

Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Lista 3

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Abril de 2025

Sumário

1	Runge-Kutta Methods	2
1.1	Exercício 1	2
1.2	Exercício 2	4
2	The Numerov Algorithm	6
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

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

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.

Código Escrito:

```

1  ! -----
2  ! File: L2-5255417-ex-3.f90
3  !
4  ! Description:
5  !   Solve second order differential equation using Runge-Kutta
6  !   method
7  !
8  ! Dependencies:
9  !   - None
10 !
11 ! Since:
12 !   - 03/2025
13 !
14 ! Authors:
15 !   - Pedro C. Delbem <pedrodelbem@usp.br>
16 ! -----
17 program Runge_Kutta
18
19   !deactivate implicit typing
20   implicit none
21
22   !declare parameters
23   integer, parameter :: n = 100
24   real, parameter :: lambda = -4.0*(2.0*atan(1.0))**2.0
25   real, parameter :: h = 0.1
26
27   !declare variables
28   integer :: i
29   real y(0:n), v(0:n), k1, k2, k3, k4, l1, l2, l3, l4
30
31   !initialize y and v

```

```

31 y(0) = 1.0
32 v(0) = 0.0
33
34 !compute Runge-Kutta method
35 do i = 0, n-1
36
37     !compute coefficients
38     k1 = v(i)
39     l1 = h*y(i)
40     k2 = v(i) + h*l1/2.0
41     l2 = lambda*(y(i) + h*k1/2.0)
42     k3 = v(i) + h*l2/2.0
43     l3 = lambda*(y(i) + h*k2/2.0)
44     k4 = v(i) + h*l3
45     l4 = lambda*(y(i) + h*k3)
46
47     !update y and v
48     y(i+1) = y(i) + h*(k1 + 2.0*k2 + 2.0*k3 + k4)/6.0
49     v(i+1) = v(i) + h*(l1 + 2.0*l2 + 2.0*l3 + l4)/6.0
50
51 end do
52
53 !print results
54 open(1, file='results.txt', status='replace')
55 write(1,*) 'i', 'y(i)', 'v(i)'
56 do i = 0, n
57     write(1,*) i, y(i), v(i)
58 end do
59 close(1)
60
61 end program Runge_Kutta

```

Resultados:

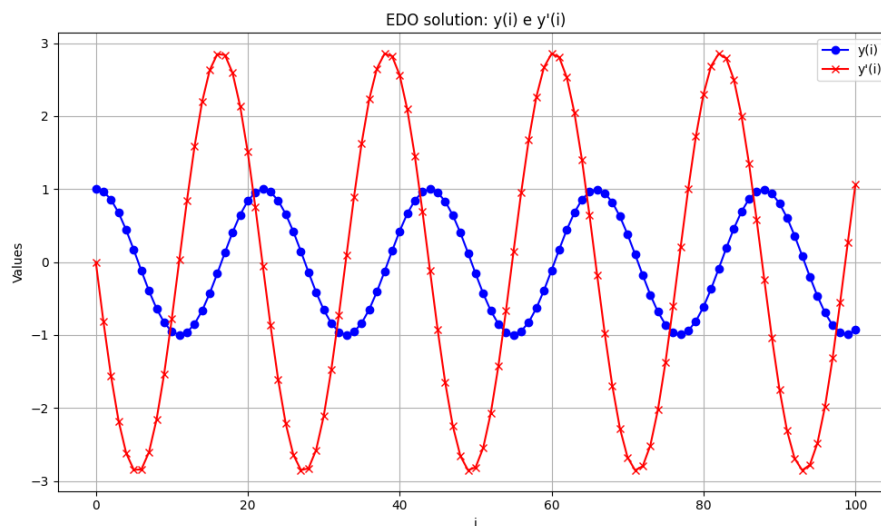


Figura 1: Gráficos de $y(x)$ e $y'(x)$

Nota-se claramente que $y(x) = \cos(2\pi x)$ e $y'(x) = -2\pi \sin(2\pi x)$, o que confirma a solução da equação diferencial.

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 $y(x = 0) = 0$ e $y'(x = 0) = 0$ 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.

Código Escrito: