

# Universidade de São Paulo

## Instituto de Física de São Carlos

### **Lista 3**

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Abril de 2025

# Sumário

<b>1</b>	<b>Runge-Kutta Methods</b>	<b>2</b>
1.1	Exercício 1 . . . . .	2
1.2	Exercício 2 . . . . .	4
<b>2</b>	<b>The Numerov Algorithm</b>	<b>6</b>
2.1	Exercício 3 . . . . .	6

# 1 Runge-Kutta Methods

## 1.1 Exercício 1

Tarefa: Demonstrar que o erro da interpolação linear

$$f(x, y) = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_n + \frac{x_n - x}{h} f_{n-1}$$

é  $\mathcal{O}(h^2)$

Demonstração:

Seja  $f(x) \in C^2$  queremos interpolar  $f(x)$  entre os pontos  $x_{n-1}$  e  $x_n = x_{n-1} + h$  utilizando interpolação linear, e estimar o erro:

$$E(x) = f(x) - \tilde{f}(x)$$

onde

$$\tilde{f}(x) = \frac{x - x_{n-1}}{h} f(x_n) + \frac{x_n - x}{h} f(x_{n-1})$$

Expandimos  $f(x_n)$  em série de Taylor ao redor de  $x_{n-1}$ :

$$f(x_n) = f(x_{n-1} + h) = f(x_{n-1}) + hf'(x_{n-1}) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_{n-1}, x_n)$$

Expandimos também  $f(x)$  ao redor de  $x_{n-1}$ :

$$f(x) = f(x_{n-1}) + (x - x_{n-1})f'(x_{n-1}) + \frac{(x - x_{n-1})^2}{2} f''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_{n-1}, x)$$

Substituímos a expansão de  $f(x_n)$  na expressão de  $\tilde{f}(x)$ :

$$\tilde{f}(x) = \frac{x - x_{n-1}}{h} \left[ f(x_{n-1}) + hf'(x_{n-1}) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_1) \right] + \frac{x_n - x}{h} f(x_{n-1})$$

Logo

$$\tilde{f}(x) = \frac{x - x_{n-1}}{h} f(x_{n-1}) + (x - x_{n-1}) f'(x_{n-1}) + \frac{(x - x_{n-1})h}{2} f''(\xi_1) + \frac{x_n - x}{h} f(x_{n-1})$$

Como  $x_n = x_{n-1} + h$ , temos  $x_n - x = h - (x - x_{n-1})$  - assim:

$$\tilde{f}(x) = \left( \frac{x - x_{n-1}}{h} + \frac{h - (x - x_{n-1})}{h} \right) f(x_{n-1}) + (x - x_{n-1}) f'(x_{n-1}) + \frac{(x - x_{n-1})h}{2} f''(\xi_1)$$

Segue que:

$$\tilde{f}(x) = f(x_{n-1}) + (x - x_{n-1}) f'(x_{n-1}) + \frac{(x - x_{n-1})h}{2} f''(\xi_1)$$

Fazendo a subtração entre  $f(x)$  e  $\tilde{f}(x)$ , obtemos:

$$\begin{aligned} f(x) - \tilde{f}(x) &= \left[ f(x_{n-1}) + (x - x_{n-1}) f'(x_{n-1}) + \frac{(x - x_{n-1})^2}{2} f''(\xi_2) \right] \\ &\quad - \left[ f(x_{n-1}) + (x - x_{n-1}) f'(x_{n-1}) + \frac{(x - x_{n-1})h}{2} f''(\xi_1) \right] \end{aligned}$$

Deste modo:

$$\begin{aligned} f(x) - \tilde{f}(x) &= \frac{1}{2} [(x - x_{n-1})^2 f''(\xi_2) - (x - x_{n-1})h f''(\xi_1)] \\ &= \frac{(x - x_{n-1})}{2} [(x - x_{n-1}) f''(\xi_2) - h f''(\xi_1)] \end{aligned}$$

Podemos reescrever esse erro como:

$$f(x) - \tilde{f}(x) = -\frac{(x - x_{n-1})(x - x_n)}{2} f''(\tilde{\xi}) \quad \text{para algum } \tilde{\xi} \in (x_{n-1}, x_n)$$

onde usamos que  $(x - x_{n-1})(x - x_n) = (x - x_{n-1})^2 - h(x - x_{n-1})$ , e agrupamos os termos com uma média das derivadas.

Portanto, o erro da interpolação linear de  $f(x) \in C^2$  entre dois pontos é dado por:

$$f(x) - \tilde{f}(x) = -\frac{(x - x_{n-1})(x - x_n)}{2} f''(\xi) \quad \text{para algum } \xi \in (x_{n-1}, x_n)$$

Como  $|(x - x_{n-1})(x - x_n)| \leq \frac{h^2}{4}$ , então:

$$|f(x) - \tilde{f}(x)| = \mathcal{O}(h^2)$$

## 1.2 Exercício 2

Tarefa: Resolva a equação

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = -4\pi^2 y(x)$$

com as condições iniciais  $y(x = 0) = 0$  e  $y'(x = 0) = 0$  usando o algoritmo de Runge-Kutta.

O código foi compilado com o comando:

```
gfortran L3-5255417-ex-2.f90 -o L3-5255417-ex-2.exe
```

Os resultados do código foram salvos em `results.txt`.

Resultados:

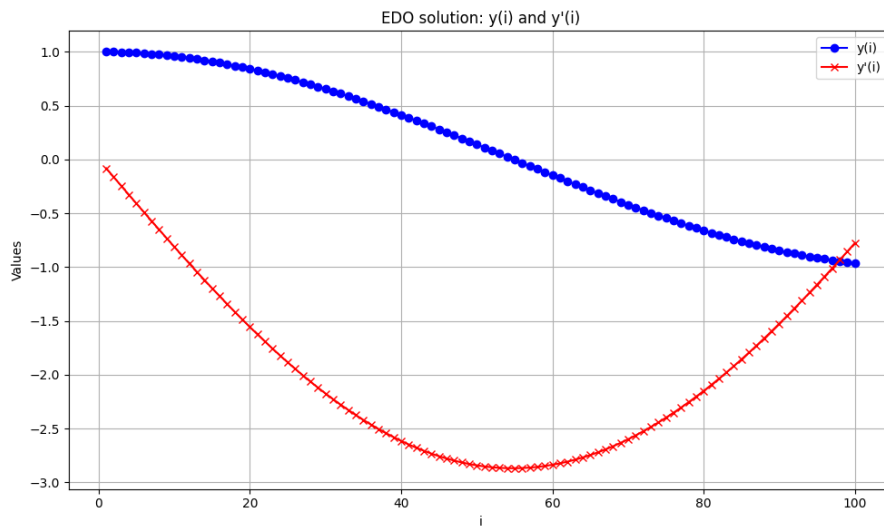


Figura 1: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.01$

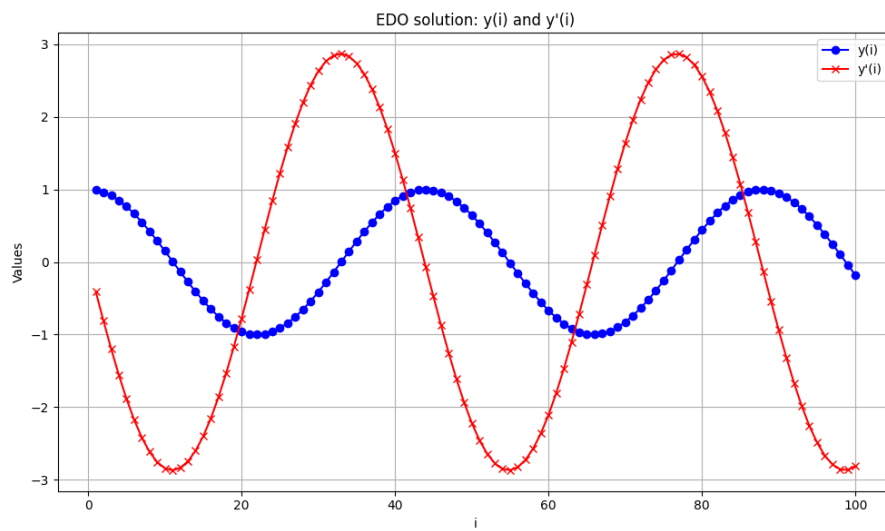


Figura 2: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.05$

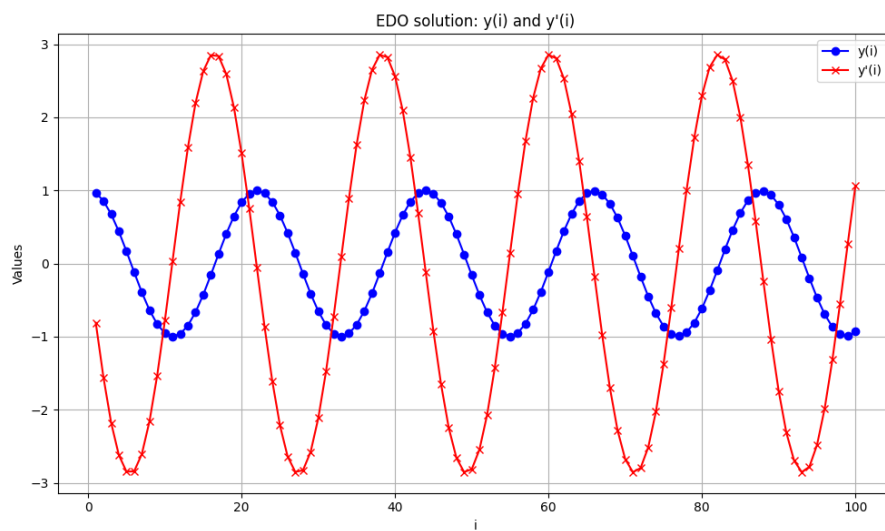


Figura 3: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.1$

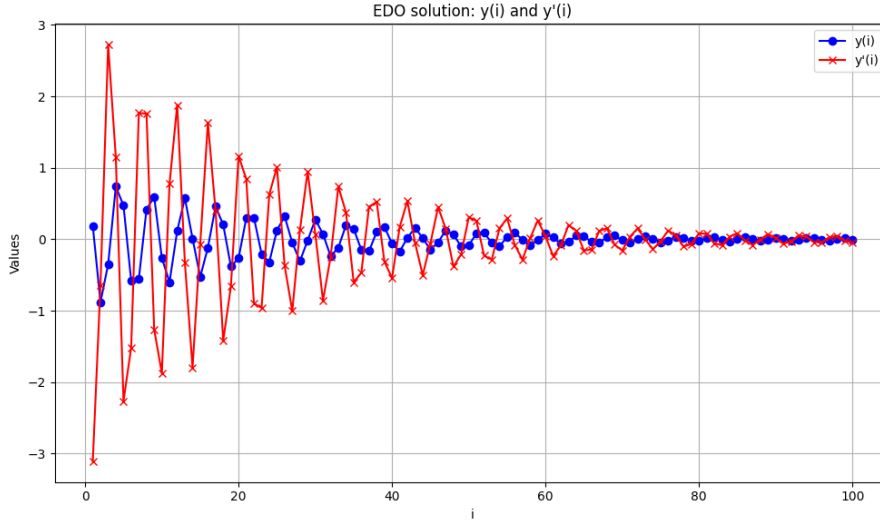


Figura 4: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.5$

Nota-se que para os valores de  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$  e  $h = 0.05$ , o resultado obtido são funções cossenoidais que oscilam de -1 a 1 o que corresponde ao comportamento esperado para a solução da equação diferencial dada. Além disso, as derivadas são funções senoidais que oscilam de  $-2\pi$  a  $2\pi$  o que também corresponde ao resultado esperado. Para o valor de  $h = 0.5$ , o resultado obtido não é satisfatório, pois a função não é cossenoidal e a derivada não é senoidal, o que indica que o valor de  $h = 0.5$  é muito grande para o algoritmo de Runge-Kutta.

## 2 The Numerov Algorithm

### 2.1 Exercício 3

Tarefa: Resolva a equação

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = -4\pi^2 y(x)$$

com as condições iniciais  $y(0) = 1$  e  $y'(0) = 0$  usando o algoritmo de Numerov. Explique como foram escolhidos os valores iniciais  $y_0$  e  $y_1$ . Compare o resultado com a solução obtida no exercício anterior.

O código foi compilado com o comando:

```
gfortran L3-5255417-ex-3.f90 -o L3-5255417-ex-3.exe
```

Os resultados do código foram salvos em `results.txt`.

Resultados:

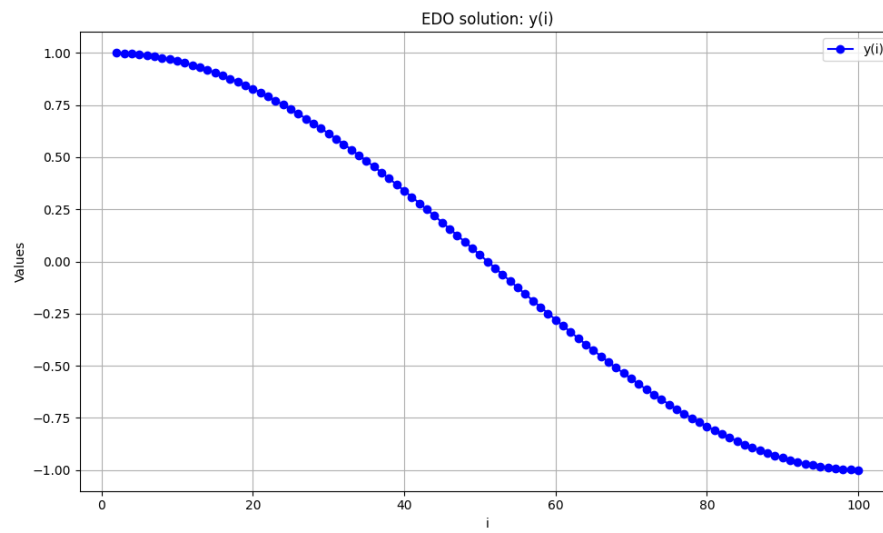


Figura 5: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.01$

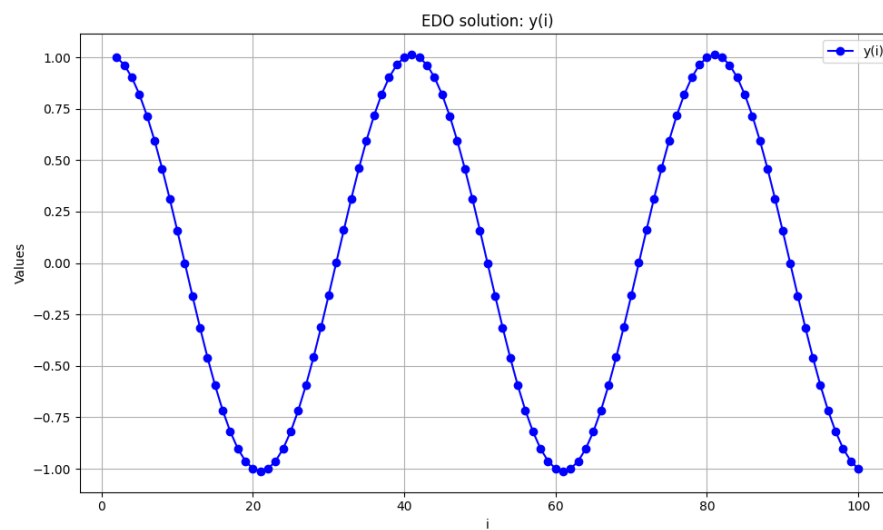


Figura 6: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.05$



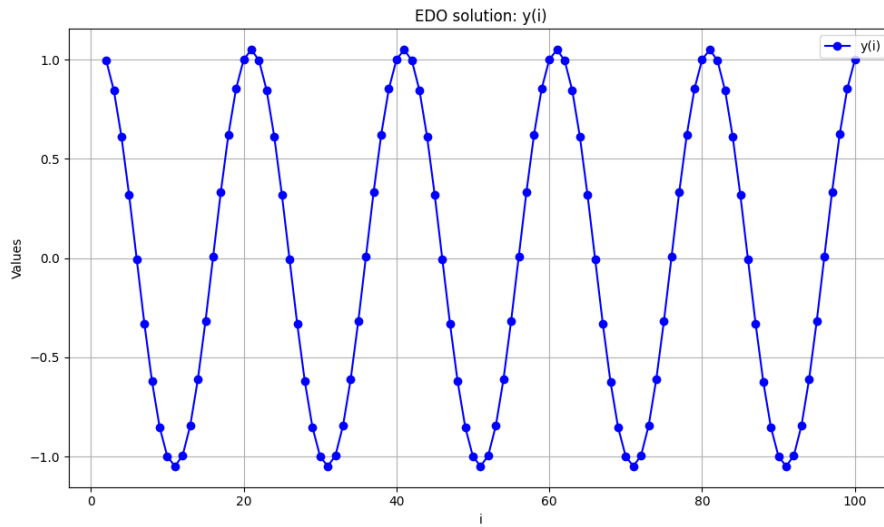


Figura 7: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.1$

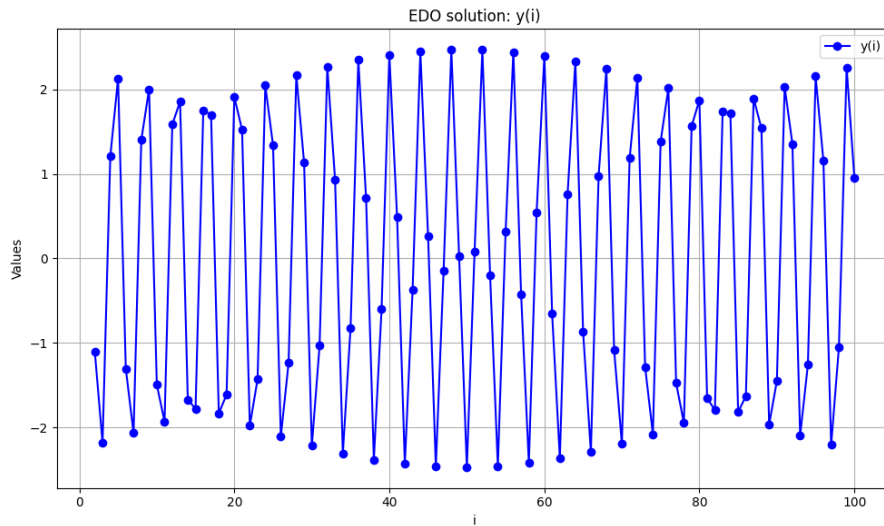


Figura 8: Gráficos de  $y(x)$  e  $y'(x)$  com  $h = 0.5$

Nota-se que para os valores de  $h = 0.1$ ,  $h = 0.01$  e  $h = 0.05$ , o resultado obtido são funções cossenoiais que oscilam de -1 a 1 o que corresponde ao comportamento esperado para a solução da equação diferencial. Para o valor de  $h = 0.5$ , o resultado obtido não é satisfatório, pois a função não é cossenoial, o que indica que o valor de  $h = 0.5$  é muito grande para o algoritmo de Numerov.