, dividir o domínio em  $N$  partes iguais, definindo

$$h = \frac{b - a}{N}$$

O conjunto de abcissas  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N + 1$  formam uma malha para o problema discreto. Nosso objetivo é encontrar as ordenadas  $u_i = u(x_i)$  que satisfazem a versão discreta:

$$\begin{cases} -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = f(x_i, u_i), & 2 \leq i \leq N. \\ u_1 = u_a \\ u_{N+1} = u_b \end{cases}$$

O vetor solução  $(u_i)_{i=1}^{N+1}$  do problema é solução do sistema acima, que é linear se  $f$  for linear em  $u$  e não linear caso contrário.

**Exemplo 7.** Encontre uma solução numérica para o problema de contorno

$$\begin{cases} -u_{xx} + u = e^{-x}, & 0 < x < 1. \\ u(0) = 1 \\ u(1) = 2 \end{cases}$$

Observe que

$$h = \frac{1}{N}$$

e a versão discreta da equação é

$$\begin{cases} -\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{h^2} + u_i = e^{-x_i}, & 2 \leq i \leq N. \\ u_1 = 1 \\ u_{N+1} = 2 \end{cases}$$

ou seja,

$$\begin{cases} u_1 = 1 \\ -u_{i+1} + (2 + h^2)u_i - u_{i-1} = h^2 e^{-x_i}, & 2 \leq i \leq N. \\ u_{N+1} = 2 \end{cases}$$

que é um sistema linear. A sua forma matricial é:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2+h^2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2+h^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_N \\ u_{N+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ h^2 e^{-x_2} \\ h^2 e^{-x_3} \\ \vdots \\ h^2 e^{-x_N} \\ 2 \end{bmatrix}$$

Para  $N = 10$ , temos a seguinte solução:

$$\begin{bmatrix} 1. \\ 1.0735083 \\ 1.1487032 \\ 1.2271979 \\ 1.3105564 \\ 1.4003172 \\ 1.4980159 \\ 1.6052067 \\ 1.7234836 \\ 1.8545022 \\ 2 \end{bmatrix}$$

## 1.7 Derivada via ajuste ou interpolação

Dado os valores de uma função em pontos  $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ , as derivadas  $(\frac{dy}{dx})_i$  podem ser obtidas através da derivada de uma curva que melhor ajusta ou interpola os pontos. Esse tipo de técnica é necessário quando os pontos são muito espaçados entre si ou quando a função oscila muito. Por exemplo, dado os pontos  $(0, 1)$ ,  $(1, 2)$ ,  $(2, 5)$ ,  $(3, 9)$ , a parábola que melhor ajusta os pontos é

$$Q(x) = 0.95 + 0.45x + 0.75x^2.$$

Usando esse ajuste para calcular as derivadas, temos

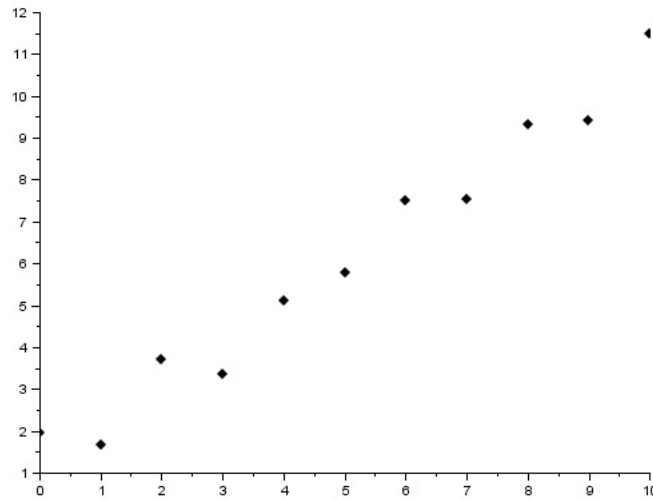
$$Q'(x) = 0.45 + 1.5x$$

e

$$\begin{aligned} y'(x_1) &\approx Q'(x_1) = 0.45, & y'(x_2) &\approx Q'(x_2) = 1.95, \\ y'(x_3) &\approx Q'(x_3) = 3.45 & \text{e} & y'(x_4) &\approx Q'(x_4) = 4.95 \end{aligned}$$

Agora olhe o gráfico da seguinte tabela de pontos.

$x$	$y$
0.	1.95
1	1.67
2	3.71
3	3.37
4	5.12
5	5.79
6	7.50
7	7.55
8	9.33
9	9.41
10	11.48



Observe que as derivadas calculadas por diferenças finitas oscilam entre um valor pequeno e um grande em cada intervalo e além disso, a fórmula regressiva difere da regressiva significativamente. Por exemplo, por diferenças regressivas  $f'(7) \approx \frac{(7.55-7.50)}{1} = 0.05$  e por diferenças progressivas  $f'(7) \approx \frac{(9.33-7.55)}{1} = 1.78$ . A melhor forma de calcular a derivada aqui é fazer um ajuste de curva. A reta que melhor ajusta os dados da tabela é  $y = f(x) = 1.2522727 + 0.9655455x$ . Usando esse ajuste, temos  $f'(7) \approx 0.9655455$ .

## 2 Integração

### 2.1 Introdução

Considere o problema de calcular a área entre uma função positiva, o eixo  $x$  e as retas  $x = a$  e  $x = b$ . O valor exato dessa área é calculada fazendo uma aproximação por retângulos com bases iguais e depois tomando o limite quando o número de retângulos tende ao infinito:

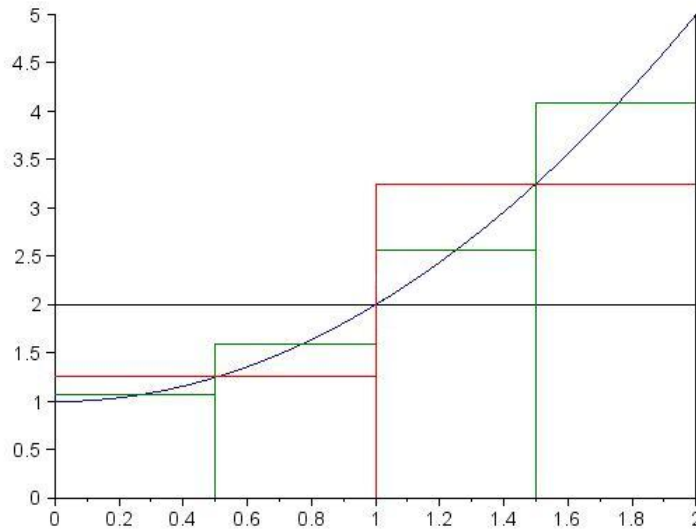
$$A = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(x_i) h_n,$$



onde  $h_n = \frac{b-a}{n}$  é o tamanho da base dos retângulo e  $f(x_i)$ ,  $1 \leq i \leq n$ ,  $a + (i-1)h \leq x_i \leq a + ih$ , é a altura dos retângulos. Essa definição é generalizada para cálculo de integrais num intervalo  $[a, b]$ :

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(x_i)h_n.$$

A figura abaixo mostra um exemplo quando  $f(x) = x^2 + 1$ ,  $0 \leq x \leq 2$ . Temos a aproximação por um retângulo com base  $h_1 = 2$ , depois com dois retângulos de base  $h_2 = 1$  e, finalmente com quatro retângulo de bases  $h_3 = 0.5$ .



Os valores aproximados para a integral são dados na tabela:

	$h_1 = 2$	$h_2 = 1$	$h_3 = 0.5$	$h_4 = 0.25$
$\int_0^2 (x^2 + 1)dx$	$h_1 f(1) = 4$	$h_2 f(0.5) + h_2 f(1.5) = 4.5$	4.625	4.65625

Observe que

$$\int_0^2 (x^2 + 1)dx = \left[ \frac{x^3}{3} + x \right]_0^2 = \frac{8}{3} + 2 = 4.6666667$$

## 2.2 Regras de Integração Numérica

A integral de uma função num intervalo  $[a, b]$ , também chamada de quadratura numérica, é aproximada pela soma

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n a_i f(x_i),$$

onde  $x_i$ ,  $1 \leq i \leq n$ , são pontos distintos do intervalo  $[a, b]$ . Nessa definição, a integral  $\int_0^2 (x^2 + 1)dx$  (dada na seção 2.1) usando uma aproximação por retângulo usa apenas um ponto, o ponto médio do intervalo ( $x_1 = 1$ ), e a soma se reduz a uma parcela  $((2-0)f(1))$ . A fórmula geral para esse caso, chamado de regra do ponto médio é:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) := hf(x_1). \quad (6)$$

A forma natural de obter as regras de integração é usar o polinômio de Lagrange que passa pelo pontos  $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^n$

$$f(x) = P_n(x) + \text{termo de erro} = \sum_{i=1}^n f(x_i)L_i(x) + \prod_{i=1}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}.$$

e integramos

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n \left[ f(x_i) \int_a^b L_i(x)dx \right] + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{i=1}^n (x - x_i) f^{(n+1)}(\xi(x))dx.$$

A fórmula de quadratura então é

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n a_i f(x_i),$$

onde

$$a_i = \int_a^b L_i(x)dx$$

### 2.2.1 Regra do ponto médio

A regra do ponto médio (6) pode ser deduzida mais formalmente usando a expansão de Taylor

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(\xi(x))}{2}(x - x_1)^2$$

que leva a integral

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b f(x_1)dx + f'(x_1) \int_a^b (x - x_1)dx + \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2}(x - x_1)^2dx.$$

Usando o teorema do valor médio para integrais e que  $h = b - a$  e  $x_1 = (a + b)/2$ , temos:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= hf(x_1) + f'(x_1) \int_a^b (x - x_1)dx + f''(\eta) \int_a^b \frac{1}{2}(x - x_1)^2dx. \\ &= hf(x_1) + f'(\eta) \left[ \frac{(x - x_1)^2}{2} \right]_a^b + f''(\eta) \left[ \frac{1}{6}(x - x_1)^3 \right]_a^b \\ &= hf(x_1) + f'(\eta) \left[ \frac{(b - x_1)^2}{2} - \frac{(a - x_1)^2}{2} \right] + f''(\eta) \left[ \frac{1}{6}(b - x_1)^3 - \frac{1}{6}(a - x_1)^3 \right] \\ &= hf(x_1) + \frac{h^3 f''(\eta)}{3}. \end{aligned}$$

para  $a \leq \eta \leq b$ .

**Exemplo 8.** Use a regra do ponto médio para aproximar a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

Depois divida a integral em duas

$$\int_0^{1/2} e^{-x^2} dx + \int_{1/2}^1 e^{-x^2} dx.$$

e aplica a regra do ponto médio em cada uma delas. Finalmente, repita o processo dividindo em quatro integrais.

Usando o intervalo  $[0, 1]$ , temos  $h = 1$  e  $x_1 = 1/2$ . A regra do ponto médio resulta em

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 1 \cdot e^{-1/4} = 0.7788008$$

Usando dois intervalos,  $[0, 1/2]$  e  $[1/2, 1]$  e usando a regra do ponto médio em cada um dos intervalos, temos:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0.5 \cdot e^{-1/16} + 0.5 \cdot e^{-9/16} = 0.4697065 + 0.2848914 = 0.7545979$$

Agora, usando quatro intervalos, temos

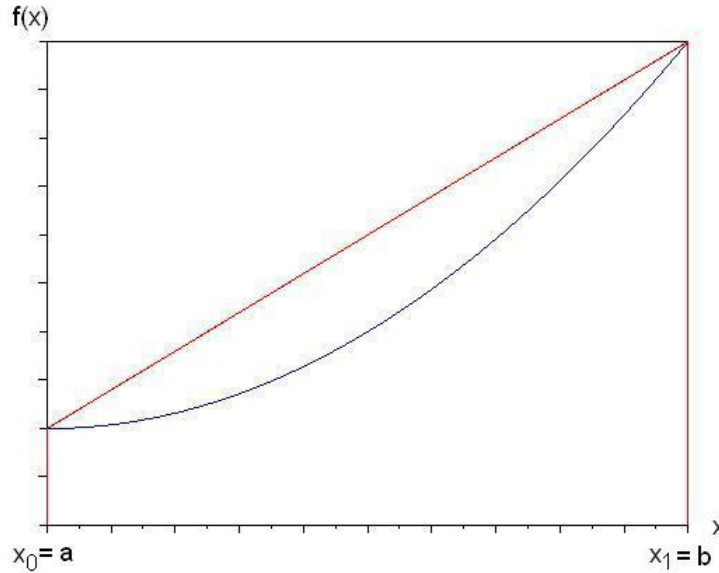
$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0.25 \cdot e^{-1/64} + 0.25 \cdot e^{-9/64} + 0.25 \cdot e^{-25/64} + 0.25 \cdot e^{-49/64} = 0.7487471$$

Observe que o valor da integral é

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = 0.7468241330.$$

### 2.2.2 Regra do Trapézio

A regra do trapézio consiste em aproximar a integral por um trapézio em vez de um retângulo, como fizemos. Para isso, o polinômio de Lagrange deve ser uma reta, como mostra a figura.



O polinômio de Lagrange de primeira ordem que passa por  $(x_0, f(x_0)) := (a, f(a))$  e  $(x_1, f(x_1)) := (b, f(b))$  é dado por

$$P_1(x) = f(x_0) \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} + f(x_1) \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} = f(x_0) \frac{(x - x_1)}{h} + f(x_1) \frac{(x - x_0)}{h},$$

onde  $h = x_1 - x_0$ . Podemos integrar a função  $f(x)$  aproximando-a por esse polinômio:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b \left( f(x_0) \frac{(x - x_1)}{h} + f(x_1) \frac{(x - x_0)}{h} \right) dx = f(x_0) \int_a^b \frac{(x - x_1)}{h} dx + f(x_1) \int_a^b \frac{(x - x_0)}{h} dx.$$

Pelo teorema do valor médio, existe  $a \leq \eta \leq b$  tal que  $\int_a^b f(\xi(x))g(x)dx = f(\eta) \int_a^b g(x)dx$  e, portanto,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= f(x_0) \left[ \frac{(x-x_0)^2}{2h} \right]_{x_0}^{x_1} - f(x_1) \left[ \frac{(x-x_1)^2}{2h} \right]_{x_0}^{x_1} + \frac{f''(\eta)}{2} \left[ \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}(x_1+x_0) + x_0x_1x \right]_{x_0}^{x_1} \\
&= f(x_0) \frac{(x_1-x_0)^2}{2h} + f(x_1) \frac{(x_0-x_1)^2}{2h} \\
&+ \frac{f''(\eta)}{2} \left( \frac{x_1^3}{3} - \frac{x_1^2}{2}(x_1+x_0) + x_0x_1x_1 - \frac{x_0^3}{3} + \frac{x_0^2}{2}(x_1+x_0) - x_0x_1x_0 \right) \\
&= f(x_0) \frac{h^2}{2h} + f(x_1) \frac{h^2}{2h} \\
&+ \frac{f''(\eta)}{2} \frac{2x_1^3 - 3x_1^2(x_1+x_0) + 6x_1^2x_0 - 2x_0^3 + 3x_0^2(x_1+x_0) - 6x_1x_0^2}{6} \\
&= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) + \frac{f''(\eta)}{12} (x_0^3 - 3x_0^2x_1 + 3x_1^2x_0 + x_1^3) \\
&= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) - \frac{h^3 f''(\eta)}{12}
\end{aligned}$$

**Exemplo 9.** Use a regra do trapézio para aproximar a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

Depois divida a integral em duas

$$\int_0^{1/2} e^{-x^2} dx + \int_{1/2}^1 e^{-x^2} dx.$$

e aplica a regra do trapézio em cada uma delas. Finalmente, repita o processo dividindo em quatro integrais.

Usando o intervalo  $[0, 1]$ , temos  $h = 1$ ,  $x_0 = 0$  e  $x_1 = 1$ . A regra do trapézio resulta em

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{1}{2}(e^0 + e^{-1}) = 0.6839397$$

Usando dois intervalos,  $[0, 1/2]$  e  $[1/2, 1]$  e usando a regra do trapézio em cada um dos intervalos, temos:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{0.5}{2}(e^0 + e^{-1/4}) + \frac{0.5}{2}(e^{-1/4} + e^{-1}) = 0.4447002 + 0.2866701 = 0.7313703$$

Agora, usando quatro intervalos, temos

$$\begin{aligned}
\int_0^1 e^{-x^2} dx &\approx \frac{0.25}{2}(e^0 + e^{-1/16}) + \frac{0.25}{2}(e^{-1/16} + e^{-1/4}) + \frac{0.25}{2}(e^{-1/4} + e^{-9/16}) + \frac{0.25}{2}(e^{-9/16} + e^{-1}) \\
&= 0.7429841
\end{aligned}$$

### 2.2.3 Regra de Simpson

A regra de Simpson consiste em aproximar a integral usando três pontos do intervalo:

$$x_0 = a, \quad x_1 := \frac{a+b}{2} = x_0 + h \quad \text{e} \quad x_2 := b = x_1 + h.$$

Para isso, o polinômio de Lagrange deve ser uma parábola:

$$P_2(x) = f(x_0) \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.$$

Se usarmos a mesma metodologia da regra dos trapézios, calcularemos

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_2(x)dx + \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{6} f'''(\xi(x))dx$$

e obteremos a fórmula de Simpson com um erro de quarta ordem. O fato é que a regra de Simpson tem ordem cinco e, para isso, usaremos uma abordagem alternativa. Considere o polinômio de Taylor

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^2 + \frac{f'''(x_1)}{6}(x-x_1)^3 + \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{12}(x-x_1)^4,$$

onde  $x_0 \leq \xi(x) \leq x_2$  e integre no intervalo  $[a, b] = [x_0, x_2]$ :

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \left[ f(x_1)(x-x_1) + f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2} + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^3 + \frac{f'''(x_1)}{18}(x-x_1)^3 \right]_{x_0}^{x_2} \\ &+ \frac{1}{24} \int_{x_0}^{x_2} f^{(4)}(\xi(x))(x-x_1)^4 dx, \end{aligned}$$

Pelo teorema do valor médio, existe  $x_0 \leq \eta \leq x_2$  tal que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \left[ f(x_1)(x-x_1) + f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2} + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^3 + \frac{f'''(x_1)}{18}(x-x_1)^3 \right]_{x_0}^{x_2} \\ &+ \frac{f^{(4)}(\eta)}{24} \int_{x_0}^{x_2} (x-x_1)^4 dx \\ &= \left[ f(x_1)(x-x_1) + f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2} + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^3 + \frac{f'''(x_1)}{18}(x-x_1)^3 \right]_{x_0}^{x_2} \\ &+ \frac{f^{(4)}(\eta)}{120} [(x-x_1)^5]_{x_0}^{x_2} \end{aligned}$$

Usando o fato que

$$\begin{aligned} (x_2-x_1)^3 - (x_0-x_1)^3 &= 2h^3, \\ (x_2-x_1)^4 - (x_0-x_1)^4 &= 0 \end{aligned}$$

e

$$(x_2-x_1)^5 - (x_0-x_1)^5 = 2h^5,$$

temos

$$\int_a^b f(x)dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3}f''(x_1) + \frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{60}.$$

Usando as diferenças finitas centrais para a derivada segunda:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2} + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\eta_1),$$

$x_0 \leq \eta_1 \leq x_2$ , temos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3} \left( \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2} + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\eta_1) \right) + \frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{60} \\ &= \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) - \frac{h^5}{12} \left( \frac{1}{3}f^{(4)}(\eta_1) - \frac{1}{5}f^{(4)}(\eta) \right). \end{aligned}$$

Pode-se mostrar que é possível escolher  $\eta_2$  que substitua  $\eta$  e  $\eta_1$  com a seguinte estimativa

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta_2).$$

**Exemplo 10.** Use a regra de Simpson para aproximar a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

Depois divida a integral em duas

$$\int_0^{1/2} e^{-x^2} dx + \int_{1/2}^1 e^{-x^2} dx.$$

e aplica a regra de Simpson em cada uma delas.

Usando o intervalo  $[0, 1]$ , temos  $h = 1/2$ ,  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 1/2$  e  $x_2 = 1$ . A regra de Simpson resulta em

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{0.5}{3}(e^0 + 4e^{-1/4} + e^{-1}) = 0.7471804$$

Usando dois intervalos,  $[0, 1/2]$  e  $[1/2, 1]$  e usando a regra do trapézio em cada um dos intervalos, temos:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{0.25}{3}(e^0 + 4e^{-1/16} + e^{-1/4}) + \frac{0.25}{3}(e^{-1/4} + 4e^{-9/16} + e^{-1}) = 0.7468554$$

## 2.3 Regras compostas

Vimos que em todas as estimativas de erro que derivamos, o erro depende do tamanho do intervalo de integração. Um estratégia para reduzir o erro consiste em dividir o intervalo de integração em diversos subintervalos menores:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^{N_i} \int_{a_k}^{b_k} f(x) dx$$

onde

$$a = a_1 < b_1 = a_2 < b_2 = a_3 < \dots < b_{N_i-1} = a_{N_i} < b_{N_i} = b$$

Depois, aplica-se um método simples em cada subintervalo.

A regra composta dos trapézios assume a seguinte forma:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^{N_i} \int_{a_k}^{b_k} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^{N_i} \frac{b_k - a_k}{2} [f(a_k) + f(b_k)]$$

Se assumirmos que todos os intervalos têm o mesmo comprimento  $h$ , temos:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} \sum_{k=1}^{N_i} [f(a_k) + f(b_k)]$$

Definimos

$$x_k = a + (k - 1)h$$

portanto

$$a_k = x_k, \quad b_k = x_{k+1}$$

E temos:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} \sum_{k=1}^{N_i} [f(x_k) + f(x_{k+1})] = \frac{h}{2} [f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_{N_i}) + f(x_{N_i+1})]$$

Já a regra composta de Simpson assume a seguinte forma:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{N_i} \int_{a_k}^{b_k} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{N_i} \frac{b_k - a_k}{6} \left[ f(a_k) + 4f\left(\frac{a_k + b_k}{2}\right) + f(b_k) \right]$$

Se mais uma vez assumirmos que todos os intervalos têm o mesmo comprimento  $2h$ , temos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{2h}{6} \sum_{k=1}^{N_i} \left[ f(a_k) + 4f\left(\frac{a_k + b_k}{2}\right) + f(b_k) \right]$$

Definimos

$$x_k = a + (k - 1)h, \quad k = 1, \dots, 2N_i + 1$$

portanto

$$a_k = x_{2k-1}, \quad b_k = x_{2k+1}$$

E temos:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &\approx \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{N_i} [f(x_{2k-1}) + 4f(x_{2k}) + f(x_{2k+1})] = \\ &\frac{h}{3} [f(x_1) + 4f(x_2) + 2f(x_3) + 4f(x_4) + \dots + 4f(x_{2N_i}) + f(x_{2N_i+1})] \end{aligned}$$

**Exemplo 11.** Calcule numericamente a integral

$$\int_0^2 x^2 e^{x^2} dx$$

pelas regras compostas do ponto médio, trapézio e Simpson variando o número de intervalos  $N_i = 1, 2, 3, 6, 12, 24, 48, 96$ .

$N_i$	ponto médio	Trapézios	Simpson
1	5.4365637	218.3926	76.421909
2	21.668412	111.91458	51.750469
3	31.678746	80.272022	47.876505
6	41.755985	55.975384	46.495785
12	45.137529	48.865685	46.380248
24	46.057757	47.001607	46.372373
48	46.292964	46.529682	46.37187
96	46.352096	46.411323	46.371838

## 2.4 O método de Romberg

O método de Romberg é um método simplificado para construir quadraturas de alta ordem.

Considere o método de trapézios composto aplicado à integral

$$\int_a^b f(x)dx$$

Defina  $I(h)$  a aproximação desta integral pelo método dos trapézios composto com malha de largura constante igual a  $h$ . Aqui  $h = \frac{b-a}{N_i}$  para algum  $N_i$  inteiro, i.e.:

$$I(h) = \frac{h}{2} \left[ f(a) + 2 \sum_{j=2}^{N_i} f(x_j) + f(b) \right], \quad N_i = \frac{b-a}{h}$$

**Teorema 1.** Se  $f(x)$  é uma função analítica no intervalo  $(a, b)$ , então a função  $I(h)$  admite uma representação na forma

$$I(h) = I_0 + I_2h^2 + I_4h^4 + I_6h^6 + \dots$$

Para uma demonstração, veja [1]. Em especial observamos que

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h \rightarrow 0} I(h) = I_0$$

Ou seja, o valor exato da integral procurada é dado pelo coeficiente  $I_0$ .

A ideia central do método de Romberg, agora, consiste em usar a extrapolação de Richardson para construir métodos de maior ordem a partir dos métodos dos trapézios para o intervalo  $(a, b)$

**Exemplo 12.** Construção do método de quarta ordem.

$$I(h) = I_0 + I_2h^2 + I_4h^4 + I_6h^6 + \dots$$

$$I\left(\frac{h}{2}\right) = I_0 + I_2\frac{h^2}{4} + I_4\frac{h^4}{16} + I_6\frac{h^6}{64} + \dots$$

Usamos agora uma eliminação gaussiana para obter o termo  $I_0$ :

$$\frac{4I(h/2) - I(h)}{3} = I_0 - \frac{1}{4}I_4h^4 - \frac{5}{16}I_6h^6 + \dots$$

Lembramos que

$$\begin{aligned} I(h) &= \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] \\ I(h/2) &= \frac{h}{4} [f(a) + 2f(c) + f(b)], \quad c = \frac{a+b}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{4I(h/2) - I(h)}{3} &= \frac{h}{3} [f(a) + 2f(c) + f(b)] - \frac{h}{6} [f(a) + f(b)] \\ &= \frac{h}{6} [f(a) + 4f(c) + f(b)] \end{aligned}$$

Observe que esquema coincide com o método de Simpson.

A partir de agora, usaremos a seguinte notação

$$\begin{aligned} R_{1,1} &= I(h) \\ R_{2,1} &= I(h/2) \\ R_{3,1} &= I(h/4) \\ &\vdots \\ R_{n,1} &= I(h/2^{n-1}) \end{aligned}$$

Observamos que os pontos envolvidos na quadratura  $R_{k,1}$  são os mesmos pontos envolvidos na quadratura  $R(k-1, 1)$  acrescidos dos pontos centrais, assim, temos a seguinte fórmula de recorrência:

$$R_{k,1} = \frac{1}{2}R_{k-1,1} + \frac{h}{2^{k-1}} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} f\left(a + (2i-1)\frac{h}{2^{k-1}}\right)$$



Definimos  $R_{k,2}$  para  $k \geq 2$  como o esquema de ordem quatro obtido da fórmula do exemplo 12:

$$R_{k,2} = \frac{4R_{k,1} - R_{k-1,1}}{3}$$

Os valores  $R_{k,2}$  representam então os valores obtidos pelo método de Simpson composto aplicado a uma malha composta de  $2^{k-1} + 1$  pontos.

Similarmente os valores de  $R_{k,j}$  são os valores obtidos pela quadratura de ordem  $2j$  obtida via extrapolação de Richardson. Pode-se mostrar que

$$R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}.$$

**Exemplo 13.** Construa o esquema de Romberg para aproximar o valor de  $\int_0^1 e^{-x^2} dx$  com erro de ordem 8.

1.0183156			
0.8770373	0.8299445		
0.8806186	0.8818124	0.8852703	
0.8817038	0.8820655	0.8820824	0.8820318

**Exemplo 14.** Construa o esquema de Romberg para aproximar o valor de  $\int_0^2 x^2 e^{x^2} dx$  com erro de ordem 12.

218.3926					
111.91458	76.421909				
66.791497	51.750469	50.105706			
51.892538	46.926218	46.604601	46.549028		
47.782846	46.412949	46.378731	46.375146	46.374464	
46.72661	46.374531	46.37197	46.371863	46.37185	46.371847

## 2.5 Ordem de precisão

Todos os métodos de quadratura que vimos até o momento são da forma

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$$

**Exemplo 15.** (a) Método do trapézio

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx [f(a) + f(b)] \frac{b-a}{2} \\ &= \frac{b-a}{2} f(a) + \frac{b-a}{2} f(b) \\ &:= w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) = \sum_{j=1}^2 w_j f(x_j) \end{aligned}$$

(b) Método do trapézio com dois intervalos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \left[ f(a) + 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \frac{b-a}{4} \\ &= \frac{b-a}{4} f(a) + \frac{b-a}{2} f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{b-a}{4} f(b) \\ &:= w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) + w_3 f(x_3) = \sum_{j=1}^3 w_j f(x_j) \end{aligned}$$

(c) Método de Simpson

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \frac{b-a}{6} \\ &= \frac{b-a}{6}f(a) + \frac{2(b-a)}{3}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{b-a}{6}f(b) \\ &:= \sum_{j=1}^3 w_j f(x_j)\end{aligned}$$

(d) Método de Simpson com dois intervalos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \left[ f(a) + 4f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 4f\left(\frac{a+3b}{4}\right) + f(b) \right] \frac{b-a}{12} \\ &= \frac{b-a}{12}f(a) + \frac{b-a}{3}f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + \frac{b-a}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{b-a}{3}f\left(\frac{a+3b}{4}\right) + \frac{b-a}{12}f(b) \\ &:= \sum_{j=1}^5 w_j f(x_j)\end{aligned}$$

A principal técnica que temos usado para desenvolver os métodos numéricos é o **polinômio de Taylor**:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n + R_n(x)$$

Integrando termo a termo, temos:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b a_0dx + \int_a^b a_1xdx + \int_a^b a_2x^2dx + \dots + \int_a^b a_nx^ndx + \int_a^b R_n(x)dx \\ &= a_0(b-a) + a_1\frac{b^2-a^2}{2} + a_2\frac{b^3-a^3}{3} + \dots + a_n\frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} + \int_a^b R_n(x)dx\end{aligned}$$

Neste momento, é natural investigar o desempenho de um esquema numérico aplicado a funções do tipo  $f(x) = x^n$ .

**Definição 1.** A **ordem de precisão** ou **ordem de exatidão** de um esquema de quadratura numérica como o maior inteiro positivo  $n$  para o qual o esquema é exato para todas as funções do tipo  $x^k$  com  $0 \leq k \leq n$ , ou seja,

Um esquema é dito de ordem  $n$  se

$$\sum_{j=1}^n w_j f(x_j) = \int_a^b f(x)dx, \quad f(x) = x^k, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

ou, equivalentemente:

$$\sum_{j=1}^n w_j x_j^k = \int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

**Observação 1.** Se o método tem ordem 0 ou mais, então

$$\sum_{j=1}^n w_j = b - a$$

**Exemplo 16.** A ordem de precisão do esquema de trapézios é 1:

$$\int_a^b f(x)dx \approx [f(a) + f(b)] \frac{b-a}{2} = \sum_{j=1}^2 w_j f(x_j)$$

onde  $w_j = \frac{b-a}{2}$ ,  $x_1 = a$  e  $x_2 = b$ .

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n w_j &= b-a & (k=0) \\ \sum_{j=1}^n w_j x_j &= (a+b) \frac{b-a}{2} = \frac{b^2-a^2}{2} & (k=1) \\ \sum_{j=1}^n w_j x_j^2 &= (a^2+b^2) \frac{b-a}{2} \neq \frac{b^3-a^3}{3} & (k=2) \end{aligned}$$

**Exemplo 17.** A ordem de precisão do esquema de Simpson é 3:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \frac{b-a}{6} = \sum_{j=1}^3 w_j f(x_j)$$

onde  $w_1 = w_3 = \frac{b-a}{6}$ ,  $w_2 = 4\frac{b-a}{6}$ ,  $x_1 = a$ ,  $x_2 = \frac{a+b}{2}$  e  $x_3 = b$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n w_j &= (1+4+1) \frac{b-a}{6} = b-a & (k=0) \\ \sum_{j=1}^n w_j x_j &= (a+4\frac{a+b}{2}+b) \frac{b-a}{6} = (a+b) \frac{b-a}{2} = \frac{b^2-a^2}{2} & (k=1) \\ \sum_{j=1}^n w_j x_j^2 &= (a^2+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^2+b^2) \frac{b-a}{6} = (3a^2+4ab+3b^2) \frac{b-a}{2} = \frac{b^3-a^3}{3} & (k=2) \\ \sum_{j=1}^n w_j x_j^3 &= (a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3) \frac{b-a}{6} = \frac{b^4-a^4}{4} & (k=3) \\ \sum_{j=1}^n w_j x_j^4 &= (a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4) \frac{b-a}{6} \neq \frac{b^5-a^5}{5} & (k=3) \end{aligned}$$

**Problema 1.** Encontre os pesos  $w_j$  e as abscissas  $x_j$  tais que o esquema de dois pontos

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

é de ordem 3.

**Solução:**

Temos um sistema de quatro equações e quatro incógnitas dado por:

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 &= 2 \\ x_1 w_1 + x_2 w_2 &= 0 \\ x_1^2 w_1 + x_2^2 w_2 &= \frac{2}{3} \\ x_1^3 w_1 + x_2^3 w_2 &= 0 \end{aligned}$$

Da segunda e quarta equação, temos:

$$\frac{w_1}{w_2} = -\frac{x_2}{x_1} = -\frac{x_2^3}{x_1^3}$$

Como  $x_1 \neq x_2$ , temos  $x_1 = -x_2$  e  $w_1 = w_2$ . Da primeira equação, temos  $w_1 = w_2 = 1$ . Da terceira equação, temos  $-x_1 = x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}$ .

Esse esquema de ordem de precisão três e dois pontos chama-se quadratura de Gauss-Legendre com dois pontos:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

**Exemplo 18.** Comparação

$f(x)$	Exato	Trapézio	Simpson	Gauss-Legendre (2)
$e^x$	$e - e^{-1} \approx 2.3504024$	$e^{-1} + e \approx 3.0861613$	$\frac{e^{-1} + 4e^0 + e^1}{3} \approx 2.3620538$	$e^{-\frac{\sqrt{3}}{3}} + e^{\frac{\sqrt{3}}{3}} \approx 2.3426961$
$x^2\sqrt{3+x^3}$	$\frac{16}{9} - \frac{4}{9}\sqrt{2} \approx 1.1492384$	3.4142136	1.1380712	1.1541058
$x^2e^{x^3}$	$\frac{e-e^{-1}}{3} \approx 0.7834675$	3.0861613	1.0287204	0.6790505

## 2.6 Quadratura de Gauss-Legendre

A quadratura de Gauss-Legendre de  $N$  pontos é o esquema numérico

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$$

cuja ordem de exatidão é  $2N - 1$ .

- O problema de encontrar os  $N$  pesos e  $N$  abscissas é equivalente a um sistema não-linear com  $2N$  equações e  $2N$  incógnitas.
- Pode-se mostrar que este problema sempre tem solução e que a solução é única se  $x_1 < x_2 < \dots < x_n$
- As abscissas são das pelos zeros do enésimo polinômio de Legendre,  $P_N(x)$ .
- Os pesos são dados por

$$w_j = \frac{2}{(1 - x_j^2) [P'_N(x_j)]^2}.$$

- Estes dados são tabelados e facilmente encontrados.

$n$	$x_j$	$w_j$
1	0	2
2	$\pm \frac{\sqrt{3}}{3}$	1
3	0 $\pm \sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{8}{9}$ $\frac{5}{9}$
4	$\pm \sqrt{(3 - 2\sqrt{6/5})/7}$ $\pm \sqrt{(3 + 2\sqrt{6/5})/7}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$ $\frac{18-\sqrt{30}}{36}$

**Exemplo 19.** Aproximar

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1+x^2} dx$$

pelo método de Gauss-Legendre com 3 pontos.

$$I_3 = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = \frac{4}{9}\sqrt{10} + \frac{8}{9} \approx 2.2943456$$

No Scilab:

```
exec pesos.sci;
I3=f(0)*w3(1)+f(x3(2))*w3(2)+f(-x3(2))*w3(2)
```

**Exemplo 20.** Aproximar

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1+x^2} dx$$

pelo método de Gauss-Legendre com 4 pontos.

```
I4=f(x4(1))*w4(1)+f(-x4(1))*w4(1)+f(x4(2))*w4(2)+f(-x4(2))*w4(2)
```

**Exemplo 21.** Aproximar

$$\int_0^1 \sqrt{1+x^2} dx$$

pelo método de Gauss-Legendre com 3, 4 e 5 pontos.

Faz-se a mudança de variáveis  $u = 2x - 1$

$$\int_0^1 \sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sqrt{1 + \left(\frac{u+1}{2}\right)^2} du$$

```

def f('y=f(u)', 'y=sqrt(1+(u+1)^2/4)/2')
I3=f(0)*w3(1)+f(x3(2))*w3(2)+f(-x3(2))*w3(2)
I4=f(x4(1))*w4(1)+f(-x4(1))*w4(1)+f(x4(2))*w4(2)+f(-x4(2))*w4(2)
I5=f(0)*w5(1)+f(x5(2))*w5(2)+f(-x5(2))*w5(2)+f(x5(3))*w5(3)+f(-x5(3))*w5(3)

```

### 3 Soluções Numéricas para problemas de valor inicial

Muitos problemas de valor inicial da forma

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(y(t), t) \\ y(t_0) &= y_0 \text{ condição inicial} \end{aligned}$$

não podem ser resolvidos exatamente, ou seja, sabe-se que a solução existe e é única, porém não podemos expressá-la em termos de funções elementares. Por isso é necessário calcular soluções numéricas. Nesse propósito, construímos uma malha de pontos no eixo  $t$ ,  $\{t_i\}_{i=1}^N$  e calculamos o valor aproximado da função solução  $y(t_i)$  em cada ponto da malha usando esquemas numéricos.

#### 3.1 Método de Euler

Seja o problema de valor inicial

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(y(t), t) \\ y(0) &= y_0 \text{ condição inicial} \end{aligned}$$

Aproximamos a derivada  $y'(t)$  por um esquema de primeira ordem do tipo

$$y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} + O(h), \quad h > 0$$

assim temos

$$\begin{aligned} \frac{y(t+h) - y(t)}{h} &= f(y(t), t) + O(h) \\ y(t+h) &= y(t) + hf(y(t), t) + O(h^2) \end{aligned}$$

Definindo  $y^{(k)}$  como uma aproximação para  $y((k-1)h)$  e  $t^{(k)} = (k-1)h$ , temos

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(y^{(k)}, t^{(k)}) \\ y^{(1)} &= y_0 \text{ condição inicial} \end{aligned}$$

**Exemplo 1:** Considere o problema de valor inicial

$$\begin{aligned} y'(t) &= 2y(t) \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

Sabemos da teoria elementar de equação diferenciais ordinárias, que a solução exata deste problema é única e é dada por

$$y(t) = e^{2t}.$$

O método de Euler aplicada a este problema produz o seguinte esquema:

$$\begin{aligned}y^{(k+1)} &= y^{(k)} + 2hy^{(k)} = (1 + 2h)y^{(k)} \\y^{(1)} &= 1,\end{aligned}$$

cuja solução é dada por

$$y^{(k)} = (1 + 2h)^{k-1}.$$

Como  $t = (k - 1)h$ , a solução aproximada é

$$y(t) \approx \tilde{y}(t) = (1 + 2h)^{\frac{t}{h}}.$$

Fica óbvio que se  $h \rightarrow 0$ , então

$$\tilde{y}(t) \rightarrow e^{2t}.$$

**Exemplo 22.** Considere o problema de valor inicial

$$\begin{aligned}y'(t) &= y(t)(1 - y(t)) \\y(0) &= 1/2\end{aligned}$$

É fácil encontrar a solução exata desta equação pois

$$\begin{aligned}\frac{dy(t)}{y(t)(1 - y(t))} &= dt \\ \left(\frac{1}{y} + \frac{1}{1 - y}\right) dy &= dt \\\ln(y) - \ln(1 - y) &= t + C \\\ln\left(\frac{y}{1 - y}\right) &= t + C \\\frac{y}{1 - y} &= e^{t+C} \\y &= e^{t+C}(1 - y) \\y(1 + e^{t+C}) &= e^{t+C} \\y &= \frac{e^{t+C}}{1 + e^{t+C}}\end{aligned}$$

ainda  $y(0) = \frac{e^C}{1+e^C} = 1/2$ , temos  $e^C = 1$  e, portanto,  $C = 0$ .

Assim, a solução exata é dada por  $y = \frac{e^t}{1+e^t}$

O método de Euler produz o seguinte esquema iterativo:

$$\begin{aligned}y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hy^{(k)}(1 - y^{(k)}) \\y^{(1)} &= 1/2\end{aligned}$$

### Comparação

$t$	Exato	Euler $h = .1$	Euler $h = .01$
0	1/2	.5	.5
1/2	$\frac{e^{1/2}}{1+e^{1/2}} \approx 0.6224593$	0.6231476	0.6225316
1	$\frac{e}{1+e} \approx 0.7310586$	0.7334030	0.7312946
2	$\frac{e^2}{1+e^2} \approx 0.8807971$	0.8854273	0.8812533
3	$\frac{e^3}{1+e^3} \approx 0.9525741$	0.9564754	0.9529609

### Exemplo 3

$$\begin{aligned} y' &= -y + t \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

Cuja solução exata é  $y(t) = 2e^{-t} + t - 1$ .

O esquema recursivo de Euler fica:

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y(k) - hy(k) + ht^{(k)} \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

### Comparação

$t$	Exato	Euler $h = .1$	Euler $h = .01$
0	1	1	1
1	$2e^{-1} \approx 0.7357589$	0.6973569	0.7320647
2	$2e^{-2} + 1 \approx 1.2706706$	1.2431533	1.2679593
3	$2e^{-3} + 2 \approx 2.0995741$	2.0847823	2.0980818



#### Exemplo 4

$$\begin{aligned}x' &= -y \\y' &= x \\x(0) &= 1 \\y(0) &= 0\end{aligned}$$

Cuja solução exata é  $x(t) = \cos(t)$  e  $y(t) = \sin(t)$

Escreva

$$z(t) = \begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix}$$

e temos

$$\begin{bmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} -y^{(k)} \\ x^{(k)} \end{bmatrix}$$

Equivalente a

$$\begin{aligned}x^{(k+1)} &= x^{(k)} - hy^{(k)} \\y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hx^{(k)}\end{aligned}$$

**Exemplo 5** Resolva o problema de valor inicial de segunda ordem dado por

$$\begin{aligned}y'' + y' + y &= \cos(t) \\y(0) &= 1 \\y'(0) &= 0\end{aligned}$$

e compare com a solução exata para  $h = 0.1$  e  $h = 0.01$ .

Procedemos com a substituição  $w = y'$ , de forma que obtermos o sistema:

$$\begin{aligned}y' &= w \\w' &= -w - y + \cos(t) \\y(0) &= 1 \\w(0) &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hw^{(k)} \\w^{(k+1)} &= w^{(k)} - hw^{(k)} - hy^{(k)} + h \cos(t^{(k)}) \\y^{(1)} &= 1 \\w^{(1)} &= 0\end{aligned}$$

### 3.2 Método de Euler modificado

No método de Euler, usamos a seguinte iteração:

$$\begin{aligned}y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(y^{(k)}, t^{(k)}) \\y^{(1)} &= y_i \text{ condição inicial}\end{aligned}$$

A idéia do método de Euler melhorado é substituir a declividade  $f(y^{(k)}, t^{(k)})$  pela média aritmética entre  $f(y^{(k)}, t^{(k)})$  e  $f(y^{(k+1)}, t^{(k+1)})$ .

No entanto, não dispomos do valor de  $y^{(k+1)}$  pelo que aproximamos por

$$\tilde{y}^{(k+1)} = y^{(k)} + hf(y^{(k)}, t^{(k)}).$$

$$\begin{aligned}\tilde{y}^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(y^{(k)}, t^{(k)}) \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{2} [f(y^{(k)}, t^{(k)}) + f(\tilde{y}^{(k+1)}, t^{(k+1)})] \\ y^{(1)} &= y_i \text{ condição inicial}\end{aligned}$$

Refaça o exemplo 2 via método de Euler melhorado.

### 3.3 Ordem de precisão

Considere o problema de valor inicial dado por

$$\begin{aligned}y'(t) &= f(y(t), t) \\ y(0) &= y_i\end{aligned}$$

No método de Euler, aproximamos a derivada  $y'(t)$  por um esquema de primeira ordem do tipo

$$y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} + O(h), \quad h > 0$$

de forma que tínhamos

$$y(t+h) = y(t) + hf(y(t), t) + O(h^2)$$

Se fixarmos um instante de tempo  $t = Nh$ , temos:

$$\begin{aligned}y(t) &= [y(0) + hf(y(0), 0) + O(h^2)] + [y(h) + hf(y(h), h) + O(h^2)] \\ &+ \dots [y(t-h) + hf(y(t-h), t-h) + O(h^2)] \\ &= y^k + \sum_{j=0}^{N-1} O(h^2) = y^k + O(h)\end{aligned}$$

Por isso, o método de Euler é dito ter ordem global de precisão  $h$ .

## 4 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta consistem em métodos do tipo:

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + w_1 k_1 + \dots + w_n k_n$$

onde

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(y^{(n)}, t^{(n)}) \\ k_2 &= hf(y^{(n)} + \alpha_{2,1} k_1, t^{(n)} + \beta_2 h) \\ k_3 &= hf(y^{(n)} + \alpha_{3,1} k_1 + \alpha_{3,2} k_2, t^{(n)} + \beta_3 h) \\ &\vdots \\ k_n &= hf(y^{(n)} + \alpha_{n,1} k_1 + \alpha_{n,2} k_2 + \dots + \alpha_{n,n-1} k_{n-1}, t^{(n)} + \beta_n h)\end{aligned}$$

Os coeficientes são escolhidos de forma que a expansão em Taylor de  $y^{(n+1)}$  e  $y^{(n)} + w_1 k_1 + \dots + w_n k_n$  coincidam até ordem  $k + 1$ .

**Exemplo:**

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{k_1 + k_2}{2}$$

onde  $k_1 = hf(y^{(n)}, t^{(n)})$  e  $k_2 = f(y^{(n)} + k_1, t^{(n)+h})$

#### 4.1 Métodos de Runge-Kutta - Quarta ordem

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(y^{(n)}, t^{(n)}) \\ k_2 &= hf(y^{(n)} + k_1/2, t^{(n)} + h/2) \\ k_3 &= hf(y^{(n)} + k_2/2, t^{(n)} + h/2) \\ k_4 &= hf(y^{(n)} + k_3, t^{(n)} + h) \end{aligned}$$

Este método tem ordem de truncamento local de quarta ordem. Uma discussão heurística usando método de Simpson pode ajudar a compreender os estranhos coeficientes:

$$\begin{aligned} y(t^{(n+1)}) - y(t^{(n)}) &= \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} f(y(s), s) ds \\ &\approx \frac{h}{6} [f(y(t^{(n)}), t^{(n)}) + 4f(y(t^{(n)} + h/2), t^{(n)} + h/2) + f(y(t^{(n)} + h), t^{(n)} + h)] \\ &\approx \frac{k_1 + 4(\frac{k_2+k_3}{2}) + k_4}{6} \end{aligned}$$

onde  $k_1$  e  $k_4$  representam as inclinações nos extremos e  $k_2$  e  $k_3$  são duas aproximações diferentes para a inclinação no meio do intervalo.

#### 4.2 Métodos de passo múltiplo - Adams-Bashforth

O método de Adams-Bashforth consiste de um esquema recursivo do tipo:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=0}^k w_j f(y^{(n-j)}, t^{(n-j)})$$

**Exemplo: Adams-Bashforth de segunda ordem**

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [3f(y^{(n)}, t^{(n)}) - f(y^{(n-1)}, t^{(n-1)})]$$

**Exemplo: Adams-Bashforth de terceira ordem**

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} [23f(y^{(n)}, t^{(n)}) - 16f(y^{(n-1)}, t^{(n-1)}) + 5f(y^{(n-2)}, t^{(n-2)})]$$

**Exemplo: Adams-Bashforth de quarta ordem**

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} [55f(y^{(n)}, t^{(n)}) - 59f(y^{(n-1)}, t^{(n-1)}) + 37f(y^{(n-2)}, t^{(n-2)}) - 9f(y^{(n-3)}, t^{(n-3)})]$$

Os métodos de passo múltiplo evitam os múltiplos estágios do métodos de Runge-Kutta, mas exigem ser "iniciados" com suas condições iniciais.

## 5 Métodos de passo múltiplo - Adams-Moulton

O método de Adams-Moulton consiste de um esquema recursivo do tipo:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=-1}^k w_j f(y^{(n-j)}, t^{(n-j)})$$

**Exemplo: Adams-Moulton de quarta ordem**

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} [9f(y^{(n+1)}, t^{(n+1)}) + 19f(y^{(n)}, t^{(n)}) - 5f(y^{(n-1)}, t^{(n-1)}) + f(y^{(n-2)}, t^{(n-2)})]$$

O método de Adams-Moulton é implícito, ou seja, exige que a cada passo, uma equação em  $y^{(n+1)}$  seja resolvida.

### 5.1 Estabilidade

Consideremos o seguinte problema de teste:

$$\begin{cases} y' &= -\alpha y \\ y(0) &= 1 \end{cases}$$

cujas solução exata é dada por  $y(t) = e^{-\alpha t}$ .

Considere agora o método de Euler aplicado a este problema com passo  $h$ :

$$\begin{cases} y^{(k+1)} &= y^{(k)} - \alpha h y^{(k)} \\ y^{(1)} &= 1 \end{cases}$$

A solução exata do esquema de Euler é dada por

$$y^{(k+1)} = (1 - \alpha h)^k$$

e, portanto,

$$\tilde{y}(t) = y^{(k+1)} = (1 - \alpha h)^{t/h}$$

Fixamos um  $\alpha > 0$ , de forma que  $y(t) \rightarrow 0$ . Mas observamos que  $\tilde{y}(t) \rightarrow 0$  somente quando  $|1 - \alpha h| < 1$  e solução positivas somente quando  $\alpha h < 1$ .

**Conclusão:** Se o passo  $h$  for muito grande, o método pode se tornar instável, produzindo solução espúrias.

**Problema** Resolva o problema 1 pelos diversos métodos e verifique heurísticamente a estabilidade para diversos valores de  $h$ .

## Referências

- [1] DEMAILLY, J. P. *Analyse Numérique et Équations Différentielles*, nouvelle Édition ed. EDP Sciences, Grenoble, 2006.