

# Matemática Numérica II

Pedro H A Konzen

19 de agosto de 2023

# Licença

Este trabalho está licenciado sob a Licença Atribuição-CompartilhaIgual 4.0 Internacional Creative Commons. Para visualizar uma cópia desta licença, visite [http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.pt\\_BR](http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.pt_BR) ou mande uma carta para Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

# Prefácio

Nestas notas de aula são abordados temas introdutórios de matemática numérica. Como ferramenta computacional de apoio didático, apresentam-se códigos em `Python`.

Agradeço a todos e todas que de modo assíduo ou esporádico contribuem com correções, sugestões e críticas. :)

Pedro H A Konzen

# Conteúdo

<b>Capa</b>	<b>i</b>
<b>Licença</b>	<b>ii</b>
<b>Prefácio</b>	<b>iii</b>
<b>Sumário</b>	<b>vi</b>
<b>1 Derivação</b>	<b>1</b>
1.1 Derivadas de Primeira Ordem . . . . .	1
1.1.1 Diferenças Finitas por Polinômio de Taylor . . . . .	3
1.2 Derivadas de Segunda Ordem . . . . .	9
1.3 Diferenças Finitas por Polinômios Interpoladores . . . . .	12
1.3.1 Fórmulas de dois pontos . . . . .	13
1.3.2 Fórmulas de cinco pontos . . . . .	15
<b>2 Técnicas de extrapolação</b>	<b>17</b>
2.1 Extrapolação de Richardson . . . . .	17
2.1.1 Sucessivas extrapolações . . . . .	22
2.1.2 Exercícios . . . . .	23
<b>3 Integração</b>	<b>25</b>
3.1 Regras de Newton-Cotes . . . . .	25
3.1.1 Regras de Newton-Cotes Fechadas . . . . .	26
3.1.2 Regras de Newton-Cotes Abertas . . . . .	30
3.1.3 Exercício . . . . .	31
3.2 Regras Compostas de Newton-Cotes . . . . .	33
3.2.1 Regra Composta do Ponto Médio . . . . .	34

3.2.2	Regra Composta do Trapézio . . . . .	36
3.2.3	Regra Composta de Simpson . . . . .	37
3.3	Quadratura de Romberg . . . . .	40
3.4	Grau de Exatidão . . . . .	42
3.4.1	Regra do Ponto Médio . . . . .	42
3.4.2	Regra de Simpson . . . . .	43
3.4.3	Exercícios . . . . .	45
3.5	Quadratura Gauss-Legendre . . . . .	46
3.5.1	Intervalos de integração arbitrários . . . . .	52
3.5.2	Exercícios . . . . .	54
3.6	Quadraturas gaussianas com pesos . . . . .	55
3.6.1	Quadratura de Gauss-Chebyshev . . . . .	56
3.6.2	Quadratura de Gauss-Laguerre . . . . .	57
3.6.3	Quadratura de Gauss-Hermite . . . . .	58
3.7	Método de Monte Carlo . . . . .	61
<b>4</b>	<b>Problema de Valor Inicial</b>	<b>63</b>
4.1	Método de Euler . . . . .	63
4.1.1	Análise Numérica . . . . .	67
4.1.2	Sistemas de Equações . . . . .	72
4.1.3	Equações de Ordem Superior . . . . .	75
4.1.4	Exercícios . . . . .	77
4.2	Métodos de Taylor de Alta Ordem . . . . .	79
4.2.1	Análise Numérica . . . . .	82
4.2.2	Exercícios . . . . .	84
4.3	Métodos de Runge-Kutta . . . . .	85
4.3.1	Métodos de Runge-Kutta de ordem 2 . . . . .	86
4.3.2	Método de Runge-Kutta de ordem 4 . . . . .	91
4.3.3	Exercícios . . . . .	92
4.4	Método de Euler Implícito . . . . .	94
4.4.1	Análise Numérica . . . . .	96
4.4.2	Exercícios . . . . .	98
4.5	Métodos de Passo Múltiplo . . . . .	100
4.5.1	Métodos de Adams-Bashforth . . . . .	100
4.5.2	Métodos de Adams-Moulton . . . . .	105
4.5.3	Exercícios . . . . .	108
4.6	Método adaptativo com controle de erro . . . . .	110
4.6.1	Exercícios . . . . .	113

<b>5</b>	<b>Problema de Valor de Contorno</b>	<b>114</b>
5.1	Método de Diferenças Finitas . . . . .	114
5.1.1	Exercícios . . . . .	119
5.2	Método de Elementos Finitos . . . . .	121
5.2.1	Exercícios . . . . .	126
5.3	Método de Volumes Finitos . . . . .	128
5.3.1	Exercícios . . . . .	132
5.4	Problemas Não-Lineares . . . . .	133
5.4.1	Exercícios . . . . .	138
<b>6</b>	<b>Equações Diferenciais Parciais</b>	<b>140</b>
6.1	Equação de Poisson . . . . .	140
6.2	Equação do calor . . . . .	146
6.3	Equação da onda . . . . .	151
	<b>Respostas dos Exercícios</b>	<b>157</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>165</b>

# Capítulo 1

## Derivação

Neste capítulo, estudamos os métodos fundamentais de derivação numérica de funções.

### 1.1 Derivadas de Primeira Ordem

A derivada de uma função  $f$  num ponto  $x$  é, por definição,

$$f'(x) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (1.1)$$

Assim sendo e assumindo  $h > 0$ <sup>1</sup> próximo de zero, temos que  $f'(x)$  pode ser aproximada pela fórmula de diferenças finitas

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (1.2a)$$

$$=: D_h f(x). \quad (1.2b)$$

Geometricamente, isto é análogo a aproximar a declividade da reta tangente ao gráfico da função  $f$  no ponto  $(x, f(x))$  pela declividade da reta secante ao gráfico da função  $f$  pelos pontos  $(x, f(x))$  e  $(x+h, f(x+h))$  (consulte a Figura 1.1).

<sup>1</sup>Para fixar notação, assumiremos  $h > 0$  ao longo deste capítulo.

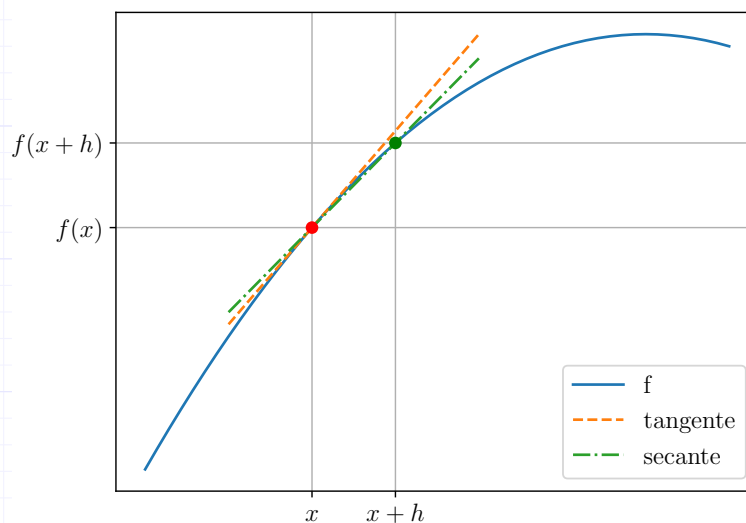


Figura 1.1: Interpretação geométrica da aproximação da derivada pela razão fundamental.

**Exemplo 1.1.1.** A derivada de  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $\pi/3$  é  $f'(\pi/3) = \cos(\pi/3) = 0.5$ . Agora, usando a aproximação pela fórmula de diferenças finitas (1.2), temos

$$f' \left( \frac{\pi}{3} \right) \approx D_h f \left( \frac{\pi}{3} \right) \quad (1.3a)$$

$$= \frac{f \left( \frac{\pi}{3} + h \right) - f \left( \frac{\pi}{3} \right)}{h} \quad (1.3b)$$

$$= \frac{\sin \left( \frac{\pi}{3} + h \right) - \sin \left( \frac{\pi}{3} \right)}{h}. \quad (1.3c)$$

Na Tabela 1.1 temos os valores desta aproximação para diferentes escolhas do passo  $h$ .



Tabela 1.1: Valores aproximados da derivada de  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $x = \pi/3$  usando a fórmula de diferenças finitas (1.2).

$h$	$Df(\pi/3)$
$10^{-1}$	4.55902e-1
$10^{-2}$	4.95662e-1
$10^{-3}$	4.99567e-1
$10^{-5}$	4.99996e-1
$10^{-7}$	5.00000e-1
$10^{-10}$	5.00000e-1

```

1 import numpy as np
2
3 def dfdx(f, x, h=1e-7):
4     df = (f(x+h) - f(x))/h
5     return df
6
7 f = lambda x: np.sin(x)
8 x = np.pi/3
9 h = 1e-7
10 dfdx = dfdx(f, x, h)

```

### 1.1.1 Diferenças Finitas por Polinômio de Taylor

Vamos estudar o desenvolvimento de **fórmulas de diferenças finitas** via polinômios de Taylor.

#### Fórmula de Diferenças Finitas Progressiva de Ordem $h$

A aproximação por polinômio de Taylor de grau 1 de uma dada função  $f$  em torno no ponto  $x$  é

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + O(h^2). \quad (1.4)$$

Isolando  $f'(x)$ , obtemos

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h). \quad (1.5)$$

Isto nos fornece a chamada **fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h$**

$$D_{+,h}f(x) := \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (1.6)$$

Observemos que a ordem da fórmula se refere a do **erro de truncamento com respeito ao passo  $h$** .

**Exemplo 1.1.2.** Consideremos o problema de aproximar a derivada da função  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $\pi/3$ . Usando a fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h$  obtemos

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_{+,h}f(x) \quad (1.7a)$$

$$= \frac{f\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - f\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h} \quad (1.7b)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h}. \quad (1.7c)$$

Na Tabela 1.2 temos os valores desta aproximação para diferentes escolhas de  $h$ , bem como, o erro absoluto da aproximação de  $f'(\pi/3)$  por  $D_{+,h}f(\pi/3)$ .

Tabela 1.2: Resultados referente ao Exemplo 1.1.2.

$h$	$D_{+,h}f(\pi/3)$	$ f'(\pi/3) - D_{+,h}f(\pi/3) $
$10^{-1}$	4.55902e-1	4.4e-2
$10^{-2}$	4.95662e-1	4.3e-3
$10^{-3}$	4.99567e-1	4.3e-4
$10^{-5}$	4.99996e-1	4.3e-6
$10^{-10}$	5.00000e-1	4.1e-8

Código 1.1: dfp\_h.py

```

1 import numpy as np
2
3 def dfp_h(f, x, h=1e-7):
4     df = (f(x+h) - f(x))/h
5     return df
6
7 f = lambda x: np.sin(x)
```

```

8 x = np.pi/3
9 h = 1e-1
10 dfdx = dfp_h(f, x, h)

```

**Observação 1.1.1. (Erro de Truncamento.)** No Exemplo 1.1.2, podemos observar que o erro absoluto na aproximação de  $f'(x)$  por  $D_{+,h}f(x)$  decresce conforme a ordem do erro de truncamento para valores moderados de  $h$  (consulte a Tabela 1.2). Agora, para valores de  $h$  muito pequenos (por exemplo,  $h = 10^{-10}$ ), o erro  $|f'(x) - D_{+,h}f(x)|$  não segue mais a tendência de decaimento na mesma ordem do de truncamento. Isto se deve a dominância dos erros de arredondamento para valores muito pequenos de  $h$ .

### Fórmula de Diferenças Finitas Regressiva de Ordem $h$

Substituindo  $h$  por  $-h$  no polinômio de Taylor de grau 1 (1.4), temos

$$f(x - h) = f(x) - hf'(x) + O(h^2), \quad (1.8)$$

donde obtemos a **fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h$**

$$D_{-,h}f(x) := \frac{f(x) - f(x - h)}{h}. \quad (1.9)$$

**Exemplo 1.1.3.** Consideremos o problema de aproximar a derivada da função  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $\pi/3$ . Usando a fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h$  obtemos

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_{-,h}f(x) \quad (1.10a)$$

$$= \frac{f\left(\frac{\pi}{3}\right) - f\left(\frac{\pi}{3} - h\right)}{h} \quad (1.10b)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3} - h\right)}{h}. \quad (1.10c)$$

Na Tabela 1.3 temos os valores desta aproximação para diferentes escolhas de  $h$ , bem como, o erro absoluto da aproximação de  $f'(\pi/3)$  por  $D_{-,h}f(\pi/3)$ .

Código 1.2: dfr\_h.py

```

1 import numpy as np

```

Tabela 1.3: Resultados referente ao Exemplo 1.1.3.

$h$	$D_{-,h}f(\pi/3)$	$ f'(\pi/3) - D_{-,h}f(\pi/3) $
$10^{-1}$	$5.42432e-1$	$4.2e-2$
$10^{-2}$	$5.04322e-1$	$4.3e-3$
$10^{-3}$	$5.00433e-1$	$4.3e-4$
$10^{-5}$	$5.00004e-1$	$4.3e-6$
$10^{-10}$	$5.00000e-1$	$4.1e-8$

```

2
3 def dfr_h(f, x, h=1e-7):
4     df = (f(x) - f(x-h))/h
5     return df
6
7 f = lambda x: np.sin(x)
8 x = np.pi/3
9 h = 1e-1
10 dfdx = dfr_h(f, x, h)

```

### Fórmula de Diferenças Finitas Central de Ordem $h^2$

Usando o polinômio de Taylor de grau 2 para aproximar a função  $f(x)$  em torno de  $x$ , temos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + O(h^3) \quad (1.11)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + O(h^3). \quad (1.12)$$

Então, subtraindo esta segunda equação da primeira, temos

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + O(h^3). \quad (1.13)$$

Então, isolando  $f'(x)$ , obtemos

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2), \quad (1.14)$$

Isto nos fornece a chamada **fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$**

$$D_{0,h^2}f(x) := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \quad (1.15)$$

**Exemplo 1.1.4.** Consideremos o problema de aproximar a derivada da função  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $\pi/3$ . Usando a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  obtemos

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_{0,h^2}f(x) \quad (1.16a)$$

$$= \frac{f\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - f\left(\frac{\pi}{3} - h\right)}{2h} \quad (1.16b)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3} - h\right)}{2h}. \quad (1.16c)$$

Na Tabela 1.4 temos os valores desta aproximação para diferentes escolhas de  $h$ , bem como, o erro absoluto da aproximação de  $f'(\pi/3)$  por  $D_{0,h^2}f(\pi/3)$ .

Tabela 1.4: Resultados referente ao Exemplo 1.1.4.

$h$	$D_{0,h^2}f(\pi/3)$	$ f'(\pi/3) - D_{0,h^2}f(\pi/3) $
$10^{-1}$	4.99167e-1	8.3e-04
$10^{-2}$	4.99992e-1	8.3e-06
$10^{-3}$	5.00000e-1	8.3e-08
$10^{-5}$	5.00000e-1	8.3e-10
$10^{-10}$	5.00000e-1	7.8e-12

Código 1.3: dfc\_h2.py

```

1 import numpy as np
2
3 def dfc_h2(f, x, h=1e-7):
4     df = (f(x+h) - f(x-h))/(2*h)
5     return df
6
7 f = lambda x: np.sin(x)
8 x = np.pi/3
9 h = 1e-1
10 dfdx = dfc_h2(f, x, h)
```

## Exercícios

**Exercício 1.1.1.** Considere a função  $f(x) = \cos(x)$ . Use a fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h$  para computar a aproximação de  $f'(\pi/3)$  com 5 dígitos significativos corretos.

**Exercício 1.1.2.** Considere a função  $f(x) = \cos(x)$ . Use a fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h$  para computar a aproximação de  $f'(\pi/3)$  com 5 dígitos significativos corretos.

**Exercício 1.1.3.** Considere a função  $f(x) = \cos(x)$ . Use a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  para computar a aproximação de  $f'(\pi/3)$  com 5 dígitos significativos corretos.

**Exercício 1.1.4.** Calcule aproximações da derivada de

$$f(x) = \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (1.17)$$

no ponto  $x = 2.5$  dadas pelas seguintes fórmulas de diferenças finitas com  $h = 10^{-2}$ :

- a) progressiva de ordem  $h$ .
- b) regressiva de ordem  $h$ .
- c) central de ordem  $h^2$ .

**Exercício 1.1.5.** Considere a seguinte tabela de pontos

$i$	$x_i$	$y_i$
1	2.0	1.86
2	2.1	1.90
3	2.2	2.01
4	2.3	2.16
5	2.4	2.23
6	2.5	2.31

Calcule aproximações de  $dy/dx$  usando diferenças finitas centrais de ordem  $h^2$  quando possível e, caso contrário, diferenças finitas progressiva ou regressiva conforme o caso.

**Exercício 1.1.6.** Use uma combinação de polinômios de Taylor de grau 2 para desenvolver a fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h^2$

$$D_{+,h^2}(x) := \frac{1}{2h} [-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)]. \quad (1.18)$$

Então, aplique-a para computar  $f'(\pi/3)$  com  $f(x) = \sin(x)$  e verifique o comportamento do erro  $|D_{+,h^2}(\pi/3) - f'(\pi/3)|$  em relação à ordem de truncamento da fórmula.

**Exercício 1.1.7.** Use uma combinação de polinômios de Taylor de grau 2 para desenvolver a fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h^2$

$$D_{-,h^2}(x) := \frac{1}{2h} [3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)]. \quad (1.19)$$

Então, aplique-a para computar  $f'(\pi/3)$  com  $f(x) = \sin(x)$  e verifique o comportamento do erro  $|D_{-,h^2}(\pi/3) - f'(\pi/3)|$  em relação à ordem de truncamento da fórmula.

**Exercício 1.1.8.** Refaça as computações do Exercício 1.1.5 usando fórmulas de diferenças finitas de ordem  $h^2$  para todos os pontos.

## 1.2 Derivadas de Segunda Ordem

Diferentemente do usual em técnicas analíticas, no âmbito da matemática numérica é preferível obter aproximações diretas de derivadas de segunda ordem, em vez de utilizar aproximações sucessivas de derivadas. Na sequência, desenvolvemos e aplicaremos uma fórmula de diferenças finitas central para a aproximação de derivadas de segunda ordem.

Consideremos os seguintes polinômios de Taylor<sup>2</sup> de grau 3 de  $f(x)$  em torno do ponto  $x$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4), \quad (1.20)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4). \quad (1.21)$$

<sup>2</sup>Brook Taylor, 1685 - 1731, matemático britânico. Fonte: [Wikipédia](#).

$$(1.22)$$

Somando estas duas equações, obtemos

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + O(h^4). \quad (1.23)$$

Então, isolando  $f''(x)$  temos

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2). \quad (1.24)$$

Isto nos leva a definição da **fórmula de diferenças finitas de ordem  $h^2$  para a derivada segunda**

$$D_{0,h^2}^2 f(x) := \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \quad (1.25)$$

**Exemplo 1.2.1.** Consideramos o problema de computar a derivada segunda de  $f(x) = x^2 + \sin x$  no ponto  $x = \pi/6$ . Analiticamente,  $f''(\pi/6) = 2 - \sin(\pi/6) = 1,5$ . Numericamente, vamos explorar as seguintes duas aproximações:

- a) Aplicação de sucessivas diferenças finitas centrais de ordem  $h^2$  para derivada primeira, i.e.

$$f''(x) \approx D_{0,h^2} D_{0,h^2} f(x) \quad (1.26a)$$

$$= \frac{D_{0,h^2} f(x+h) - D_{0,h^2} f(x-h)}{2h} \quad (1.26b)$$

- b) Aplicação da fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  para a derivada segunda, i.e.

$$f''(x) \approx D_{0,h^2}^2 f(x) \quad (1.27a)$$

$$= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \quad (1.27b)$$

Na Tabela 1.5 temos os valores computados em ambos os casos e seus respectivos erros absolutos para diversas escolhas de  $h$ . Observamos que a aplicação da diferença finita  $D_{0,h^2}^2$  fornece resultados mais precisos (para



Tabela 1.5: Resultados referente ao Exemplo 1.2.1. Notação:  $\delta_{DD} := |f''(\pi/6) - D_{0,h^2}D_{0,h^2}f(\pi/6)|$  e  $\delta_{D^2} := |f''(\pi/6) - D_{0,h^2}^2f(\pi/6)|$ .

$h$	$D_{0,h^2}D_{0,h^2}f(\pi/6)$	$\delta_{DD}$	$D_{0,h^2}^2f(\pi/6)$	$\delta_{D^2}$
$10^{-1}$	1.50166	$1.7e-03$	1.50042	$4.2e-04$
$10^{-2}$	1.50002	$1.7e-05$	1.50000	$4.2e-06$
$10^{-3}$	1.50000	$1.7e-07$	1.50000	$4.2e-08$
$10^{-5}$	1.50000	$1.2e-07$	1.50000	$1.2e-07$

valores moderados de  $h$ ) do que as sucessivas aplicações de  $D_{0,h^2}$ . De fato, uma rápida inspeção de (1.26) mostra que

$$D_{0,h^2}D_{0,h^2}f(x) = \underbrace{\frac{f(x+2h) - 2f(x) + f(x-2h)}{4h^2}}_{D_{0,(2h)^2}^2f(x)}. \quad (1.28)$$

Código 1.4: d2fc\_h2.py

```

1 import numpy as np
2
3 def d2fc_h2(f, x, h=1e-7):
4     df = (f(x+h) - 2*f(x) + f(x-h))/h**2
5     return df
6
7 f = lambda x: x**2 + np.sin(x)
8 x = np.pi/6
9 h = 1e-1
10 d2fdx2 = d2fc_h2(f, x, h)
11 print(f'{h}: d2fdx2 = {d2fdx2:.5e}, erro = {np.fabs(d2fdx2-1.5):.1e}')
```

## Exercícios

**Exercício 1.2.1.** Use a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  para computar aproximações da segunda derivada de

$$f(x) = \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (1.29)$$

no ponto  $x = 2,5$ . Para tanto, use os passos

### 1.3. DIFERENÇAS FINITAS POR POLINÔMIOS INTERPOLADORES

a)  $h = 10^{-1}$

b)  $h = 10^{-2}$

c)  $h = 10^{-3}$

d)  $h = 10^{-4}$

Por fim, com base nos resultados obtidos, qual foi o maior passo que forneceu a aproximação com precisão de pelo menos 5 dígitos significativos? Justifique sua resposta.

**Exercício 1.2.2.** Considere a função  $f(x) = e^x \ln(x+1) - x$ . Use a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  para computar a aproximação de  $f'''(1)$  com 6 dígitos significativos corretos.

**Exercício 1.2.3.** Considere a seguinte tabela de pontos

$i$	1	2	3	4	5	6
$x_i$	2,0	2,1	2,2	2,3	2,4	2,5
$y_i$	1,86	1,90	2,01	2,16	2,23	2,31

Calcule a aproximação  $d^2y/dx^2$  no ponto  $x = 2,2$  usando a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$ .

## 1.3 Diferenças Finitas por Polinômios Interpoladores

Vamos estudar como obter fórmulas de diferenças finitas por polinômios interpoladores. Seja  $p(x)$  o **polinômio interpolador** dos pontos  $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^{n+1}$  de uma dada função  $f(x)$ , com  $x_1 < x_2 < \dots < x_{n+1}$ . Então, pelo teorema de Lagrange temos

$$f(x) = p(x) + R_{n+1}(x), \quad (1.30)$$

onde  $R(x)$  é o erro na aproximação de  $f(x)$  por  $p(x)$  e tem a forma

$$R_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=1}^{n+1} (x - x_j). \quad (1.31)$$

onde  $\xi = \xi(x)$ .

Deste modo, a ideia para obtermos as fórmulas de diferenças é aproximarmos  $f'(x)$  por  $p'(x)$ . Entretanto, isto nos coloca a questão de estimarmos o erro  $|f'(x) - p'(x)|$ . Por sorte temos o seguinte teorema.

**Teorema 1.3.1.** *Seja  $p(x)$  o polinômio interpolador de uma dada função  $f(x)$  pelo pontos  $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^{n+1}$ , com  $x_1 < x_2 < \dots < x_{n+1}$ . Se  $f(x)$  é  $(n+1)$  continuamente diferenciável, então o resíduo  $R_{n+1}^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - p^{(k)}(x)$  é*

$$R_{n+1}^{(k)} = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1-k)!} \prod_{j=1}^{n+1-k} (x - \xi_j), \quad (1.32)$$

onde  $\xi_j$  é um ponto tal que  $x_j < \xi_j < x_{j+k}$ ,  $j = 1, 2, \dots, n+1+k$ , e  $\eta = \eta(x)$  é algum ponto no intervalo de extremos  $x$  e  $\xi_j$ .

*Demonstração.* Veja [3, Ch.6, Sec.5]. □

### 1.3.1 Fórmulas de dois pontos

Para obtermos fórmulas de diferenças finitas de dois pontos consideramos  $p(x)$  o polinômio interpolador de Lagrange de  $f(x)$  pelos pontos  $(x_1, f(x_1))$  e  $(x_2, f(x_2))$ , com  $x_1 < x_2$ , i.e.

$$f(x) = p(x) + R_2(x) \quad (1.33)$$

$$= f(x_1) \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + f(x_2) \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} + R_2(x). \quad (1.34)$$

Denotando  $h = x_2 - x_1$ , temos

$$f(x) = f(x_1) \frac{x - x_2}{-h} + f(x_2) \frac{x - x_1}{h} + R_2(x). \quad (1.35)$$

e, derivando com respeito a  $x$

$$f'(x) = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h} + R_2^{(1)}(x), \quad (1.36)$$

onde  $R_2^{(1)}(x)$  é dado conforme o Teorema 1.3.1.

### 1.3. DIFERENÇAS FINITAS POR POLINÔMIOS INTERPOLADORES

Agora, escolhendo  $x = x_1$ , temos  $x_2 = x_1 + h = x + h$  e, obtemos a **fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h$**

$$f(x) = \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x)}{h}}_{D_{+,h}f(x)} + O(h). \quad (1.37)$$

Se escolhermos  $x = x_2$ , temos  $x_1 = x_2 - h = x - h$ , obtemos a **fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h$**

$$f(x) = \underbrace{\frac{f(x) - f(x-h)}{h}}_{D_{-,h}f(x)} + O(h). \quad (1.38)$$

#### Fórmulas de três pontos

Para obtermos **fórmulas de diferenças finitas de três pontos** consideramos o polinômio interpolador de Lagrange de  $f(x)$  pelos pontos  $(x_1, f(x_1))$ ,  $(x_2, f(x_2))$  e  $(x_3, f(x_3))$ ,  $x_1 < x_2 < x_3$ , i.e.

$$f(x) = f(x_1) \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} \quad (1.39)$$

$$+ f(x_2) \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} \quad (1.40)$$

$$+ f(x_3) \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} + R_3(x). \quad (1.41)$$

Derivando em relação a  $x$ , obtemos

$$f'(x) = f(x_1) \frac{(x_2 - x_3)(2x - x_2 - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_2 - x_3)} \quad (1.42)$$

$$+ f(x_2) \frac{(x_1 - x_3)(-2x + x_1 + x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_2 - x_3)} \quad (1.43)$$

$$+ f(x_3) \frac{(x_1 - x_2)(2x - x_1 - x_2)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)(x_2 - x_3)} + R_3^{(1)}(x). \quad (1.44)$$

Aqui, **podemos escolher por obter fórmulas de diferenças com passo constante ou não**. Por exemplo, denotando  $h_1 = x_2 - x_1$  e  $h_2 = x_3 - x_2$  e

escolhendo  $x = x_1$ , temos  $x_2 = x + h_1$  e  $x_3 = x + h_1 + h_2$ . Fazendo estas substituições na expressão acima, obtemos seguinte fórmula de diferenças finitas progressiva

$$D_{+,h_1,h_2}f(x) = \frac{1}{h_1h_2(h_1+h_2)} (-h_2(2h_1+h_2)f(x) \quad (1.45)$$

$$+ (h_1+h_2)^2 f(x+h_1) \quad (1.46)$$

$$- h_1^2 f(x+h_1+h_2)). \quad (1.47)$$

Agora, assumindo um passo constante  $h = h_1 = h_2$ , obtemos a **fórmula de diferenças progressiva de ordem  $h^2$**

$$D_{+,h^2}f(x) = \frac{1}{2h} [-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)]. \quad (1.48)$$

Escolhendo  $x = x_2$ ,  $x_1 = x - h$  e  $x_3 = x + h$  na equação (1.42), obtemos a **fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$**

$$D_{0,h^2} = \frac{1}{2h} [f(x+h) - f(x-h)]. \quad (1.49)$$

Por fim, escolhendo  $x = x_3$ ,  $x_1 = x - 2h$  e  $x_2 = x - h$  na equação (1.42), obtemos a **fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h^2$**

$$D_{-,h^2} = \frac{1}{2h} [3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)]. \quad (1.50)$$

### 1.3.2 Fórmulas de cinco pontos

Aqui, usamos o polinômio interpolador de Lagrange da função  $f(x)$  pelos pontos  $(x_1, f(x_1))$ ,  $(x_2, f(x_2))$ ,  $(x_3, f(x_3))$  e  $(x_5, f(x_5))$ , com  $x_1 < x_2 < x_3 < x_4 < x_5$ . Isto nos fornece

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 f(x_i) \left( \prod_{j=1, j \neq i}^5 \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) + R_5(x). \quad (1.51)$$

Calculando a derivada em relação a  $x$ , temos

$$f'(x) = \sum_{i=1}^5 f(x_i) \left( \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^5 \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, k \neq j}}^5 \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right) + R_5^{(1)}(x). \quad (1.52)$$

### 1.3. DIFERENÇAS FINITAS POR POLINÔMIOS INTERPOLADORES

Por exemplo, substituindo  $x_1 = x - 2h$ ,  $x_2 = x - h$ ,  $x_3 = x$ ,  $x_4 = x + h$  e  $x_5 = x + 2h$  na equação acima, obtemos fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^4$

$$D_{+,h^4}f(x) := \frac{1}{12h} [f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)]. \quad (1.53)$$

#### Exercícios

**Exercício 1.3.1.** Use a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^4$  para computar a aproximação da derivada de

$$f(x) = \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (1.54)$$

no ponto  $x = 2,5$  com passo  $h = 0,1$ .

**Exercício 1.3.2.** Obtenha as seguintes fórmulas de diferenças finitas de 5 pontos com passo  $h$  constante e com:

- a) 4 pontos para frente.
- b) 1 ponto para trás e 3 pontos para frente.
- c) 2 pontos para trás e 2 pontos para frente.
- d) 3 pontos para trás e 1 pontos para frente.
- e) 4 pontos para trás.

**Exercício 1.3.3.** Considere a seguinte tabela de pontos

$i$	1	2	3	4	5	6
$x_i$	2,0	2,1	2,2	2,3	2,4	2,5
$y_i$	1,86	1,90	2,01	2,16	2,23	2,31

Calcule a aproximação  $dy/dx$  nos pontos tabelados usando as fórmulas de diferenças finitas obtidas no exercício anteriores (Exercício 1.3.2). Para tanto, dê preferência para fórmulas centrais sempre que possível.

## Capítulo 2

# Técnicas de extrapolação

[[tag:revisar]]

Neste capítulo, estudamos algumas técnicas de extrapolação, as quais serão usadas nos próximos capítulos.

### 2.1 Extrapolação de Richardson

[[tag:revisar]]

Seja  $F_1(h)$  uma aproximação de  $I$  tal que

$$I = F_1(h) + \underbrace{k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + O(h^4)}_{\text{erro de truncamento}}. \quad (2.1)$$

Então, dividindo  $h$  por 2, obtemos

$$I = F_1\left(\frac{h}{2}\right) + k_1 \frac{h}{2} + k_2 \frac{h^2}{4} + k_3 \frac{h^3}{8} + O(h^4). \quad (2.2)$$

Agora, de forma a eliminarmos o termo de ordem  $h$  das expressões acima, subtraímos (2.1) de 2 vezes (2.2), o que nos leva a

$$I = \underbrace{\left[ F_1\left(\frac{h}{2}\right) + \left( F_1\left(\frac{h}{2}\right) - F_1(h) \right) \right]}_{F_2(h)} - k_2 \frac{h^2}{2} - k_3 \frac{3h^3}{4} + O(h^4). \quad (2.3)$$

Ou seja, denotando

$$F_2(h) := F_1\left(\frac{h}{2}\right) + \left(F_1\left(\frac{h}{2}\right) - F_1(h)\right) \quad (2.4)$$

temos que  $N_2(h)$  é uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da ordem de  $h^2$ , uma ordem a mais de  $N_1(h)$ . Ou seja, esta combinação de aproximações de ordem de truncamento  $h$  nos fornece uma aproximação de ordem de truncamento  $h^2$ .

Analogamente, consideremos a aproximação de  $I$  por  $N_2(h/2)$ , *i.e.*

$$I = F_2\left(\frac{h}{2}\right) - k_2 \frac{h^2}{8} - k_2 \frac{3h^3}{32} + O(h^4) \quad (2.5)$$

Então, subtraindo (2.3) de 4 vezes (2.5) de, obtemos

$$I = \underbrace{\left[3F_2\left(\frac{h}{2}\right) + \left(F_2\left(\frac{h}{2}\right) - F_2(h)\right)\right]}_{F_3(h)} + k_3 \frac{3h^3}{8} + O(h^4). \quad (2.6)$$

Observemos, ainda, que  $N_3(h)$  pode ser reescrita na forma

$$F_3(h) = F_2\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F_2\left(\frac{h}{2}\right) - F_2(h)}{3}, \quad (2.7)$$

a qual é uma aproximação de ordem  $h^3$  para  $I$ .

Para fazermos mais um passo, consideramos a aproximação de  $I$  por  $F_3(h/2)$ , *i.e.*

$$I = F_3\left(\frac{h}{2}\right) + k_3 \frac{3h^3}{64} + O(h^4). \quad (2.8)$$

E, então, subtraindo (2.6) de 8 vezes (2.8), temos

$$I = \underbrace{\left[F_3\left(\frac{h}{2}\right) + \left(\frac{F_3\left(\frac{h}{2}\right) - F_3(h)}{7}\right)\right]}_{F_4(h)} + O(h^4). \quad (2.9)$$



Ou seja,

$$F_4(h) = \left[ F_3\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F_3\left(\frac{h}{2}\right) - F_3(h)}{7} \right] \quad (2.10)$$

é uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da ordem  $h^4$ . Estes cálculos nos motivam o seguinte teorema.

**Teorema 2.1.1.** *Seja  $F_1(h)$  uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da forma*

$$I - F_1(h) = \sum_{i=1}^n k_i h^i + O(h^{n+1}). \quad (2.11)$$

Então, para  $j \geq 2$ ,

$$F_j(h) := F_{j-1}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{F_{j-1}\left(\frac{h}{2}\right) - F_{j-1}(h)}{2^{j-1} - 1} \quad (2.12)$$

é uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da forma

$$I - F_j(h) = \sum_{i=j}^n (-1)^{j-1} \frac{(2^{i-1} - 1) \prod_{l=1}^{j-2} (2^{i-l-1} - 1)}{2^{(j-1)(i-j+1)} d_j} k_i h^i + O(h^{n+1}), \quad (2.13)$$

onde  $d_j$  é dado recursivamente por  $d_{j+1} = 2^{j-1} d_j$ , com  $d_2 = 1$ .

*Demonstração.* Fazemos a demonstração por indução. O resultado para  $j = 2$  segue de (2.3). Assumimos, agora, que vale

$$\begin{aligned} I - F_j(h) &= (-1)^{j-1} \frac{(2^{j-1} - 1) \prod_{l=1}^{j-2} (2^{j-l-1} - 1)}{2^{(j-1)} d_j} k_j h^j \\ &\quad + \sum_{i=j+1}^n (-1)^{j-1} \frac{(2^{i-1} - 1) \prod_{l=1}^{j-2} (2^{i-l-1} - 1)}{2^{(j-1)(i-j+1)} d_j} k_i h^i \\ &\quad + O(h^{n+1}). \end{aligned} \quad (2.14)$$

para  $j \geq 2$ . Então, tomamos

$$I - F_j\left(\frac{h}{2}\right) = (-1)^{j-1} \frac{(2^{j-1} - 1) \prod_{l=1}^{j-2} (2^{j-l-1} - 1)}{2^{(j-1)} d_j} k_j \frac{h^j}{2^j}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=j+1}^n (-1)^{j-1} \frac{(2^{i-1} - 1) \prod_{l=1}^{j-2} (2^{i-l-1} - 1)}{2^{(j-1)(i-j+1)} d_j} k_i \frac{h^i}{2^i} \\
& + O(h^{n+1}).
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Agora, subtraímos (2.14) de  $2^j$  vezes (2.15), o que nos fornece

$$\begin{aligned}
I &= \left[ F_j \left( \frac{h}{2} \right) + \frac{F_j \left( \frac{h}{2} \right) - F_j(h)}{2^j - 1} \right] \\
&+ \sum_{i=j+1}^n (-1)^{(j+1)-1} \frac{(2^{i-1} - 1) \prod_{l=1}^{(j+1)-2} (2^{i-l-1} - 1)}{2^{((j+1)-1)(i-(j+1)+1)} 2^{j-1} d_j} k_i h^i \\
&+ O(h^{n+1}).
\end{aligned} \tag{2.16}$$

□

**Corolário 2.1.1.** *Seja  $F_1(h)$  uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da forma*

$$I - F_1(h) = \sum_{i=1}^n k_i h^{2i} + O(h^{2n+2}). \tag{2.17}$$

Então, para  $j \geq 2$ ,

$$F_j(h) := F_{j-1} \left( \frac{h}{2} \right) + \frac{F_{j-1} \left( \frac{h}{2} \right) - F_{j-1}(h)}{4^{j-1} - 1} \tag{2.18}$$

é uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da forma

$$\begin{aligned}
I - F_j(h) &= \sum_{i=j}^n (-1)^{j-1} \frac{(4^{i-1} - 1) \prod_{l=1}^{j-2} (4^{i-l-1} - 1)}{4^{(j-1)(i-j+1)} d_j} k_i h^{2i} \\
&+ O(h^{n+1}),
\end{aligned} \tag{2.19}$$

onde  $d_j$  é dado recursivamente por  $d_{j+1} = 4^{j-1} d_j$ , com  $d_2 = 1$ .

*Demonstração.* A demonstração é análoga ao do Teorema 2.1.1. □

**Exemplo 2.1.1.** Dada uma função  $f(x)$ , consideremos sua aproximação por diferenças finitas progressiva de ordem  $h$ , i.e.

$$\underbrace{f'(x)}_I = \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x)}{h}}_{F_1(h)} + \frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + O(h^3). \quad (2.20)$$

Estão, considerando a primeira extrapolação de Richardson, temos

$$F_2(h) = F_1\left(\frac{h}{2}\right) + \left(F_1\left(\frac{h}{2}\right) - F_1(h)\right) \quad (2.21)$$

$$= 4 \frac{f(x+h/2) - f(x)}{h} - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (2.22)$$

$$= \frac{-f(x+h) + 4f(x+h/2) - 3f(x)}{h}, \quad (2.23)$$

a qual é a fórmula de diferenças finitas progressiva de três pontos com passo  $h/2$ , i.e.  $D_{+,(h/2)^2}f(x)$  (veja, Fórmula (1.48)).

**Exemplo 2.1.2.** Dada uma função  $f(x)$ , consideremos sua aproximação por diferenças finitas central de ordem  $h^2$ , i.e.

$$\underbrace{f'(x)}_I = \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}}_{F_1(h)} - \frac{f'''(x)}{6}h^2 - \frac{f^{(5)}(x)}{120}h^4 + O(h^6). \quad (2.24)$$

Estão, considerando a primeira extrapolação de Richardson, temos

$$F_2(h) = F_1\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{\left(F_1\left(\frac{h}{2}\right) - F_1(h)\right)}{3} \quad (2.25)$$

$$= \frac{1}{6h} [f(x-h) - 8f(x-h/2) + 8f(x+h/2) - f(x+h)] \quad (2.26)$$

a qual é a fórmula de diferenças finitas central de cinco pontos com passo  $h/2$ , i.e.  $D_{+,(h/2)^4}f(x)$  (veja, Fórmula (1.53)).

### 2.1.1 Sucessivas extrapolações

[[tag:revisar]]

Sucessivas extrapolações de Richardson podem ser computadas de forma robusta com o auxílio de uma tabela. Seja  $F_1(h)$  uma dada aproximação de uma quantidade de interesse  $I$  com erro de truncamento da forma

$$I - F_1(h) = k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + \cdots + k_n h^n + O(h^{n+1}). \quad (2.27)$$

Então, as sucessivas extrapolações  $F_2(h), F_3(h), \dots, F_n(h)$  podem ser organizadas na seguinte forma tabular

$$T = \begin{bmatrix} F_1(h) & & & & \\ F_1(h/2) & F_2(h) & & & \\ F_1(h/2^2) & F_2(h/2) & F_3(h) & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ F_1(h/2^n) & F_2(h/2^{n-1}) & F_3(h/2^{n-2}) & \cdots & F_n(h) \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

Desta forma, temos que

$$F_j\left(\frac{h}{2^{i-1}}\right) = t_{i,j-1} + \frac{t_{i,j-1} - t_{i-1,j-1}}{2^{j-1} - 1} \quad (2.29)$$

com  $j = 2, 3, \dots, n$  e  $j \geq i$ , onde  $t_{i,j}$  é o elemento da  $i$ -ésima linha e  $j$ -ésima coluna da matriz  $T$ .

**Exemplo 2.1.3.** Consideremos o problema de aproximar a derivada da função  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $\pi/3$ . Usando a fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h$  obtemos

$$\begin{aligned} f'\left(\frac{\pi}{3}\right) &= \underbrace{\frac{f\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - f\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h}}_{F_1(h) := D_{+,h}f(\pi/3)} \\ &\quad + \frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \cdots \end{aligned} \quad (2.30)$$

Na Tabela 2.1 temos os valores das aproximações de  $f'(\pi/3)$  computadas via sucessivas extrapolações de Richardson a partir de (2.30) com  $h = 0.1$ .

Tabela 2.1: Resultados referente ao Exemplo 2.1.3.

$O(h)$	$O(h^2)$	$O(h^3)$	$O(h^4)$
4,55902e-1			
4,78146e-1	5,00389e-1		
4,89123e-1	5,00101e-1	5,00005e-1	
4,94574e-1	5,00026e-1	5,00001e-1	5,00000e-1

**Exemplo 2.1.4.** Novamente, consideremos o problema de aproximar a derivada da função  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $\pi/3$ . A fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  tem a forma

$$f' \left( \frac{\pi}{3} \right) = \underbrace{\frac{f \left( \frac{\pi}{3} + h \right) - f \left( \frac{\pi}{3} - h \right)}{2h}}_{F_1(h) := D_{0,h^2} f(\pi/3)} - \frac{f'''(x)}{6} h^2 + \frac{f^{(5)}(x)}{120} h^4 - \dots \quad (2.31)$$

Na Tabela 2.2 temos os valores das aproximações de  $f'(\pi/3)$  computadas via sucessivas extrapolações de Richardson a partir de (2.31) com  $h = 1$ .

Tabela 2.2: Resultados referente ao Exemplo 2.1.4.

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
4,20735e-1			
4,79426e-1	4,98989e-1		
4,94808e-1	4,99935e-1	4,99998e-1	
4,98699e-1	4,99996e-1	5,00000e-1	5,00000e-1

## 2.1.2 Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 2.1.1.** Mostre que a primeira extrapolação de Richardson de

$$D_{-,h} f(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad (2.32)$$

é igual a

$$D_{-, (h/2)^2} f(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{h}. \quad (2.33)$$

**Exercício 2.1.2.** Considere o problema de aproximar a derivada de

$$f(x) = \frac{\text{sen}(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (2.34)$$

no ponto  $x = 2,5$ . Para tanto, use de sucessivas extrapolações de Richardson a partir da aproximação por diferenças finitas:

- a) progressiva de ordem  $h$ , com  $h = 0,5$ .
- b) regressiva de ordem  $h$ , com  $h = 0,5$ .
- c) central de ordem  $h^2$ , com  $h = 0,5$ .

Nas letras a) e b), obtenha as aproximações de ordem  $h^3$  e, na letra c) obtenha a aproximação de ordem  $h^6$ .

## Capítulo 3

# Integração

Neste capítulo, estudamos os métodos fundamentais para a **aproximação numérica de integrais definidas de funções** de uma variável real. São chamados de **quadraturas numéricas** e têm a forma

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) w_i, \quad (3.1)$$

onde  $x_i$  e  $w_i$  são, respectivamente, o  $i$ -ésimo **nodo** e o  $i$ -ésimo **peso da quadratura**,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

### 3.1 Regras de Newton-Cotes

Buscamos um método para a aproximação numérica da integral de uma dada função  $f(x)$  em um dado intervalo  $[a, b]$ , i.e.

$$I := \int_a^b f(x) dx. \quad (3.2)$$

A ideia das **Regras de Newton-Cotes** é aproximar  $I$  pela integral de um polinômio interpolador de  $f(x)$  por pontos previamente selecionados.

Seja,  $p(x)$  o **polinômio interpolador** de grau  $n$  de  $f(x)$  pelos dados pontos  $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^{n+1}$ , com  $x_1 < x_2 < \dots < x_{n+1}$  e  $x_i \in [a, b]$  para todo  $i = 1, 2, \dots, n+1$ . Então, pelo Teorema de Lagrange, temos

$$f(x) = p(x) + R_{n+1}(x), \quad (3.3)$$

onde

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n+1} f(x_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n+1} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (3.4)$$

e

$$R_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=1}^{n+1} (x - x_j), \quad (3.5)$$

para algum  $\xi = \xi(x)$  pertencente ao intervalo  $[x_1, x_{n+1}]$ . Deste modo, temos

$$I := \int_a^b f(x) \quad (3.6a)$$

$$= \int_a^b p(x) dx + \int_a^b R_{n+1}(x) dx \quad (3.6b)$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{n+1} f(x_i) \int_a^b \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n+1} \frac{(x - x_j)}{x_i - x_j} dx}_{\text{quadratura}} + \underbrace{\int_a^b R_{n+1}(x) dx}_{\text{erro de truncamento}} \quad (3.6c)$$

Ou seja, nas quadraturas (regras) de Newton-Cotes, os nodos são as abscissas dos pontos interpolados e os pesos são as integrais dos polinômios de Lagrange associados.

Na sequência, desenvolvemos as Regras de Newton-Cotes mais usuais e estimamos o erro de truncamento em cada caso<sup>1</sup>.

### 3.1.1 Regras de Newton-Cotes Fechadas

As Regras de Newton-Cotes Fechadas são aquelas em que a quadratura inclui os extremos do intervalo de integração.

<sup>1</sup>Consulte [3, Cap. 7, Sec. 1.1], para uma abordagem mais geral.



### Regra do Trapézio

A **Regra do Trapézio** é obtida tomando-se os nodos  $x_1 = a$  e  $x_2 = b$ . Então, denotando  $h := b - a$ <sup>2</sup>, os pesos da quadratura são:

$$w_1 = \int_a^b \frac{x - b}{a - b} dx \quad (3.7a)$$

$$= \frac{(b - a)}{2} = \frac{h}{2}. \quad (3.7b)$$

e

$$w_2 = \int_a^b \frac{x - a}{b - a} dx \quad (3.8a)$$

$$= \frac{(b - a)}{2} = \frac{h}{2}. \quad (3.8b)$$

Agora, estimamos o erro de truncamento com

$$R := \int_a^b R_2(x) dx \quad (3.9)$$

$$= \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2} (x - a)(x - b) dx \quad (3.10)$$

$$\leq C \left| \int_a^b (x - a)(x - b) dx \right| \quad (3.11)$$

$$= C \frac{(b - a)^3}{6} = O(h^3). \quad (3.12)$$

Portanto, a **Regra do Trapézio** é

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] + O(h^3). \quad (3.13)$$

**Exemplo 3.1.1.** Consideramos o problema de computar a integral de  $f(x) = xe^{-x^2}$  no intervalo  $[0, 1/4]$ . Analiticamente, temos

$$I = \int_0^{1/4} xe^{-x^2} dx \quad (3.14a)$$

$$= -\frac{e^{-x^2}}{2} \Big|_0^{1/4} \quad (3.14b)$$

<sup>2</sup>Neste capítulo,  $h$  é escolhido como a distância entre os nodos.

$$= \frac{1 - e^{-1/4}}{2} = 3,02935e-2. \quad (3.14c)$$

Agora, usando a Regra do Trapézio, obtemos a seguinte aproximação

$$I \approx \frac{h}{2} [f(0) + f(1/4)] \quad (3.15a)$$

$$= \frac{1/4}{2} \left( 0 + \frac{1}{4} e^{-(1/4)^2} \right) \quad (3.15b)$$

$$= 2,93567e-2. \quad (3.15c)$$

```

1 import numpy as np
2
3 # intervalo
4 a = 0.
5 b = 1./4
6 # fun
7 f = lambda x: x*np.exp(-x**2)
8 # quad
9 h = b-a
10 I = h/2*(f(a) + f(b))
11 print(f'I = {I:.5e}')
```

### Regra de Simpson

A Regra de Simpson é obtida escolhendo-se os nodos  $x_1 = a$ ,  $x_2 = (a + b)/2$  e  $x_3 = b$ . Denotando  $h := (b - a)/2$ , calculamos os pesos

$$w_1 = \int_a^b \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} dx \quad (3.16a)$$

$$= \frac{(b - a)}{6} = \frac{h}{3}, \quad (3.16b)$$

$$w_2 = \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} dx \quad (3.17a)$$

$$= 4 \frac{(b - a)}{6} = 4 \frac{h}{3} \quad (3.17b)$$

e

$$w_3 = \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} dx \quad (3.18)$$

$$= \frac{(b - a)}{6} = \frac{h}{3}. \quad (3.19)$$

Isto nos fornece a quadratura

$$I \approx \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \quad (3.20)$$

Para estimar o **erro de truncamento**, consideramos a expansão em polinômio de Taylor<sup>4</sup> de grau 3 de  $f(x)$  em torno do ponto  $x_2$ , i.e.

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_2) + f'(x_2)(x - x_2) \\ &\quad + \frac{f''(x_2)}{2}(x - x_2)^2 \\ &\quad + \frac{f'''(x_2)}{6}(x - x_2)^3 \\ &\quad + \frac{f^{(4)}(\xi_1(x))}{24}(x - x_2)^4, \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= 2hf(x_2) + \frac{h^3}{3}f''(x_2) \\ &\quad + \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi_1(x))(x - x_2)^4 dx. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Daí, usando da fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$ , temos

$$f''(x_2) = \frac{f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)}{h^2} + O(h^2). \quad (3.23)$$

O último termo de (3.22) pode ser estimado por

$$\left| \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi_1(x))(x - x_2)^4 dx \right| \leq C \left| \int_a^b (x - x_2)^4 dx \right| \quad (3.24a)$$

<sup>4</sup>Brook Taylor, 1685 - 1731, matemático britânico. Fonte: [Wikipédia](#).

$$= C(b-a)^5 = O(h^5). \quad (3.24b)$$

Então, de (3.22), (3.23) e (3.24), temos a **Regra de Simpson**

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] + O(h^5). \quad (3.25)$$

**Exemplo 3.1.2.** A aproximação da integral do Exemplo 3.1.1 pela a Regra de Simpson é

$$\int_0^{1/4} f(x) dx \approx \frac{1/8}{3} \left[ f(0) + 4f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{1}{4}\right) \right] \quad (3.26a)$$

$$= \frac{1}{24} \left[ \frac{1}{2} e^{-(1/8)^2} + \frac{1}{4} e^{-(1/4)^2} \right] \quad (3.26b)$$

$$= 3,02959e-2. \quad (3.26c)$$

```

1 import numpy as np
2
3 # intervalo
4 a = 0.
5 b = 1./4
6 # fun
7 f = lambda x: x*np.exp(-x**2)
8 # quad
9 h = (b-a)/2
10 I = h/3*(f(a) + 4*f((a+b)/2) + f(b))
11 print(f'I = {I:.5e}')
```

### 3.1.2 Regras de Newton-Cotes Abertas

As Regras de Newton-Cotes Abertas não incluem os extremos dos intervalos como nodos das quadraturas.

#### Regra do Ponto Médio

A Regra do Ponto Médio é obtida usando apenas o nodo  $x_1 = (a+b)/2$ . Desta forma, temos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b f(x_1) dx \\ &+ \int_a^b f'(\xi(x))(x - x_1) dx, \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde, denotando  $h := (b - a)$ , temos<sup>5</sup>

$$\int_a^b f(x) dx = hf\left(\frac{a+b}{2}\right) + O(h^3). \quad (3.28)$$

**Exemplo 3.1.3.** Aproximando a integral dada no Exemplo 3.1.1 pela a Regra do Ponto Médio, obtemos

$$\int_0^{1/4} f(x) dx \approx \frac{1}{4}f\left(\frac{1}{8}\right) \quad (3.29a)$$

$$= \frac{1}{32}e^{-(1/8)^2} \quad (3.29b)$$

$$= 3,07655e-2 \quad (3.29c)$$

```
1 import numpy as np
2
3 # intervalo
4 a = 0.
5 b = 1./4
6 # fun
7 f = lambda x: x*np.exp(-x**2)
8 # quad
9 h = b-a
10 I = h*f((a+b)/2)
11 print(f'I = {I:.5e}')
```

### 3.1.3 Exercício

**Exercício 3.1.1.** Aproxime

$$I = \int_{\pi/6}^{\pi/4} e^{-x} \cos(x) dx \quad (3.30)$$

pelas seguintes Regras de Newton-Cotes e compute o erro absoluto em relação ao valor exato:

a) Regra do Trapézio.

---

<sup>5</sup>Para a estimativa do erro de truncamento, consulte o Exercício 3.1.5.

- b) Regra de Simpson.  
c) Regra do Ponto Médio.

**Exercício 3.1.2.** Aproxime

$$\int_{-1}^0 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.31)$$

usando a:

- a) Regra do Ponto Médio.  
b) Regra do Trapézio.  
c) Regra de Simpson.

**Exercício 3.1.3.** Considere a seguinte tabela de pontos

$i$	$x_i$	$y_i$
1	2.0	1.86
2	2.1	1.90
3	2.2	2.01
4	2.3	2.16
5	2.4	2.23
6	2.5	2.31

Assumindo que  $y = f(x)$ , compute:

- a)  $\int_{2,1}^{2,3} f(x) dx$  usando a Regra do Ponto Médio.  
b)  $\int_{2,0}^{2,5} f(x) dx$  usando a Regra do Trapézio.  
c)  $\int_{2,0}^{2,4} f(x) dx$  usando a Regra de Simpson.

**Exercício 3.1.4.** Considere uma função  $y = f(x)$  com valores tabelados

como no Exercício 3.1.3. Observando que

$$\underbrace{\int_{2.0}^{2.4} f(x) dx}_{:=I} = \underbrace{\int_{2.0}^{2.2} f(x) dx}_{:=I_1} + \underbrace{\int_{2.2}^{2.4} f(x) dx}_{:=I_2} \quad (3.32)$$

compute, com a Regra de Simpson, as seguintes aproximações:

- a)  $\tilde{I} \approx I$ .
- b)  $\tilde{I}_1 \approx I_1$ .
- c)  $\tilde{I}_2 \approx I_2$ .
- d)  $\tilde{\tilde{I}} = \tilde{I}_1 + \tilde{I}_2$ .

Por fim, diga qual das aproximações  $\tilde{I}$  e  $\tilde{\tilde{I}}$  de  $I$  tem maior exatidão. Justifique sua proposta.

**Exercício 3.1.5.** Mostre que o erro de truncamento da regra do ponto médio é da ordem de  $h^3$ , onde  $h$  é o tamanho do intervalo de integração.

**Exercício 3.1.6.** Desenvolva a Regra de Newton-Cotes Aberta de 2 pontos e estime seu erro de truncamento.

## 3.2 Regras Compostas de Newton-Cotes

Regras de integração numérica compostas (ou **quadraturas compostas**) são aquelas obtidas da composição de quadraturas aplicadas aos subintervalos do intervalo de integração. Mais especificamente, a integral de uma dada função  $f(x)$  em um dado intervalo  $[a, b]$  pode ser reescrita como uma soma de integrais em sucessivos subintervalos de  $[a, b]$ , i.e.

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx, \quad (3.33)$$

onde  $a = x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+1} = b$ . Então, a aplicação de uma quadratura em cada integral em  $[x_i, x_{i+1}]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , nos fornece uma regra composta.

### 3.2.1 Regra Composta do Ponto Médio

Consideramos uma partição uniforme do intervalo de integração  $[a, b]$  da forma  $a = \tilde{x}_1 < \tilde{x}_2 < \cdots < \tilde{x}_{n+1} = b$ , com  $h = \tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Então, aplicando a regra do ponto médio a cada integral nos subintervalos  $[\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}]$ , temos

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{\tilde{x}_i}^{\tilde{x}_{i+1}} f(x) dx \quad (3.34)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left[ hf \left( \frac{\tilde{x}_i + \tilde{x}_{i+1}}{2} \right) + O(h^3) \right]. \quad (3.35)$$

Agora, observando que  $h := (b - a)/n$  e escolhendo os nodos

$$x_i = a + (i - 1/2)h, \quad (3.36)$$

$i = 1, 2, \dots, n$ , obtemos a **regra composta do ponto médio com  $n$  subintervalos**

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n hf(x_i) + O(h^2). \quad (3.37)$$

**Exemplo 3.2.1.** Consideramos o problema de computar a integral de  $f(x) = xe^{-x^2}$  no intervalo  $[0, 1]$ . Usando a regra composta do ponto médio com  $n$  subintervalos, obtemos a aproximação

$$\underbrace{\int_0^1 xe^{-x^2} dx}_I \approx \underbrace{\sum_{i=1}^n hf(x_i)}_S, \quad (3.38)$$

onde  $h = 1/n$  e  $x_i = (i - 1/2)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Na Tabela 3.1, temos as aproximações computadas com diversos números de subintervalos, bem como, seus erros absolutos.



Tabela 3.1: Resultados referentes ao Exemplo 3.2.1.

$n$	$S$	$ S - I $
1	3.89400e-1	7.3e-2
10	3.16631e-1	5.7e-4
100	3.16066e-1	5.7e-6
1000	3.16060e-1	5.7e-8

Código 3.1: pm\_comp.py

```

1 import numpy as np
2
3 def pm_comp(f, a, b, n):
4     h = (b-a)/n
5     S = 0.
6     for i in range(n):
7         x = a + (i+0.5)*h
8         S += f(x)
9     S *= h
10    return S
11
12 # intervalo
13 a = 0.
14 b = 1.
15 # integrando
16 def f(x):
17     return x*np.exp(-x**2)
18
19 # quad
20 n = 10
21 S = pm_comp(f, a, b, n)
22 # exata
23 I = 1./2 - np.exp(-1.)/2
24 # erro abs
25 print(f'{n}: {S:.5e}, {np.fabs(S-I):.1e}')
```

### 3.2.2 Regra Composta do Trapézio

Para obtermos a **regra composta do trapézio**, consideramos uma partição uniforme do intervalo de integração  $[a, b]$  da forma  $a = x_1 < x_2 < \dots < x_{n+1} = b$  com  $h = x_{i+1} - x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Então, aplicando a regra do trapézio em cada integração nos subintervalos, obtemos

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \quad (3.39a)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] + O(h^3) \right\} \quad (3.39b)$$

$$= \frac{h}{2} f(x_1) + \sum_{i=2}^n h f(x_i) + \frac{h}{2} f(x_{n+1}) + O(h^2). \quad (3.39c)$$

Desta forma, a **regra composta do trapézio com  $n$  subintervalos** é

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} \left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_i) + f(x_{n+1}) \right] + O(h^2), \quad (3.40)$$

onde  $h = (b - a)/n$  e  $x_i = a + (i - 1)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

**Exemplo 3.2.2.** Consideramos o problema de computar a integral de  $f(x) = xe^{-x^2}$  no intervalo  $[0, 1]$ . Usando a regra composta do trapézio com  $n$  subintervalos, obtemos a aproximação

$$\underbrace{\int_0^1 xe^{-x^2} dx}_I \approx \frac{h}{2} \underbrace{\left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_i) + f(x_{n+1}) \right]}_S, \quad (3.41)$$

onde  $h = 1/n$  e  $x_i = (i - 1)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Na Tabela 3.2, temos as aproximações computadas com diversos números de subintervalos, bem como, seus erros absolutos.

Tabela 3.2: Resultados referentes ao Exemplo 3.2.2.

$n$	$S$	$ S - I $
1	1.83940e-1	1.3e-1
10	3.14919e-1	1.1e-3
100	3.16049e-1	1.1e-5
1000	3.16060e-1	1.1e-7

Código 3.2: trap\_comp.py

```

1 import numpy as np
2
3 def trap_comp(f, a, b, n):
4     h = (b-a)/n
5     S = f(a)
6     for i in range(1,n):
7         x = a + i*h
8         S += 2*f(x)
9     S += f(b)
10    S *= h/2
11    return S

```

### 3.2.3 Regra Composta de Simpson

A fim de obtermos a **regra composta de Simpson**, consideramos uma partição uniforme do intervalo de integração  $[a, b]$  da forma  $a = \tilde{x}_1 < \tilde{x}_2 < \dots < \tilde{x}_{n+1} = b$ , com  $h = (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)/2$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Então, aplicando a regra de Simpson a cada integral nos subintervalos  $[\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}]$ , temos

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{\tilde{x}_i}^{\tilde{x}_{i+1}} f(x) dx \quad (3.42a)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{h}{3} \left[ f(\tilde{x}_i) + 4f\left(\frac{\tilde{x}_i + \tilde{x}_{i+1}}{2}\right) + f(\tilde{x}_{i+1}) \right] + O(h^5) \right\}. \quad (3.42b)$$

Então, observando que  $h = (b-a)/(2n)$  e tomando  $x_i = a + (i-1)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , obtemos a **regra composta de Simpson com  $n$  subintervalos**

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_{2i-1}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i}) + f(x_{n+1}) \right] + O(h^4) \quad (3.43)$$

**Exemplo 3.2.3.** Consideramos o problema de computar a integral de  $f(x) = xe^{-x^2}$  no intervalo  $[0, 1]$ . Usando a regra composta de Simpson com  $n$  subin-

tervalos, obtemos a aproximação

$$\underbrace{\int_0^1 x e^{-x^2} dx}_I \approx \underbrace{\frac{h}{3} \left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_{2i-1}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i}) + f(x_{n+1}) \right]}_S, \quad (3.44)$$

onde  $h = 1/(2n)$  e  $x_i = (i-1)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Na Tabela 3.3, temos as aproximações computadas com diversos números de subintervalos, bem como, seus erros absolutos.

Tabela 3.3: Resultados referentes ao Exemplo 3.2.3.

$n$	$S$	$ I - S $
1	3.20914e-1	4.9e-3
10	3.16061e-1	3.4e-7
100	3.16060e-1	3.4e-11
1000	3.16060e-1	4.2e-15

Código 3.3: simpson\_comp.py

```

1 import numpy as np
2
3 def simpson_comp(f, a, b, n):
4     h = (b-a)/(2*n)
5     S = f(a)
6     for i in range(1,n):
7         x = a + (2*i)*h
8         S += 2*f(x)
9     for i in range(0,n):
10        x = a + (2*i+1)*h
11        S += 4*f(x)
12    S += f(b)
13    S *= h/3
14    return S

```

## Exercícios

**Exercício 3.2.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^0 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.45)$$

usando a:

- a) regra composta do ponto médio com 10 subintervalos.
- b) regra composta do trapézio com 10 subintervalos.
- c) regra composta de Simpson com 10 subintervalos.

**Exercício 3.2.2.** Considere

$$I = \int_{\pi/6}^{\pi/4} e^{-x} \cos(x) dx \quad (3.46)$$

Para cada uma das seguintes quadraturas, compute a aproximação de  $I$  com 5 dígitos significativos corretos.

- a) regra composta do ponto médio.
- b) regra composta do trapézio.
- c) regra composta de Simpson.

**Exercício 3.2.3.** Considere a seguinte tabela de pontos

$i$	$x_i$	$y_i$
1	2.0	1.86
2	2.1	1.90
3	2.2	2.01
4	2.3	2.16
5	2.4	2.23
6	2.5	2.31

Assumindo que  $y = f(x)$ , e usando o máximo de subintervalos possíveis, calcule:

- a)  $\int_{2,0}^{2,4} f(x) dx$  usando a regra do ponto médio composta.

b)  $\int_{2,0}^{2,5} f(x) dx$  usando a regra do trapézio composta.

c)  $\int_{2,0}^{2,4} f(x) dx$  usando a regra de Simpson composta.

### 3.3 Quadratura de Romberg

[[tag:revisar]]

A quadratura de Romberg é construída por sucessivas extrapolações de Richardson da regra do trapézio composta. Sejam  $h_k = (b - a)/(2k)$ ,  $x_i = a + (i - 1)h_k$  e

$$R_{k,1} := \frac{h_k}{2} \left[ f(a) + 2 \sum_{i=2}^{2k} f(x_i) + f(b) \right] \quad (3.47)$$

a regra do trapézio composta com  $2k$  subintervalos de

$$I := \int_a^b f(x) dx. \quad (3.48)$$

Por sorte, o erro de truncamento de aproximar  $I$  por  $R_{k,1}$  tem a seguinte forma

$$I - R_{k,1} = \sum_{i=1}^{\infty} k_i h_k^{2i}, \quad (3.49)$$

o que nos permite aplicar a extrapolação de Richardson para obter aproximações de mais alta ordem.

Mais precisamente, para obtermos uma aproximação de  $I$  com erro de truncamento da ordem  $h^{2n}$ ,  $h = (b - a)$ , computamos  $R_{k,1}$  para  $k = 1, 2, \dots, n$ . Então, usamos das sucessivas extrapolações de Richardson

$$R_{k,j} := R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, \quad (3.50)$$

$j = 2, 3, \dots, n$ , de forma a computarmos  $R_{n,n}$ , a qual fornece a aproximação desejada.

**Exemplo 3.3.1.** Consideremos o problema de aproximar a integral de  $f(x) = xe^{-x^2}$  no intervalo  $[0, 1]$ . Para obtermos uma quadratura de Romberg de ordem 4, calculamos

$$R_{1,1} := \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] = 1,83940e-1 \quad (3.51)$$

$$R_{2,1} := \frac{1}{4}[f(0) + 2f(1/2) + f(1)] = 2,86670e-1. \quad (3.52)$$

Então, calculando

$$R_{2,2} = R_{2,1} + \frac{R_{2,1} - R_{1,1}}{3} = 3,20914e-1, \quad (3.53)$$

a qual é a aproximação desejada.

Tabela 3.4: Resultados referentes ao Exemplo 3.3.1.

k	$R_{k,1}$	$R_{k,2}$	$R_{k,3}$	$R_{k,4}$
1	1,83940e-1			
2	2,86670e-1	3,20914e-1		
3	3,08883e-1	3,16287e-1	3,15978e-1	
4	3,14276e-1	3,16074e-1	3,16059e-1	3,16061e-1

Na Tabela 3.4, temos os valores de aproximações computadas pela quadratura de Romberg até ordem 8.

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 3.3.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^0 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.54)$$

usando a quadratura de Romberg de ordem 4.

## 3.4 Grau de Exatidão

O grau de exatidão é uma medida de exatidão de uma quadratura numérica. Mais precisamente, dizemos que uma dada quadratura numérica de nodos e pesos  $\{(x_i, \omega_i)\}_{i=1}^n$  tem grau de exatidão  $m$ , quando

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n p(x_i) \omega_i \quad (3.55)$$

para todo polinômio  $p(x)$  de grau menor  $m$ . Ou ainda, conforme descrito na definição a seguir.

**Definição 3.4.1.** (Grau de Exatidão.) Dizemos que uma dada quadratura numérica de pontos e nodos  $\{x_i, \omega_i\}_{i=1}^n$  tem grau de exatidão  $m$ , quando

$$\int_a^b x^k dx = \sum_{i=1}^n x_i^k \omega_i, \forall k \leq m. \quad (3.56)$$

### 3.4.1 Regra do Ponto Médio

Vamos determinar o grau de exatidão da regra do ponto médio. Para tanto, verificamos para quais  $k$  vale

$$\int_a^b x^k dx = (b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^k. \quad (3.57)$$

Temos

- $k = 0$ :

$$\int_a^b x^0 dx = x \Big|_a^b = b - a, \quad (3.58)$$

$$(b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^0 = b - a. \quad (3.59)$$

- $k = 1$ :

$$\int_a^b x^1 dx = \frac{x^2}{2} \Big|_a^b = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}, \quad (3.60)$$

$$(b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^1 = (b-a) \frac{(a+b)}{2} = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}. \quad (3.61)$$



- $k = 2$ :

$$\int_a^b x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_a^b = \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}, \quad (3.62)$$

$$(b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^2 \neq \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}. \quad (3.63)$$

Ou seja, a regra do ponto médio tem grau de exatidão 1. Isto quer dizer, que a regra do ponto médio fornece o valor exato para a integral de qualquer polinômio de grau menor ou igual a 1.

**Exemplo 3.4.1.** A integral

$$I = \int_1^5 1 - 2x dx \quad (3.64a)$$

$$= x - x^2 \Big|_1^5 \quad (3.64b)$$

$$= (5 - 25) - (1 - 1) = -20. \quad (3.64c)$$

Pela regra do ponto médio, temos

$$S = hf \left( \frac{a+b}{2} \right) \quad (3.65a)$$

$$= (5-1) \left[ 1 - 2 \cdot \frac{(1+5)}{2} \right] \quad (3.65b)$$

$$= 4(1-6) = -20. \quad (3.65c)$$

### 3.4.2 Regra de Simpson

Vamos determinar o grau de exatidão da regra de Simpson. Para tanto, verificamos para quais  $k$  vale

$$\int_a^b x^k dx = \frac{(b-a)}{6} \left( a^k + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^k + b^k \right). \quad (3.66)$$

Temos

- $k = 0$ :

$$\int_a^b x^0 dx = x \Big|_a^b = b - a, \quad (3.67)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^0 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^0 + b^0 \right) = b - a. \quad (3.68)$$

- $k = 1$ :

$$\int_a^b x^1 dx = \frac{x^2}{2} \Big|_a^b = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}, \quad (3.69)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^1 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^1 + b^1 \right) = \frac{(b-a)}{2} (a+b) \quad (3.70)$$

$$= \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}. \quad (3.71)$$

- $k = 2$ :

$$\int_a^b x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_a^b = \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}, \quad (3.72)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^2 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^2 + b^2 \right) = \frac{(b-a)}{3} (a^2 + ab + b^2) \quad (3.73)$$

$$= \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}. \quad (3.74)$$

- $k = 3$ :

$$\int_a^b x^3 dx = \frac{x^4}{4} \Big|_a^b = \frac{b^4}{4} - \frac{a^4}{4}, \quad (3.75)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^3 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^3 + b^3 \right) \quad (3.76)$$

$$= \frac{(b-a)}{6} \left[ \frac{3a^3}{2} + \frac{3b}{2}a^2 + \frac{3a}{2}b^2 + \frac{3b^3}{2} \right] \quad (3.77)$$

$$= \frac{b^4}{4} - \frac{a^4}{4}. \quad (3.78)$$

- $k = 4$ :

$$\int_a^b x^4 dx = \frac{x^5}{5} \Big|_a^b = \frac{b^5}{5} - \frac{a^5}{5}, \quad (3.79)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^4 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^4 + b^4 \right) \neq \frac{b^5}{5} - \frac{a^5}{5}. \quad (3.80)$$

Ou seja, a regra de Simpson tem grau de exatidão 3. Isto significa que ela fornece o valor exato da integral de qualquer polinômio de grau menor ou igual a 3.

**Exemplo 3.4.2.** A integral

$$I = \int_{-1}^1 1 - x^2 dx \quad (3.81a)$$

$$= x - \frac{x^3}{3} \Big|_{-1}^1 \quad (3.81b)$$

$$= \left( 1 - \frac{1}{3} \right) - \left( -1 + \frac{1}{3} \right) \quad (3.81c)$$

$$= \frac{4}{3}. \quad (3.81d)$$

Pela regra de Simpson, temos

$$S = \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \quad (3.82a)$$

$$= \frac{1}{3} \left[ (1 - (-1)^2) + 4(1 - 0^2) + (1 - (1)^2) \right] \quad (3.82b)$$

$$= \frac{4}{3}. \quad (3.82c)$$

### 3.4.3 Exercícios

**Exercício 3.4.1.** Determine o grau de exatidão da regra do trapézio.

**Exercício 3.4.2.** Calcule

$$\int_{-7\sqrt{3}}^{7\sqrt{3}} \pi x - e dx. \quad (3.83)$$

**Exercício 3.4.3.** Determine o nodo e o peso da quadratura numérica de um único nodo e de grau de exatidão 1 para o intervalo de integração  $[-1, 1]$ .

**Exercício 3.4.4.** Considere uma quadratura numérica de dois nodos e pesos

$$S = f(x_1)\omega_1 + f(x_2)\omega_2. \quad (3.84)$$

Determine as possíveis escolhas de pesos e nodos para que ela tenha grau de exatidão 2 no intervalo de integração  $[0,1]$ .

**Exercício 3.4.5.** Mostre que a seguinte quadratura numérica

$$S = f(-1)\frac{1}{3} + f(0)\frac{4}{3} + f(1)\frac{1}{3} \quad (3.88)$$

tem grau de exatidão 3 no intervalo de integração  $[-1, 1]$ .

## 3.5 Quadratura Gauss-Legendre

Quadraturas gaussianas são quadraturas numéricas de máximo grau de exatidão. Especificamente, **quadraturas de Gauss-Legendre** são quadraturas gaussianas para integrais da forma

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx. \quad (3.89)$$

Vamos começar considerando o problema de determinar a quadratura de Gauss-Legendre de apenas um ponto, i.e.

$$S = f(x_1)\omega_1. \quad (3.90)$$

Começamos por exigir a integração exata de polinômios de grau 0, o que nos leva a

$$\omega_1 x_1^0 = \int_{-1}^1 x^0 dx \quad (3.91a)$$

$$\omega_1 = x|_{-1}^1 = 2. \quad (3.91b)$$

Agora, exigindo a integração exata de polinômios de grau 1, obtemos

$$\omega_1 x_1^1 = \int_{-1}^1 x^1 dx \quad (3.92a)$$

$$2x_1 = \frac{x^2}{2} \Big|_{-1}^1 = 0 \quad (3.92b)$$

$$x_1 = 0. \quad (3.92c)$$

Com isso, concluímos que a quadratura de um nodo de maior grau de exatidão para tais integrais é a de nodo  $x_1 = 0$  e peso  $\omega_1 = 2$ . Observamos que esta é a regra do ponto médio para o intervalo de integração  $[-1, 1]$ .

Seguindo esse raciocínio, ao buscarmos por uma quadratura de  $n$  pontos com maior grau de exatidão possível para integrais no intervalo  $[-1, 1]$ , acabamos tendo que resolver um sistema de equações

$$\sum_{i=1}^n x_i^k \omega_i = \int_{-1}^1 x^k dx, \quad (3.93)$$

para  $k = 0, 1, 2, \dots, 2n - 1$ . I.e., no que temos  $2n$  incógnitas ( $n$  nodos e  $n$  pesos) a determinar, podemos exigir o grau de exatidão máximo de  $2n - 1$ .

O sistema (3.93) é um sistema não linear para os nodos e a determinação de soluções para  $n$  grande não é uma tarefa trivial. Alternativamente, veremos que os nodos da quadratura de Gauss-Legendre de  $n$  nodos são as raízes do polinômio de Legendre de grau  $n$ . Por definição, o polinômio de Legendre de grau  $n$ , denotado por  $P_n(x)$ , satisfaz a seguinte propriedade de ortogonalidade

$$\int_{-1}^1 p(x) P_n(x) dx = 0, \quad (3.94)$$

para todo polinômio  $p(x)$  de grau menor que  $n$ . Com isso, estabelecemos o seguinte resultado.

**Teorema 3.5.1.** *A quadratura de Gauss-Legendre de  $n$  nodos tem as raízes do polinômio de Legendre de grau  $n$  como seus nodos e seus pesos são dados por*

$$\omega_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx. \quad (3.95)$$

*Demonstração.* Sejam  $x_1, x_2, \dots, x_n$  as raízes do polinômio de Legendre de grau  $n$ . Queremos mostrar que

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \sum_{i=1}^n p(x_i) \omega_i, \quad (3.96)$$

para todo polinômio  $p(x)$  de grau menor ou igual  $2n - 1$ . Primeiramente, suponhamos que  $p(x)$  seja um polinômio de grau menor que  $n$ . Então, tomando sua representação por polinômio de Lagrange nos nodos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , temos

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \int_{-1}^1 \sum_{i=1}^n p(x_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \quad (3.97)$$

$$= \sum_{i=1}^n p(x_i) \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \quad (3.98)$$

$$= \sum_{i=1}^n p(x_i) \omega_i. \quad (3.99)$$

Isto mostra o resultado para polinômios  $p(x)$  de grau menor que  $n$ . Agora, suponhamos que  $p(x)$  é um polinômio de grau maior ou igual que  $n$  e menor ou igual a  $2n - 1$ . Dividindo  $p(x)$  pelo polinômio de Legendre de grau  $n$ ,  $P_n(x)$ , obtemos

$$p(x) = q(x)P_n(x) + r(x), \quad (3.100)$$

onde  $q(x)$  e  $r(x)$  são polinômio de grau menor que  $n$ . Ainda, nas raízes  $x_1, x_2, \dots, x_n$  temos  $p(x_i) = r(x_i)$  e da ortogonalidade dos polinômios de Legendre (veja, equação (3.94)), temos

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \int_{-1}^1 q(x)P_n(x) + r(x) dx \quad (3.101)$$

$$= \int_{-1}^1 r(x) dx. \quad (3.102)$$

Agora, do resultado anterior aplicado a  $r(x)$ , temos

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \sum_{i=1}^n r(x_i) \omega_i = \sum_{i=1}^n p(x_i) \omega_i. \quad (3.103)$$

Isto complete o resultado para polinômios de grau menor ou igual a  $2n - 1$ .  $\square$

**Exemplo 3.5.1.** (Gauss-Legendre de 2 pontos.) Considaremos a quadratura de Gauss-Legendre de 2 nodos. Do Teorema 3.5.1, seus nodos são as raízes do polinômio de Legendre de grau 2

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \quad (3.104)$$

as quais são

$$x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, \quad (3.105a)$$

$$x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}. \quad (3.105b)$$

Os pesos são, então

$$\omega_1 = \int_{-1}^1 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} dx \quad (3.106a)$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{2} \left[ \frac{x^2}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3} x \right]_{-1}^1 \quad (3.106b)$$

$$= 1 \quad (3.106c)$$

e

$$\omega_2 = \int_{-1}^1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} dx \quad (3.107a)$$

$$= -\frac{\sqrt{3}}{2} \left[ \frac{x^2}{2} - \frac{\sqrt{3}}{3} x \right]_{-1}^1 \quad (3.107b)$$

$$= 1 \quad (3.107c)$$

Ou seja, a quadratura de Gauss-Legendre de 2 pontos tem o seguinte conjunto de nodos e pesos  $\{(x_1 = -\sqrt{3}/3, \omega_1 = 1), (x_2 = \sqrt{3}/3, \omega_2 = 1)\}$ . Esta, por sua vez, é exata para polinômios de grau menor ou igual a 3. De fato, verificando para potência de  $x^k$  temos:

- $k = 0$ :

$$\int_{-1}^1 x^0 dx = 2 \quad (3.108a)$$

$$x_1^0 \omega_1 + x_2^0 \omega_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^0 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^0 = 2. \quad (3.108b)$$

- $k = 1$ :

$$\int_{-1}^1 x^1 dx = 0 \quad (3.109a)$$

$$x_1^1 \omega_1 + x_2^1 \omega_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^1 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^1 = 0. \quad (3.109b)$$

- $k = 2$ :

$$\int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3} \quad (3.110a)$$

$$x_1^2 \omega_1 + x_2^2 \omega_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 = \frac{2}{3}. \quad (3.110b)$$

- $k = 3$ :

$$\int_{-1}^1 x^3 dx = 0 \quad (3.111a)$$

$$x_1^3 \omega_1 + x_2^3 \omega_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^3 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^3 = 0. \quad (3.111b)$$

- $k = 4$ :

$$\int_{-1}^1 x^4 dx = \frac{2}{5} \quad (3.112a)$$

$$x_1^4 \omega_1 + x_2^4 \omega_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^4 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^4 = \frac{2}{9}. \quad (3.112b)$$



Tabela 3.5: Conjunto de nodos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre.  
 Fonte: [Wikipedia:Gauss-Legendre Quadrature](#).

$n$	$x_i$	$\omega_i$
1	0	2
2	$\pm \frac{\sqrt{3}}{3}$	1
3	0 $\pm \sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{8}{9}$ $\frac{5}{9}$
4	$\pm \sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$ $\pm \sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	$\frac{18 + \sqrt{30}}{36}$ $\frac{18 - \sqrt{30}}{36}$
5	0 $\pm \frac{1}{3}\sqrt{5 - 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$ $\pm \frac{1}{3}\sqrt{5 + 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{128}{225}$ $\frac{322 + 13\sqrt{70}}{900}$ $\frac{322 - 13\sqrt{70}}{900}$

**Exemplo 3.5.2.** Considere o problema de obter uma aproximação para  $I = \int_{-1}^1 \cos(x) dx$  usando a quadratura de Gauss-Legendre. Calculemos algumas aproximações com  $n = 1, 2$  e 3 pontos:

- $n = 1$ :

$$\int_{-1}^1 \cos(x) dx \approx 2 \cos 0 \quad (3.113a)$$

$$= 2. \quad (3.113b)$$

- $n = 2$ :

$$\int_{-1}^1 x e^{-x^2} dx \approx \cos(-\sqrt{3}/3) + \cos(-\sqrt{3}/3) \quad (3.114a)$$

$$= 1,67582. \quad (3.114b)$$

- $n = 3$ :

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 x e^{-x^2} dx &\approx \frac{8}{9} \cos 0 + \frac{5}{9} \cos(-\sqrt{3/5}) \\ &+ \frac{5}{9} \cos(\sqrt{3/5}) = 1,68300. \end{aligned} \quad (3.115a)$$

Na Tabela 3.6, temos as aproximações de  $I$  com a quadratura de Gauss-Legendre de  $n = 1, 2, 3, 4$  e  $5$  pontos (detonado por  $\tilde{I}$ , bem como, o erro absoluto com respeito ao valor analítico da integral.

Tabela 3.6: Resultados referentes ao Exemplo 3.5.2.

$n$	$\tilde{I}$	$ I - \tilde{I} $
1	2.00000	3.2e-01
2	1.67582	7.1e-03
3	1.68300	6.2e-05
4	1.68294	2.8e-07
5	1.68294	7.9e-10

```

1 import numpy as np
2 from numpy.polynomial.legendre import leggauss
3
4 # integrando
5 f = lambda x: np.cos(x)
6 # quadratura
7 n = 4
8 x,w = leggauss(n)
9 # aproximação
10 S = np.sum(f(x)*w)
11 print(f'{n}: S = {S:.5e}')
```

### 3.5.1 Intervalos de integração arbitrários

A quadratura de Gauss-Legendre é desenvolvida para aproximar integrais definidas no intervalo  $[-1, 1]$ . Por sorte, uma integral definida em um inter-

valo arbitrário  $[a, b]$  pode ser reescrita como uma integral no intervalo  $[-1, 1]$  através de uma mudança de variável apropriada.

Assumindo a **mudança de variável**

$$x = \frac{b-a}{2}(u+1) + a \quad (3.116)$$

temos

$$dx = \frac{b-a}{2} du \quad (3.117)$$

e, portanto,

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}(u+1) + a\right) \cdot \frac{b-a}{2} du. \quad (3.118)$$

Portanto, para computarmos  $\int_a^b f(x) dx$  podemos aplicar a quadratura de Gauss-Legendre na integral definida no  $[-1, 1]$  dada conforme acima.

**Exemplo 3.5.3.** Usemos a quadratura de Gauss-Legendre com 2 pontos para aproximar a integral

$$\int_0^1 x e^{-x^2} dx. \quad (3.119)$$

Fazendo a mudança de variável  $x = u/2 + 1/2$ , temos

$$\int_0^1 x e^{-x^2} dx = \int_{-1}^1 \left(\frac{u}{2} + \frac{1}{2}\right) e^{-\left(\frac{u}{2} + \frac{1}{2}\right)^2} du. \quad (3.120)$$

Então, aplicando a quadratura temos

$$\begin{aligned} \int_0^1 x e^{-x^2} dx &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right) e^{-\left(-\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right)^2} \\ &\quad + \left(\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right) e^{-\left(\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right)^2} \end{aligned} \quad (3.121a)$$

$$= 3,12754e-1. \quad (3.121b)$$

```

1 import numpy as np
2 from numpy.polynomial.legendre import leggauss
3
4 # integral
5 a = 0
6 b = 1
7 f = lambda x: x*np.exp(-x**2)
8 # quadratura
9 n = 2
10 x,w = leggauss(n)
11 # mud de var
12 x = (b-a)/2*(x+1)+a
13 w = (b-a)/2*w
14 # aproximação
15 S = np.sum(f(x)*w)
16 print(f'{n}: S = {S:.5e}')
```

### 3.5.2 Exercícios

**Exercício 3.5.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.122)$$

usando a quadratura de Gauss-Legendre com:

- a)  $n = 1$  ponto.
- b)  $n = 2$  pontos.
- c)  $n = 3$  pontos.
- d)  $n = 4$  pontos.
- e)  $n = 5$  pontos.

**Exercício 3.5.2.** Aproxime

$$\int_0^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.123)$$

usando a quadratura de Gauss-Legendre com:

- a)  $n = 1$  ponto.
- b)  $n = 2$  pontos.
- c)  $n = 3$  pontos.
- d)  $n = 4$  pontos.
- e)  $n = 5$  pontos.

**Exercício 3.5.3.** Aproxime

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.124)$$

usando a quadratura de Gauss-Legendre com:

- a)  $n = 5$  ponto.
- b)  $n = 10$  pontos.
- c)  $n = 20$  pontos.

**Exercício 3.5.4.** Use uma quadratura de Gauss-Legendre para computar a integral

$$I = \int_{-1}^2 x \sin(x^3) dx \quad (3.125)$$

com 6 dígitos significativos corretos.

## 3.6 Quadraturas gaussianas com pesos

[[tag:revisar]]

A quadratura gaussiana estudada na seção anterior (Seção 3.5) é um caso particular de quadraturas de máximo grau de exatidão para integrais da forma

$$\int_a^b f(x)w(x) dx, \quad (3.126)$$

onde  $w(x)$  é positiva e contínua, chamada de função peso. Como anteriormente, os nodos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , da quadratura gaussiana de  $n$  pontos são

as raízes do polinômio  $p_n(x)$  que é ortogonal a todos os polinômios de grau menor que  $n$ . Aqui, isto significa

$$\int_a^b q(x)p_n(x)w(x)dx = 0, \quad (3.127)$$

para todo polinômio  $q(x)$  de grau menor que  $n$ .

### 3.6.1 Quadratura de Gauss-Chebyshev

[[tag:revisar]]

Quadraturas de Gauss-Chebyshev são quadraturas gaussianas para integrais da forma

$$\int_{-1}^1 f(x)(1-x^2)^{-1/2}dx. \quad (3.128)$$

Neste caso, na quadratura gaussiana de  $n$  pontos os nodos  $x_i$  são as raízes do  $n$ -ésimo polinômio de Chebyshev  $T_n(x)$ . Pode-se mostrar (veja, por exemplo, [3, Cap. 7, Sec. 4.1]) que o conjunto de pontos desta quadratura são dados por

$$x_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right), \quad (3.129)$$

$$w_i = \frac{\pi}{n}. \quad (3.130)$$

**Exemplo 3.6.1.** Considere o problema de aproximar a integral

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}}dx. \quad (3.131)$$

Usando a quadratura de Gauss-Chebyshev de  $n$  pontos temos:

- $n = 1$ :

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \pi e^{-\cos(\pi/2)^2} = \pi. \quad (3.132)$$

- $n = 2$ :

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \frac{\pi}{2}e^{-\cos(\pi/4)^2} + \frac{\pi}{2}e^{-\cos(3\pi/4)^2} \quad (3.133)$$

$$= 1,90547. \quad (3.134)$$

- $n = 3$ :

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{3} e^{-\cos(\pi/6)^2} + \frac{\pi}{3} e^{-\cos(\pi/2)^2} + \frac{\pi}{3} e^{-\cos(5\pi/6)^2} \quad (3.135)$$

$$= 2,03652. \quad (3.136)$$

$n$	$\tilde{I}$
1	3,14159
2	1,90547
3	2,03652
4	2,02581
5	2,02647
6	2,02644
10	2,02644

Tabela 3.7: Resultados referentes ao Exemplo 3.6.1.

Na Tabela 3.7, temos as aproximações  $\tilde{I}$  da integral computadas com a quadratura de Gauss-Chebyshev com diferentes números de pontos.

### 3.6.2 Quadratura de Gauss-Laguerre

[[tag:revisar]]

Quadraturas de Gauss-Laguerre são quadraturas gaussianas para integrais da forma

$$\int_0^\infty f(x) e^{-x} dx. \quad (3.137)$$

Neste caso, na quadratura gaussiana de  $n$  pontos os nodos  $x_i$  são as raízes do  $n$ -ésimo polinômio de Laguerre  $L_n(x)$  e os pesos por

$$w_i = -\frac{1}{n[L'_n(x_i)]^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.138)$$

Na Tabela 3.8, temos os pontos da quadratura de Gauss-Laguerre para diversos valores de  $n$ .

**Exemplo 3.6.2.** Na Tabela 3.9, temos as aproximações  $\tilde{I}$  da integral  $I = \int_0^\infty \sin(x) e^{-x} dx$  obtidas pela quadratura de Gauss-Laguerre com diferentes pontos  $n$ .

Tabela 3.8: Pontos da quadratura de Gauss-Laguerre.

$n$	$x_i$	$w_i$
1	1,0000000e+00	1,0000000e+00
2	3,4142136e+00	1,4644661e-01
	5,8578644e-01	8,5355339e-01
3	6,2899451e+00	1,0389257e-02
	2,2942804e+00	2,7851773e-01
	4,1577456e-01	7,1109301e-01
4	9,3950709e+00	5,3929471e-04
	4,5366203e+00	3,8887909e-02
	1,7457611e+00	3,5741869e-01
	3,2254769e-01	6,0315410e-01
	1,2640801e+01	2,3369972e-05
5	7,0858100e+00	3,6117587e-03
	3,5964258e+00	7,5942450e-02
	1,4134031e+00	3,9866681e-01
	2,6356032e-01	5,2175561e-01

$n$	$\tilde{I}$
1	8,41471e-01
2	4,32459e-01
3	4,96030e-01
4	5,04879e-01
5	4,98903e-01

Tabela 3.9: Resultados referentes ao Exemplo 3.6.1.

### 3.6.3 Quadratura de Gauss-Hermite

[[tag:revisar]]

Quadraturas de Gauss-Hermite são quadraturas gaussianas para integrais da forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2} dx. \quad (3.139)$$

Seus nodos  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  são as raízes do  $n$ -ésimo polinômio de Hermite



e os pesos são dados por

$$w_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H'_n(x_i)]^2}. \quad (3.140)$$

Na Tabela 3.10, temos os pontos da quadratura de Gauss-Hermite para diversos valores de  $n$ .

Tabela 3.10: Pontos da quadratura de Gauss-Hermite.

$n$	$x_i$	$w_i$
1	0,0000000e+00	1,7724539e+00
2	-7,0710678e-01	8,8622693e-01
	7,0710678e-01	8,8622693e-01
3	-1,2247449e+00	2,9540898e-01
	1,2247449e+00	2,9540898e-01
	0,0000000e+00	1,1816359e+00
4	-1,6506801e+00	8,1312835e-02
	1,6506801e+00	8,1312835e-02
	-5,2464762e-01	8,0491409e-01
	5,2464762e-01	8,0491409e-01
5	-2,0201829e+00	1,9953242e-02
	2,0201829e+00	1,9953242e-02
	-9,5857246e-01	3,9361932e-01
	9,5857246e-01	3,9361932e-01
	0,0000000e+00	9,4530872e-01

**Exemplo 3.6.3.** Na Tabela 3.11, temos as aproximações  $\tilde{I}$  da integral  $I = \int_{-\infty}^{\infty} x \operatorname{sen}(x) e^{-x^2} dx$  obtidas pela quadratura de Gauss-Hermite com diferentes pontos  $n$ .

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 3.6.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^1 \frac{\operatorname{sen}(x+2) - e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (3.141)$$

$n$	$\tilde{I}$
1	0,00000e+00
2	8,14199e-01
3	6,80706e-01
4	6,90650e-01
5	6,90178e-01

Tabela 3.11: Resultados referentes ao Exemplo 3.6.3.

usando a quadratura de Gauss-Chebyshev com:

- a)  $n = 1$  ponto.
- b)  $n = 2$  pontos.
- c)  $n = 3$  pontos.
- d)  $n = 4$  pontos.
- e)  $n = 5$  pontos.

**Exercício 3.6.2.** Aproxime

$$\int_0^{\infty} (\sin(x+2) - e^{-x^2}) e^{-x} dx \quad (3.142)$$

usando a quadratura de Gauss-Laguerre com:

- a)  $n = 3$  pontos.
- b)  $n = 4$  pontos.
- c)  $n = 5$  pontos.

**Exercício 3.6.3.** Aproxime

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin(x+2) e^{-x^2} - e^{-2x^2} dx \quad (3.143)$$

usando a quadratura de Gauss-Hermite com:

- a)  $n = 3$  pontos.
- b)  $n = 4$  pontos.
- c)  $n = 5$  pontos.

### 3.7 Método de Monte Carlo

[[tag:revisar]]

O método de Monte Carlo é uma técnica não determinística para a aproximação de integrais. Mais especificamente, o método compreende a aproximação

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad (3.144)$$

onde  $x_1, x_2, \dots, x_n$  são pontos de uma sequência aleatória em  $[a, b]$ . Aqui, não vamos entrar em detalhes sobre a escolha desta sequência e, sem mais justificativas, assumiremos uma sequência de pontos uniformemente distribuídos no intervalo de integração.

**Exemplo 3.7.1.** Na tabela 3.12 temos aproximações  $\tilde{I}$  computadas para

$$I = \int_0^1 x e^{-x^2} dx \quad (3.145)$$

usando o método de Monte Carlo com diferentes números de pontos  $n$ . Aqui, os pontos foram gerados no GNU Octave pela sequência *quasi*-randômica obtida da função `rand` inicializada com `seed=0`.

$n$	$\tilde{I}$	$ I - \tilde{I} $
10	2,53304e-01	6,3e-02
100	3,03149e-01	1,3e-02
1000	3,08415e-01	7,6e-03
10000	3,16385e-01	3,2e-04
100000	3,15564e-01	5,0e-04

Tabela 3.12: Resultados referentes ao Exemplo 3.7.1.

### Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 3.7.1.** Use o método de Monte Carlo para obter uma aproximação de

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.146)$$

com precisão de  $10^{-2}$ .

# Capítulo 4

## Problema de Valor Inicial

Neste capítulo, discutimos sobre técnicas numéricas para aproximar a solução de Equações Diferenciais Ordinárias com valor inicial (condição inicial), i.e. problemas da forma

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \quad t > t_0, \quad (4.1a)$$

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad (4.1b)$$

onde  $\mathbf{y} : t \in \mathbb{R} \mapsto \mathbf{y}(t) \in \mathbb{R}^n$  é a função incógnita com dadas  $\mathbf{f} : (t, \mathbf{y}) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^n$  e  $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^n$ ,  $n \geq 1$ .

### 4.1 Método de Euler

Dado um **Problema de Valor Inicial** (PVI)

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0, \quad (4.2a)$$

$$y(t_0) = y_0, \quad (4.2b)$$

temos que  $f(t, y)$  é a derivada da solução  $y(t)$  no tempo  $t$ . Então, aproximando a derivada pela **razão fundamental** de passo  $h > 0$

$$y'(t) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h}, \quad (4.3)$$

obtemos

$$\frac{y(t+h) - y(t)}{h} \approx f(t, y) \quad (4.4)$$

$$y(t+h) \approx y(t) + hf(t, y(t)). \quad (4.5)$$

Isto nos motiva a **iteração do Método de Euler**<sup>1</sup>

$$y^{(0)} = y_0, \quad (4.6a)$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + hf(t^{(k)}, y^{(k)}), \quad (4.6b)$$

com  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ ,  $y^{(k)} \approx y(t^{(k)})$ ,  $t^{(k)} = t_0 + kh$  e **passo**  $h > 0$ .

**Exemplo 4.1.1.** Consideramos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \text{sen}(t), 0 < t < 1, \quad (4.7a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.7b)$$

Sua solução analítica é

$$y(t) = e^t - \frac{1}{2} \text{sen}(t) - \frac{1}{2} \cos(t). \quad (4.8)$$

Para computarmos a solução pelo Método de Euler, reescrevemos o problema da seguinte forma

$$y' = y + \text{sen}(t), 0 < t < 1, \quad (4.9a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}, \quad (4.9b)$$

donde identificamos  $f(t, y) := y + \text{sen}(t)$ ,  $t_0 = 0$  e  $y_0 = 1/2$ .

<sup>1</sup>Leonhard Paul Euler, 1707-1783, matemático e físico suíço. Fonte: [Wikipédia](#).

Tabela 4.1: Resultados obtidos para o problema do Exemplo 4.1.1 com  $h = 1e-1$ .

$k$	$t^{(k)}$	$y^{(k)}$	$y(t^{(k)})$
0	0.0	5.00e-1	5.00e-1
1	0.1	5.50e-1	5.58e-1
2	0.2	6.15e-1	6.32e-1
3	0.3	6.96e-1	7.24e-1
4	0.4	7.96e-1	8.37e-1
5	0.5	9.14e-1	9.70e-1
6	0.6	1.05e+0	1.13e+0
7	0.7	1.22e+0	1.31e+0
8	0.8	1.40e+0	1.52e+0
9	0.9	1.61e+0	1.76e+0
10	1.0	1.85e+0	2.03e+0

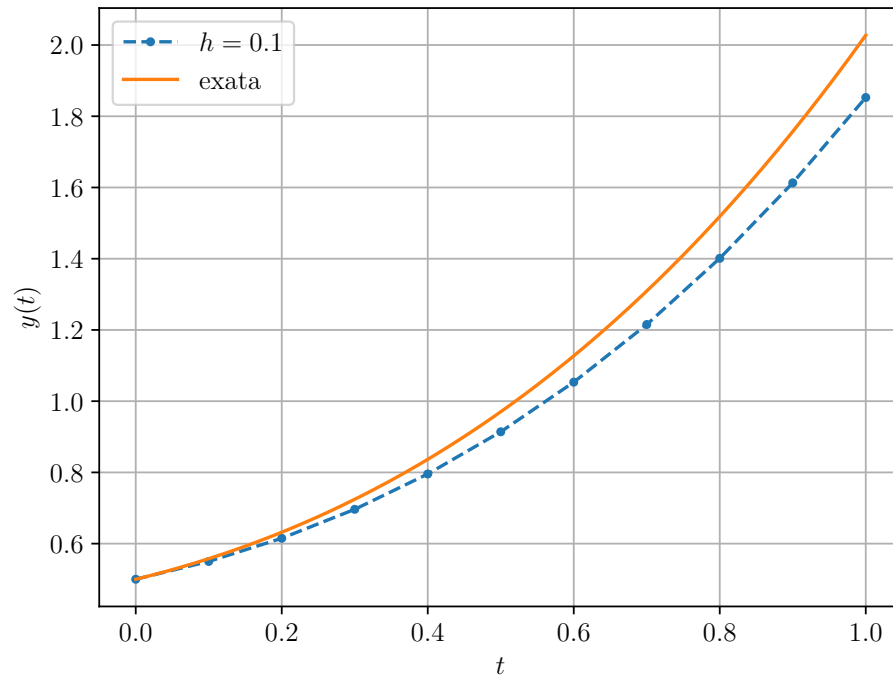


Figura 4.1: Esboço das soluções numérica (pontos) e analítica (linha) para o problema do Exemplo 4.1.1.

Código 4.1: euler.py

```
1 def euler(f, t0, y0, h, n):
2     t = np.empty(n+1)
3     t[0] = t0
4     y = np.empty(n+1)
5     y[0] = y0
6     for k in range(n):
7         t[k+1] = t[k] + h
8         y[k+1] = y[k] + h*f(t[k], y[k])
9     return t, y
```



### 4.1.1 Análise Numérica

O Método de Euler com passo  $h$  aplicado ao problema de valor inicial (4.2), pode ser escrito da seguinte forma

$$\tilde{y}(t^{(0)}; h) = y_0, \quad (4.10a)$$

$$\tilde{y}(t^{(k+1)}; h) = \tilde{y}(t^{(k)}; h) + h\Phi(t^{(k)}, \tilde{y}(t^{(k)}); h), \quad (4.10b)$$

onde  $\tilde{y}(t^{(k)})$  representa a aproximação da solução exata  $y$  no tempo  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Métodos que podem ser escritos dessa forma, são chamados de **Métodos de Passo Simples** (ou único). No caso específico do Método de Euler, temos

$$\Phi(t, y; h) := f(t, y(t)). \quad (4.11)$$

#### Consistência

Agora, considerando a solução exata  $y$  de (4.2), introduzimos

$$\Delta(t, y; h) := \begin{cases} \frac{y(t+h) - y(t)}{h}, & h \neq 0, \\ f(t, y(t)), & h = 0. \end{cases} \quad (4.12)$$

Com isso, vamos analisar o chamado **erro de discretização local**

$$\tau(t, y; h) := \Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h), \quad (4.13)$$

que estabelece uma medida quantitativa com que a solução exata  $y(t)$  no tempo  $t + h$  satisfaz a iteração do método de passo simples.

**Definição 4.1.1.** (**Consistência.**) Um **método** de passo simples é dito ser **consistente** quando

$$\lim_{h \rightarrow 0} \tau(t, y; h) = 0, \quad (4.14)$$

ou, equivalentemente, quando

$$\lim_{h \rightarrow 0} \Phi(t, y; h) = f(t, y). \quad (4.15)$$

**Observação 4.1.1.** (Consistência do Método de Euler.) Da Definição 4.1.1, temos que o **Método de Euler é consistente**. De fato, temos

$$\lim_{h \rightarrow 0} \tau(t, y; h) = \lim_{h \rightarrow 0} (\Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h)) \quad (4.16)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \left( \frac{y(t+h) - y(t)}{h} - f(t, y(t)) \right) \quad (4.17)$$

$$= y'(t) - f(t, y(t)) = 0. \quad (4.18)$$

A **ordem do erro de discretização local** de um método de passo simples é dita ser  $p$ , quando

$$\tau(t, y; h) = O(h^p), \quad (4.19)$$

ou seja, quando

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\tau(t, y; h)}{h^p} = C, \quad (4.20)$$

para alguma constante  $C$ .

Para determinarmos a ordem do Método de Euler, tomamos a **expansão em série de Taylor**<sup>2</sup> da solução exata  $y(t)$  em torno de  $t$ , i.e.

$$y(t+h) = y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \frac{h^3}{6}y'''(t + \theta h), \quad (4.21)$$

para algum  $0 < \theta < 1$ . Como  $y'(t) = f(t, y(t))$ , temos

$$y''(t) = \frac{d}{dt}f(t, y(t)) \quad (4.22)$$

$$= f_t(t, y) + f_y(t, y)y' \quad (4.23)$$

$$= f_t(t, y) + f_y(t, y)f(t, y). \quad (4.24)$$

Então, rearranjando os termos em (4.21), obtemos

$$\Delta(t, y; h) = f(t, y(t)) + \frac{h}{2}[f_t(t, y) + f_y(t, y)f(t, y)] + O(h^2). \quad (4.25)$$

Portanto, para o Método de Euler temos

$$\tau(t, y; h) := \Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h) \quad (4.26)$$

<sup>2</sup>Brook Taylor, 1685 - 1731, matemático britânico. Fonte: [Wikipédia](#).

$$= \Delta(t, y; h) - f(t, y) \quad (4.27)$$

$$= \frac{h}{2} [f_t(t, y) + f_y(t, y)f(t, y)] + O(h^2) \quad (4.28)$$

$$= O(h). \quad (4.29)$$

Isto mostra que o Método de Euler é de ordem 1.

### Convergência

A análise acima trata apenas da consistência do Método de Euler. Para analisarmos a convergência de métodos de passo simples, definimos o erro de discretização global

$$e(t; h_n) := \tilde{y}(t; h_n) - y(t), \quad (4.30)$$

onde  $\tilde{y}(t; h_n) \approx y(t)$  para  $h_n := (t - t_0)/n$ . Dizemos que o método é convergente quando

$$\lim_{n \rightarrow \infty} e(t; h_n) = 0. \quad (4.31)$$

Ainda, dizemos que o método tem erro de discretização global de ordem  $p$  quando

$$e(t; h_n) = O(h_n^p) \quad (4.32)$$

para todo  $t \in [t_0, t_f]$ ,  $t_f > t_0$ .

**Lema 4.1.1.** ([8, Cap. 7, Seção 7.2]) Se a sequência  $(\xi^{(k)})_{k \in \mathbb{R}}$  satisfaz a estimativa

$$|\xi^{(k+1)}| \leq (1 + \delta) |\xi^{(k)}| + B, \quad (4.33)$$

para dados  $\delta > 0$  e  $B \geq 0$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , então

$$|\xi^{(n)}| \leq e^{n\delta} |\xi^{(0)}| + \frac{e^{n\delta} - 1}{\delta} B. \quad (4.34)$$

*Demonstração.* De forma iterativa, temos

$$|\xi^{(1)}| \leq (1 + \delta) |\xi^{(0)}| + B \quad (4.35)$$

$$|\xi^{(2)}| \leq (1 + \delta) |\xi^{(1)}| + B \quad (4.36)$$

$$= (1 + \delta)^2 |\xi^{(0)}| + (1 + \delta)B + B \quad (4.37)$$

$$\vdots \quad (4.38)$$

$$|\xi^{(k)}| \leq (1 + \delta)^k |\xi^{(0)}| + B \sum_{k=0}^{k-1} (1 + \delta)^k \quad (4.39)$$

$$= (1 + \delta)^k |\xi^{(0)}| + B \frac{(1 + \delta)^k - 1}{\delta}. \quad (4.40)$$

Observando que  $0 < 1 + \delta \leq e^\delta$  para  $\delta > -1$ , concluímos que

$$|\xi^{(k)}| \leq e^{k\delta} |\xi^{(0)}| + \frac{e^{k\delta} - 1}{\delta} B. \quad (4.41)$$

□

**Teorema 4.1.1.** (Estimativa do Error Global.) Considere o PVI (4.2), para  $t_0 = a$ ,  $y_0 \in \mathbb{R}$ . Suponha que  $f$  é Lipschitz contínua em  $y$

$$|f(t, y) - f(t, z)| \leq L|y - z|, \quad (4.42)$$

para todo  $(t, y) \in [a, b] \times \mathbb{R}$  e que exista  $M > 0$  tal que

$$|y''(t)| \leq M, \quad (4.43)$$

para todo  $t \in [a, b]$ . Então, as iteradas do Método de Euler  $y^{(k)} \approx y(t^{(k)})$ ,  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $h > (b - a)/n$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n + 1$ , satisfazem a seguinte **estimativa do erro de discretização global**

$$|y^{(k)} - y(t^{(k)})| \leq \frac{hM}{2L} \left[ e^{L(t^{(k)} - t_0)} - 1 \right]. \quad (4.44)$$

*Demonstração.* Para  $k = 0$  o resultado é imediato. Agora, usamos o polinômio de Taylor

$$y(t^{(k+1)}) = y(t^{(k)}) + hf(t^{(k)}, y(t^{(k)})) + \frac{h^2}{2} y''(\xi^{(k)}), \quad (4.45)$$

onde  $t^{(k)} \leq \xi^{(k)} \leq t^{(k+1)}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ . Já, as iteradas de Euler são

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + hf(t^{(k)}, y^{(k)}). \quad (4.46)$$

Subtraindo essas equações, obtemos

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} - y(t^{(k+1)}) &= y^{(k)} - y(t^{(k)}) \\ &\quad + h \left[ f(t^{(k)}, y^{(k)}) - f(t^{(k)}, y(t^{(k)})) \right] - \frac{h^2}{2} y''(\xi^{(k)}) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Da hipótese de  $f$  Lipschitz, temos

$$\begin{aligned} |y^{(k+1)} - y(t^{(k+1)})| &\leq |y^{(k)} - y(t^{(k)})| \\ &\quad + hL |y^{(k)} - y(t^{(k)})| + \frac{h^2}{2} |y''(\xi^{(k)})| \end{aligned} \quad (4.48)$$

Ou, ainda,

$$|y^{(k+1)} - y(t^{(k+1)})| \leq (1 + hL) |y^{(k)} - y(t^{(k)})| + \frac{h^2 M}{2}. \quad (4.49)$$

Do Lema 4.1.1, temos

$$|y^{(k+1)} - y(t^{(k+1)})| \leq \frac{h^2 M}{2} \frac{e^{khL} - 1}{hL}, \quad (4.50)$$

donde segue a estimativa do erro global (4.44).  $\square$

**Observação 4.1.2.** (Convergência.) Do Teorema 4.1.1, a ordem do erro de discretização global de um método de passo simples é igual a sua ordem do erro de discretização local. Portanto, o Método de Euler é convergente e é de ordem 1.

**Exemplo 4.1.2.** Consideramos o seguinte problema de valor inicial

$$y' = y + 1, 0 < t < 1, \quad (4.51a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.51b)$$

Na Tabela 4.2, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo Método de Euler com diferentes passos  $h$ . A solução analítica deste problema é  $y(t) = e^t - 1$ .

Tabela 4.2: Resultados referentes ao Exemplo 4.1.2.

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	1.59374	$1.2\text{e}-1$
$10^{-2}$	1.70481	$1.3\text{e}-2$
$10^{-3}$	1.71692	$1.4\text{e}-3$
$10^{-5}$	1.71827	$1.4\text{e}-5$
$10^{-7}$	1.71828	$1.4\text{e}-7$
$10^{-9}$	1.71828	$1.4\text{e}-9$

### Erros de Arredondamento

O Teorema 4.1.1 não leva em consideração os erros de arredondamento. Levando em conta esses erros, a iteração do Método de Euler tem a forma

$$\tilde{y}^{(0)} = y_0 + \delta^{(k)}, \quad (4.52a)$$

$$\tilde{y}^{(k+1)} = \tilde{y}^{(k)} + hf(t^{(k)}, \tilde{y}^{(k)}) + \delta^{(k+1)}, \quad (4.52b)$$

onde  $\delta^{(k)}$  é o erro devido a arredondamentos na  $k$ -ésima iterada,  $t^{(k)} = t_0 + hk$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ . Assumindo as hipóteses do Teorema 4.1.1, podemos mostrar a seguinte estimativa de erro global

$$\begin{aligned} |\tilde{y}^{(k+1)} - y(t^{(k+1)})| &\leq \frac{1}{L} \left( \frac{hM}{2} + \frac{\delta}{h} \right) [e^{L(t^{(k)} - t_0)} - 1] \\ &\quad + |\delta_0| e^{L(t^{(k)} - t_0)}, \end{aligned} \quad (4.53)$$

para  $\delta^{(k)} < \delta$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

### 4.1.2 Sistemas de Equações

Seja um sistema de EDOs<sup>3</sup> com valor iniciais

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), t_0 < t \leq t_f, \quad (4.54a)$$

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad (4.54b)$$

com dada  $\mathbf{f} : (t, \mathbf{y}) \in [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^m$ , dados valores iniciais  $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^m$  e incógnita  $\mathbf{y} : t \in [t_0, t_f] \mapsto \mathbb{R}^m$ ,  $n \geq 1$ .

<sup>3</sup>Equações Diferenciais Ordinárias

Do ponto de vista algorítmico, a **iteração do Método de Euler** é diretamente estendida **para sistemas**:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{(0)} &= \mathbf{y}_0, \\ \mathbf{y}^{(k+1)} &= \mathbf{y}^{(k)} + h\mathbf{f}\left(t^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}\right), \end{aligned} \quad (4.55)$$

para  $\mathbf{y}^{(k)} \approx \mathbf{y}\left(t^{(k)}\right)$ ,  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $h = (t_f - t_0)/n$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

**Exemplo 4.1.3.** Consideramos o sistema de EDOs

$$y_1' = -y_1 + y_2 - e^{-t} - \sin(t) + \cos(t), \quad (4.56a)$$

$$y_2' = 2y_1 + 3y_2 - 6e^t - 2\cos(t), \quad (4.56b)$$

para  $0 < t \leq 1$  com condições iniciais

$$y_1(0) = 0, \quad (4.57a)$$

$$y_2(0) = 3. \quad (4.57b)$$

Este sistema tem solução analítica

$$y_1(t) = e^t - 2e^{-t} + \cos(t), \quad (4.58a)$$

$$y_2(t) = 2e^t + e^{-t}. \quad (4.58b)$$

Podemos reescrevê-lo na forma vetorial

$$\underbrace{\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}'(t)} = \underbrace{\begin{bmatrix} -y_1 + y_2 + e^{-t} - \sin(t) + \cos(t) \\ 2y_1 + 3y_2 - 6e^t - 2\cos(t) \end{bmatrix}}_{\mathbf{f}(t, \mathbf{y})}, 0 < t \leq t_f \quad (4.59a)$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}(0)} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}_0} \quad (4.59b)$$

Usando o Método de Euler com  $h = 10^{-2}$  obtemos as soluções mostradas na figura abaixo.

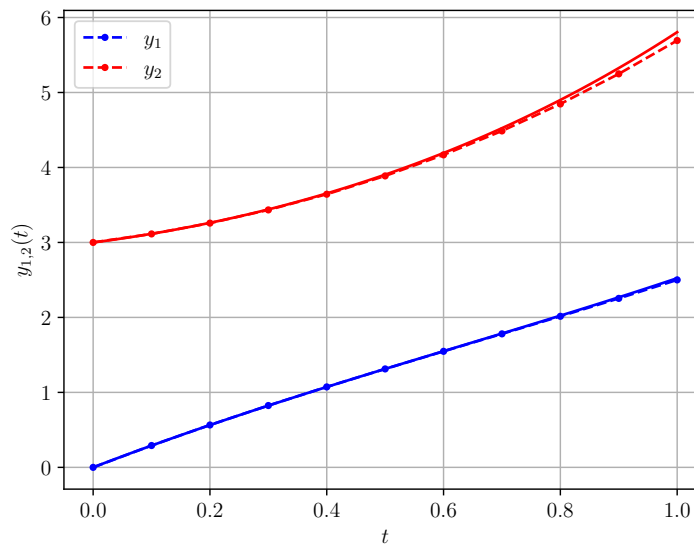


Figura 4.2: Soluções numérica (linha pontilhada) *versus* analítica (linha contínua) para o PVI do Exemplo 4.1.3.

```

1 import numpy as np
2
3 def euler(f, t0, y0, h, n):
4     t = np.empty(n+1)
5     m = y0.size
6     y = np.empty((n+1, m))
7
8     t[0] = t0
9     y[0] = y0
10
11     for k in range(n):
12         t[k+1] = t[k] + h
13         y[k+1] = y[k] + h*f(t[k], y[k])
14     return t, y
15
16 def f(t, y):
17     v = np.array([-y[0] + y[1] \
18                  - np.exp(-t) \
19                  + np.cos(t) \

```



```

20         - np.sin(t), \
650 21         2*y[0] + 3*y[1]
22         - 6*np.exp(t)
23         - 2*np.cos(t))])
24     return v
600 25
26
27 h = 1e-2
550 28 n = round(1./h)
29 t0 = 0.
30 y0 = np.array([0., 3.])
500 31 t,y = euler(f, t0, y0, h, n)

```

### 4.1.3 Equações de Ordem Superior

Seja dado o PVI de ordem  $m$

$$\frac{d^m y}{dt^m} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \dots, \frac{d^{m-1}y}{dt^{m-1}}\right), \quad (4.60a)$$

$$y(t_0) = y_0, \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=t_0} = y'_0, \dots, \left. \frac{d^{(m-1)}y}{dt^{(m-1)}} \right|_{t=t_0} = y_0^{(m-1)}, \quad (4.60b)$$

para  $t_0 \leq t \leq t_f$ .

Para resolvê-lo com o Método de Euler, a ideia é reescrevê-lo como um sistema de EDOs de primeira ordem com condições iniciais. Isso pode ser feito com a mudança de variáveis

$$u_1 = y, \quad (4.61)$$

$$u_2 = \frac{dy}{dt}, \quad (4.62)$$

$$u_3 = \frac{d^2 y}{dt^2}, \quad (4.63)$$

$$\vdots \quad (4.64)$$

$$u_m = \frac{d^{m-1}y}{dt^{m-1}}. \quad (4.65)$$

Com isso e do PVI (4.60), obtemos o sistema de EDOs de primeira ordem

$$u'_1 = u_2, \quad (4.66a)$$

$$u'_2 = u_3, \quad (4.66b)$$

$$u'_3 = u_4, \quad (4.66c)$$

$$\vdots \quad (4.66d)$$

$$u'_m = f(t, u_1, u_2, \dots, u_m), \quad (4.66e)$$

para  $t_0 < t \leq t_f$  e com condições iniciais

$$u_1(t_0) = y_0, \quad (4.67a)$$

$$u_2(t_0) = y'_0, \quad (4.67b)$$

$$u_3(t_0) = y''_0, \quad (4.67c)$$

$$\vdots \quad (4.67d)$$

$$u_m(t_0) = y_0^{(m-1)}. \quad (4.67e)$$

**Exemplo 4.1.4.** Consideramos o seguinte PVI de ordem superior

$$y'' - ty' + y = (2 + t)e^{-t} - t \cos(t), 0 < t \leq 1, \quad (4.68a)$$

$$y(0) = 1, y'(0) = 0. \quad (4.68b)$$

Sua solução analítica é

$$y(t) = \sin(t) + e^{-t}. \quad (4.69)$$

Para reescrevê-lo como uma sistema de EDOs de primeira ordem, tomamos as mudanças de variáveis  $u_1 = y$  e  $u_2 = y'$ . Com isso, obtemos

$$u'_1 = u_2, \quad (4.70a)$$

$$u'_2 = tu_2 - u_1 + (2 + t)e^{-t} - t \cos(t), \quad (4.70b)$$

para  $0 < t \leq t_f$  e com condições iniciais

$$u_1(0) = 1, \quad (4.71a)$$

$$u_2(0) = 0. \quad (4.71b)$$

Com passo  $h = 10^{-2}$ , o Método de Euler aplicado a este sistema fornece a solução do PVI mostrada na figura abaixo.

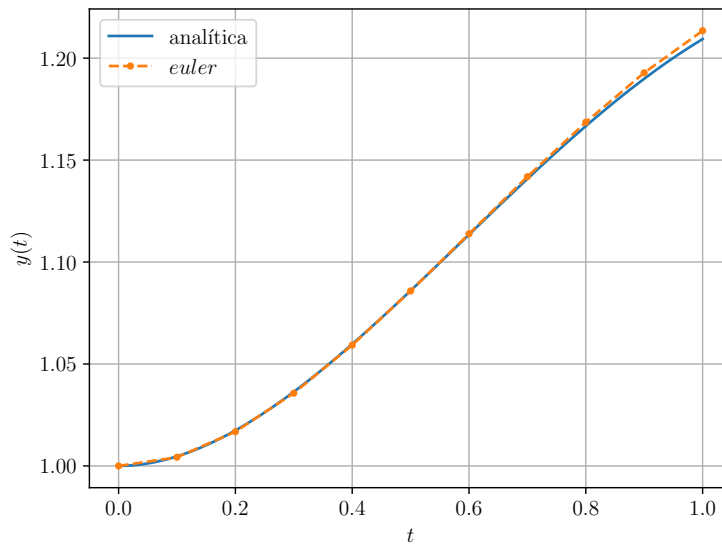


Figura 4.3: Solução numérica *versus* analítica computadas para o PVI do Exemplo 4.1.4.

#### 4.1.4 Exercícios

**Exercício 4.1.1.** O problema de valor inicial

$$y' = \pi [\cos^2(\pi t) - \sin^2(\pi t)], \quad 0 < t \leq 1.5, \quad (4.72a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.72b)$$

tem solução analítica  $y(t) = \sin(\pi t) \cos(\pi t)$ . Compute a aproximação  $\tilde{y}(1.5; h) \approx y(1.5)$  pelo Método de Euler com passo  $h = 10^{-1}$  e forneça o erro  $e(1.5; h) := \tilde{y}(1.5; h) - y(1.5)$

**Exercício 4.1.2.** Use o Método de Euler para computar a solução de

$$y' = e^{2t} - 2y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.73a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.73b)$$

Escolha um passo  $h$  adequado de forma que  $y(1)$  seja computado com precisão de 5 dígitos significativos.

**Exercício 4.1.3.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.74a)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.74b)$$

Use o Método de Euler para computar o valor aproximado de  $y(2)$  com precisão de 6 dígitos significativos.

**Exercício 4.1.4.** Use o Método de Euler para computar a solução de

$$y' = -30y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.75a)$$

$$y(0) = \frac{1}{3} \quad (4.75b)$$

A solução analítica é  $y(t) = \frac{1}{3}e^{-30t}$ . Compute a solução aproximação  $\tilde{y}(1)$  e o erro  $|\tilde{y}(1) - y(1)|$  usando o passo  $h = 10^{-1}$ . O erro obtido está de acordo com a estimativa (4.44)?

**Exercício 4.1.5.** Para o sistema de EDOs do Exemplo 4.1.3, verifique a ordem de convergência do Método de Euler computando o erro  $\varepsilon = \|\tilde{\mathbf{y}}(1) - \mathbf{y}(1)\|$  com diferentes tamanhos de passos  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-6}$ .

**Exercício 4.1.6.** Para o PVI de segunda ordem dado no Exemplo 4.1.4, tente computar a solução para tempos finais  $t_f = 2, 3, \dots, 5$ . Faça uma comparação gráfica entre as soluções numérica e analítica. O que ocorre ao aumentarmos o tempo final? Justifique sua resposta.

### Análise Numérica

**Exercício 4.1.7.** Mostre que se  $\delta > -1$ , então  $0 < 1 + \delta \leq e^\delta$ .

**Exercício 4.1.8.** Seja dado um PVI (4.2),  $t_0 \leq t \leq t_f$ . Sejam  $\tilde{y}^{(k)}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ , as aproximações computadas conforme em (4.52), com  $\delta^{(k)} < \delta$ .

Assumindo as mesmas hipóteses do Teorema 4.1.1, mostre a estimativa de erro global (4.53).

**Exercício 4.1.9.** Assumindo um erro de arredondamento máximo de  $\delta > 0$ , use (4.53) para obter uma estimativa para a melhor escolha de  $h$ .

## 4.2 Métodos de Taylor de Alta Ordem

Métodos de Taylor<sup>4</sup> são usados para computar a solução numérica de Problemas de Valor Inicial (PVI) da forma

$$y' = f(t, y), \quad t_0 < t \leq t_f, \quad (4.76a)$$

$$y(t_0) = y_0, \quad (4.76b)$$

onde  $y : [t_0, t_f] \mapsto \mathbb{R}$  é a função incógnita, dada  $f : [t_0, t_f] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  e dado valor inicial  $y_0 \in \mathbb{R}$ .

Na Seção 4.1, vimos que a ordem do erro de discretização local do Método de Euler<sup>5</sup> é também a do erro de discretização global. Este resultado é generalizado pelo Teorema 4.2.1, para todo o método de passo simples

$$y^{(0)} = y_0, \quad (4.77a)$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h\Phi\left(t^{(k)}, y^{(k)}\right), \quad (4.77b)$$

onde  $y^{(k)} \approx y\left(t^{(k)}\right)$ ,  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $h = (t_f - t_0)/n$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

Antes, lembramos que o erro de discretização local é definido por

$$\tau(t, y; h) := \Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h), \quad (4.78)$$

onde

$$\Delta(t, y; h) := \begin{cases} \frac{y(t+h) - y(t)}{h}, & h \neq 0, \\ f(t, y(t)), & h = 0. \end{cases} \quad (4.79)$$

<sup>4</sup>Brook Taylor, 1685 - 1731, matemático britânico. Fonte: [Wikipédia](#).

<sup>5</sup>Leonhard Paul Euler, 1707-1783, matemático e físico suíço. Fonte: [Wikipédia](#).

Já, o **erro de discretização global** é definido por

$$e(t; h_n) := \tilde{y}(t; h_n) - y(t), \quad (4.80)$$

onde  $\tilde{y}(t; h_n) \approx y(t)$  dada por (4.77) para  $h_n = (t - t_0)/n$ .

Com o objetivo de desenvolvermos métodos de alta ordem, podemos usar o polinômio de Taylor de ordem  $m$  de  $y = y(t)$

$$\begin{aligned} y(t+h) &= y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) \\ &+ \cdots + \frac{h^m}{m!} \frac{d^m y}{dt^m}(t) + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} \frac{d^{m+1} y}{dt^{m+1}}(\xi), \end{aligned} \quad (4.81)$$

donde

$$\begin{aligned} y(t+h) &= y(t) + hf(t, y) + \frac{h^2}{2}f'(t, y) \\ &+ \cdots + \frac{h^m}{m!} \frac{d^{m-1} f}{dt^{m-1}}(t, y) \\ &+ \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} \frac{d^m f}{dt^m}(\xi, y(\xi)) \end{aligned} \quad (4.82)$$

e, portanto

$$\begin{aligned} \Delta(t, y; h) &= f(t, y) + \frac{h}{2}f'(t, y) \\ &+ \cdots + \frac{h^m}{m!} \frac{d^{m-1} f}{dt^{m-1}}(t, y) \\ &+ \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} \frac{d^m f}{dt^m}(\xi, y(\xi)) \end{aligned} \quad (4.83)$$

Isto nos motiva a **iteração do Método de Taylor de Ordem  $m$** :

$$y^{(0)} = y_0, \quad (4.84a)$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + hT^{(m)}(t^{(k)}, y^{(k)}), \quad (4.84b)$$

onde

$$\begin{aligned} T^{(m)}(t^{(k)}, y^{(k)}) &:= f(t^{(k)}, y^{(k)}) + \frac{h}{2}f'(t^{(k)}, y^{(k)}) \\ &+ \cdots + \frac{h^{m-1}}{m!} \frac{d^{m-1} f}{dt^{m-1}}(t^{(k)}, y^{(k)}) \end{aligned} \quad (4.85)$$

**Exemplo 4.2.1.** Considere o PVI

$$y' = y + \text{sen}(t), \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.86a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.86b)$$

Vamos usar o Método de Taylor de Ordem 2 para computar sua solução e comparar com a solução analítica

$$y(t) = e^t - \frac{1}{2} \text{sen}(t) - \frac{1}{2} \cos(t). \quad (4.87)$$

$h$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	$4.9\text{e}-3$
$10^{-2}$	$5.2\text{e}-5$
$10^{-3}$	$5.2\text{e}-7$
$10^{-4}$	$5.2\text{e}-9$
$10^{-5}$	$5.2\text{e}-11$

Código 4.2: taylor.py

```

1 import numpy as np
2
3 def taylor(Phi, t0, y0, h, n):
4     t = t0
5     y = y0
6     for k in range(n):
7         y += h*Phi(t, y, h)
8         t += h
9     return t, y
10
11 def f(t, y):
12     return y + np.sin(t)
13
14 def fl(t, y):
15     return f(t, y) + np.cos(t)
16
17 def Phi(t, y, h):
18     return f(t, y) + h/2*fl(t, y)
19
20 # analítica
21 def exata(t):

```

```

22         return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)
23
24     h = 1e-1
25     n = round(1/h)
26     t,y = taylor(Phi, 0., 0.5, h, n)

```

### 4.2.1 Análise Numérica

**Teorema 4.2.1.** (**Convergência**, [8, Cap. 7, Seção 7.2].) Considere o PVI (4.76), para  $t_0 \in [a, b]$  e  $y_0 \in \mathbb{R}$ . Seja  $\Phi$  contínua em

$$G := \{(t, y, h) : a \leq t \leq b, |y - y(t)| \leq \gamma, 0 \leq |h| \leq h_0\}, \quad (4.88)$$

para  $h_0 > 0$  e  $\gamma > 0$ . Sejam também,  $M, N$  constantes tais que

$$|\Phi(t, y; h) - \Phi(t, z; h)| \leq M|y - z|, \quad (4.89)$$

para todas  $(t, y; h), (t, z; h) \in G$ . Se, ainda, para algum  $p > 0$  e para todo  $t \in [a, b]$ ,  $|h| \leq h_0$ , temos a **estimativa do erro de discretização local**

$$|\tau(t, y(t); h)| \leq N|h|^p, \quad (4.90)$$

então existe  $\bar{h}$ ,  $0 < \bar{h} < h_0$ , tal que vale a seguinte **estimativa do erro de discretização global**

$$|e(t; h_n)| \leq |h_n|^p N \frac{e^{M|t-t_0|} - 1}{M}, \quad (4.91)$$

para todo  $t \in [a, b]$  e para todo  $h_n = (t - t_0)/n$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , com  $|h_n| \leq \bar{h}$ .

*Demonstração.* Seja

$$\tilde{\Phi}(t, y; h) := \begin{cases} \Phi(t, y; h) & , (t, y, h) \in G, \\ \Phi(t, y(t) + \gamma; h) & , t \in [a, b], |h| \leq h_0, y \geq y(t) + \gamma, \\ \Phi(t, y(t) - \gamma; h) & , t \in [a, b], |h| \leq h_0, y \leq y(t) - \gamma, \end{cases} \quad (4.92)$$

A função  $\tilde{\Phi}$  é contínua em

$$\tilde{G} := \{(t, y; h) : t \in [a, b], y \in \mathbb{R}, |h| \geq h_0\} \quad (4.93)$$



e satisfaz

$$|\tilde{\Phi}(t, y; h) - \tilde{\Phi}(t, z; h)| \leq M|y - z|, \quad (4.94)$$

para todas  $(t, y; h), (t, z; h) \in \tilde{G}$ . Ainda, como  $\tilde{\Phi}(t, y(t); h) = \Phi(t, y(t); h)$ , também temos que

$$|\Delta(t, y(t); h) - \tilde{\Phi}(t, y(t); h)| \leq N|h|^p, \quad (4.95)$$

para  $t \in [a, b]$  e  $|h| \leq h_0$ .

Sejam,  $\tilde{y}^{(k)} := \tilde{y}(t^{(k)}; h)$ ,  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $\tilde{y}^{(0)} = y_0$ :

$$\tilde{y}^{(k+1)} = \tilde{y}^{(k)} + h\tilde{\Phi}(t^{(k)}, \tilde{y}^{(k)}; h), y(t^{(k+1)}) = y(t^{(k)}) + h\Delta(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h). \quad (4.96)$$

Definindo  $\tilde{e}^{(k)} := \tilde{y}^{(k)} - y(t^{(k)})$ , obtemos a fórmula de recorrência

$$\tilde{e}^{(k+1)} = \tilde{e}^{(k)} + h[\tilde{\Phi}(t^{(k)}, \tilde{y}^{(k)}; h) - \Delta(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h)] \quad (4.97)$$

$$= \tilde{e}^{(k)} + h[\tilde{\Phi}(t^{(k)}, \tilde{y}^{(k)}; h) - \tilde{\Phi}(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h)] \quad (4.98)$$

$$+ h[\tilde{\Phi}(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h) - \Delta(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h)]. \quad (4.99)$$

Agora, de (4.94) e (4.95), temos

$$|\tilde{\Phi}(t^{(k)}, \tilde{y}^{(k)}; h) - \tilde{\Phi}(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h)| \leq M|\tilde{e}^{(k)}| \quad (4.100)$$

$$|\Delta(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h) - \tilde{\Phi}(t^{(k)}, y(t^{(k)}; h)| \leq N|h|^p \quad (4.101)$$

Portanto, de (4.99), temos

$$|\tilde{e}^{(k+1)}| \leq (1 + |h|M)|\tilde{e}^{(k)}| + N|h|^{p+1} \quad (4.102)$$

Então, do Lema 4.1.1, temos

$$|\tilde{e}^{(k)}| \leq N|h|^p \frac{e^{k|h|M} - 1}{M}. \quad (4.103)$$

Sejam, agora,  $t \in [a, b]$ ,  $t \neq t_0$  fixo e  $h := h_n = (t - t_0)/n$ ,  $n > 0$ . Então,  $t^{(n)} = t_0 + nh = t$  e de (4.103) temos

$$|\tilde{e}(t, h_n)| \leq N|h_n|^p \frac{e^{M|t-t_0|} - 1}{M}, \quad (4.104)$$

para todo  $t \in [a, b]$ ,  $|h_n| \leq h_0$ . Uma vez que  $|t - t_0| \leq |b - a|$  e  $\gamma > 0$ , existe  $\bar{h}$ ,  $0 < \bar{h} \leq h_0$ , tal que  $|\tilde{e}(t, h_n)| \leq \gamma$  para todo  $t \in [a, b]$  e  $|h_n| \leq \bar{h}$ . Logo, para o método de passo simples (4.77) gerado por  $\Phi$ , temos para  $|h| \leq \bar{h}$  que

$$\tilde{y}^{(k)} = y^{(k)}, \quad (4.105)$$

$$\tilde{e}^{(k)} = e^{(k)}, \quad (4.106)$$

$$\tilde{\Phi}(t^{(k)}, \tilde{y}^{(k)}; h) = \Phi(t^{(k)}, y^{(k)}; h). \quad (4.107)$$

Concluimos que

$$|e(t, h_n)| \leq N|h_n|^p \frac{e^{M|t-t_0|} - 1}{M}, \quad (4.108)$$

para todo  $t \in [a, b]$  e  $h_n = (t - t_0)/n$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , com  $|h_n| \leq \bar{h}$ .  $\square$

## 4.2.2 Exercícios

**Exercício 4.2.1.** Use o Método de Taylor de  $O(h^2)$  para computar a solução de

$$y' + \cos(t) = y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.109a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.109b)$$

A solução analítica é  $y(t) = \frac{1}{2} \cos(t) - \frac{1}{2} \sin(t)$ . Faça testes numéricos com  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$  e  $10^{-4}$ , observe os resultados obtidos e o erro  $\varepsilon := |\tilde{y}(1) - y(1)|$ , onde  $\tilde{y}$  corresponde a solução numérica. O erro tem o comportamento esperado? Justifique sua resposta.

**Exercício 4.2.2.** Use o Método de Taylor  $O(h^2)$  para computar a solução do PVI (4.109) com  $h = 10^{-1}$ . Faça um esboço do gráfico do erro  $e(t; h = 10^{-1}) = |\tilde{y}(t) - y(t)|$  e verifique se ele tem a forma esperada conforme a estimativa do erro global (4.91).

**Exercício 4.2.3.** Use o Método de Taylor de  $O(h^3)$  para computar a solução do PVI (4.109). Escolha o passo  $h$  de forma que a solução numérica tenha precisão de 6 dígitos significativos.

**Exercício 4.2.4.** Considere o seguinte PVI

$$y' = y^2 - ty, \quad 1 < t \leq 2, \quad (4.110a)$$

$$y(1) = -2. \quad (4.110b)$$

Compute a solução com o Método de Taylor de  $O(h^p)$  com passo  $h = 10^{-1}$ :

a)  $p = 2$ .

b)  $p = 3$ .

c)  $p = 4$ .

**Exercício 4.2.5.** Considere o seguinte PVI

$$y' - t^2 y = 0, \quad 1 < t \leq 3, \quad (4.111a)$$

$$y(1) = \frac{1}{2}. \quad (4.111b)$$

Compute a solução com o Método de Taylor de  $O(h^p)$  com passo  $h = 10^{-1}$ :

a)  $p = 2$ .

b)  $p = 3$ .

c)  $p = 4$ .

## Análise Numérica

**Exercício 4.2.6.** Considere o PVI (4.109). Verifique que o Método de Taylor de  $O(h^2)$  satisfaz as estimativas do erro local (4.90) e do erro global (4.91). Forneça valor estimados para os parâmetros  $N$  e  $M$ .

## 4.3 Métodos de Runge-Kutta

Seja um Problema de Valor Inicial (PVI) da forma

$$y' = f(t, y), \quad t_0 < t \leq t_f, \quad (4.112a)$$

$$y(t_0) = y_0, \quad (4.112b)$$

onde  $y : [t_0, t_f] \mapsto \mathbb{R}$  é a função incógnita, dada  $f : [t_0, t_f] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  e dado valor inicial  $y_0 \in \mathbb{R}$ . Seguimos usando a notação  $y^{(k)} \approx y(t^{(k)})$ ,  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ ,  $h = (t_f - t_0)/n$ .

Os métodos de Runge<sup>6</sup>-Kutta<sup>7</sup> de  $s$ -estágios são métodos de passo simples da seguinte forma

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h \underbrace{\sum_{i=1}^s c_i \phi_i(t^{(k)}, y^{(k)})}_{:=\Phi(t^{(k)}, y^{(k)})}, \quad (4.113)$$

onde

$$\phi_1 := f(t^{(k)}, y^{(k)}), \quad (4.114a)$$

$$\phi_2 := f(t^{(k)} + \alpha_2 h, y^{(k)} + h\beta_{2,1}\phi_1), \quad (4.114b)$$

$$\phi_3 := f(t^{(k)} + \alpha_3 h, y^{(k)} + h(\beta_{3,1}\phi_1 + \beta_{3,2}\phi_2)), \quad (4.114c)$$

$\vdots$

$$\phi_s := f\left(t^{(i)} + \alpha_s h, y^{(i)} + h \sum_{j=1}^{s-1} \beta_{s,j} \phi_j\right), \quad (4.114d)$$

com os coeficientes  $c_i, \alpha_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, s$  e  $\beta_{i,j}$ ,  $j = 1, 2, \dots, s-1$ , escolhidos de forma a obtermos um método de passo simples com erro local da ordem desejada.

Na sequência, discutimos alguns dos métodos de Runge-Kutta usualmente utilizados. Pode-se encontrar uma lista mais completa em [3, Cap. 8, Seção 3.2].

### 4.3.1 Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

Precisamos apenas de 2 estágios para obtermos métodos de Runge-Kutta de ordem 2. Tomamos a forma

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h \underbrace{(c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2)}_{:=\Phi(t^{(k)}, y^{(k)})} \quad (4.115)$$

<sup>6</sup>Carl David Tolmé Runge, 1856 - 1927, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

<sup>7</sup>Martin Wilhelm Kutta, 1867 - 1944, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

com

$$\phi_1(t^{(k)}, y^{(k)}) := f(t^{(k)}, y^{(k)}), \quad (4.116a)$$

$$\phi_2(t^{(k)}, y^{(k)}) := f(t^{(k)} + \alpha_2 h, y^{(k)} + h\beta_{2,1}f(t^{(k)}, y^{(k)})). \quad (4.116b)$$

Nosso objetivo é de determinar os coeficientes  $c_1, c_2, \alpha_2, \beta_{2,1}$  tais que o método (4.115) tenha erro de discretização local de  $O(h^2)$ . Da definição do erro local (4.78)

$$\tau(t, y; h) := \Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h), \quad (4.117)$$

e por polinômio de Taylor de  $y(t)$ <sup>8</sup>

$$\Delta(t, y; h) = f(t, y(t)) + \frac{h}{2} \frac{d}{dt} f(t, y) + O(h^2) \quad (4.118)$$

$$= f(t, y(t)) + \frac{h}{2} [f_t(t, y) + f_y(t, y)f(t, y)] + O(h^2). \quad (4.119)$$

De (4.115), temos

$$\Phi(t, y; h) = c_1 f(t, y) + c_2 f(t + \alpha_2 h, y + h\beta_{2,1}f(t, y)) \quad (4.120)$$

Agora, tomando a expansão por série de Taylor de  $\Phi(t, y; h)$ , temos

$$\begin{aligned} \Phi(t, y; h) &= (c_1 + c_2)f(t, y) + c_2 h [\alpha_2 f_t(t, y) \\ &\quad + \beta_{2,1} f_y(t, y)f(t, y)] + O(h^2). \end{aligned} \quad (4.121)$$

Então, por comparação de (4.119) e (4.121), temos

$$c_1 + c_2 = 1 \quad (4.122)$$

$$c_2 \alpha_2 = \frac{1}{2} \quad (4.123)$$

$$c_2 \beta_{2,1} = \frac{1}{2}. \quad (4.124)$$

Este sistema tem mais de uma solução possível.

<sup>8</sup>Consulte (4.83) para mais detalhes sobre a expansão em polinômio de Taylor de  $\Delta(t, y; h)$ .

### Método do Ponto Médio

O Método do Ponto Médio é um método de Runge-Kutta de ordem 2 proveniente da escolha de coeficientes

$$\begin{aligned} c_1 &= 0, \\ c_2 &= 1, \\ \alpha_2 &= \frac{1}{2}, \\ \beta_{2,1} &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{4.125}$$

Logo, a iteração do Método do Ponto Médio é

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0 \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf \left( t^{(k)} + \frac{h}{2}, y^{(k)} + \frac{h}{2} f(t^{(k)}, y^{(k)}) \right), \end{aligned} \tag{4.126}$$

com  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

**Exemplo 4.3.1.** Consideramos o seguinte PVI

$$y' - y = \sin(t), 0 < t \leq 1, \tag{4.127a}$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \tag{4.127b}$$

Na Tabela 4.3, temos as aproximações  $\tilde{y}(1) \approx y(1)$  computadas pelo Método do Ponto Médio com diferentes passos  $h$ .

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.02175	5.6e-03
$10^{-2}$	2.02733	6.0e-05
$10^{-3}$	2.02739	6.1e-07
$10^{-4}$	2.02740	6.1e-09
$10^{-5}$	2.02740	6.1e-11
$10^{-6}$	2.02740	1.9e-12

Tabela 4.3: Resultados referentes ao Exemplo 4.3.1.

Código 4.3: pm.py

```

1 import numpy as np
2
3 def pm(f, t0, y0, h, n):
4     t = t0
5     y = y0
6     for k in range(n):
7         ya = y + h/2*f(t, y)
8         y += h*f(t+h/2, ya)
9         t += h
10    return t, y
11
12 def f(t, y):
13     return y + np.sin(t)
14
15 # analítica
16 def exata(t):
17     return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)
18
19 h = 1e-1
20 n = round(1./h)
21 t,y = pm(f, 0., 0.5, h, n)
22 print(f'{h:.1e}: {y:.5e} {np.abs(y-exata(1)):.1e}')
```

### Método de Euler Modificado

O Método de Euler Modificado é um método de Runge-Kutta de ordem 2 proveniente da escolha de coeficientes

$$\begin{aligned}
 c_1 &= \frac{1}{2}, \\
 c_2 &= \frac{1}{2}, \\
 \alpha_2 &= 1, \\
 \beta_{21} &= 1.
 \end{aligned}
 \tag{4.128}$$

Logo, a **iteração do Método de Euler Modificado** é

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0 \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{2} \left[ f(t^{(k)}, y^{(k)}) \right. \\ &\quad \left. + f(t^{(k)} + h, y^{(k)} + hf(t^{(k)}, y^{(k)})) \right]. \end{aligned} \quad (4.129)$$

**Exemplo 4.3.2.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \quad (4.130a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.130b)$$

Na Tabela 4.4, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo Método de Euler modificado com diferentes passos  $h$ .

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.02096	$6.4e-03$
$10^{-2}$	2.02733	$6.9e-05$
$10^{-3}$	2.02739	$6.9e-07$
$10^{-4}$	2.02740	$6.9e-09$
$10^{-5}$	2.02740	$6.9e-11$
$10^{-6}$	2.02740	$2.0e-12$

Tabela 4.4: Resultados referentes ao Exemplo 4.3.2

Código 4.4: eulerm.py

```

1 import numpy as np
2
3 def eulerm(f, t0, y0, h, n):
4     t = t0
5     y = y0
6     for k in range(n):
7         ya = y + h*f(t, y)
8         y += h/2 * (f(t, y) \
9                     + f(t+h, ya))
10        t += h
11    return t, y

```



```

12
650 13 def f(t, y):
14     return y + np.sin(t)
15
16 # analítica
600 17 def exata(t):
18     return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)
19
550 20 h = 1e-1
21 n = round(1./h)
22 t,y = eulerm(f, 0., 0.5, h, n)
23 print(f'{h:.1e}: {y:.5e} {np.abs(y-exata(1)):.1e}')
```

### 4.3.2 Método de Runge-Kutta de ordem 4

Um dos métodos de Runge-Kutta mais empregados é o seguinte método de ordem 4:

$$\begin{aligned}
 y^{(0)} &= y_0, \\
 y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{6}(\phi_1 + 2\phi_2 + 2\phi_3 + \phi_4),
 \end{aligned}
 \tag{4.131}$$

com

$$\phi_1 := f(t^{(k)}, y^{(k)}), \tag{4.132a}$$

$$\phi_2 := f(t^{(k)} + h/2, y^{(k)} + h\phi_1/2), \tag{4.132b}$$

$$\phi_3 := f(t^{(k)} + h/2, y^{(k)} + h\phi_2/2), \tag{4.132c}$$

$$\phi_4 := f(t^{(k)} + h, y^{(k)} + h\phi_3), \tag{4.132d}$$

**Exemplo 4.3.3.** Consideremos o seguinte PVI

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \tag{4.133a}$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \tag{4.133b}$$

Na Tabela 4.5, temos as aproximações  $\tilde{y}(1) \approx y(1)$  computadas pelo Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem com diferentes passos  $h$ .

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.02739	$2.8e-06$
$10^{-2}$	2.02740	$3.1e-10$
$10^{-3}$	2.02740	$3.0e-14$
$10^{-4}$	2.02740	$4.4e-14$

Tabela 4.5: Resultados referentes ao Exemplo 4.3.3

### 4.3.3 Exercícios

**Exercício 4.3.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, 1 < t \leq 2, \quad (4.134)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.135)$$

Use os seguintes métodos de Runge-Kutta com passo  $h = 0,1$  para computar o valor aproximado de  $y(2)$ :

- Método do Ponto Médio.
- Método de Euler Modificado.
- Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem.

**Exercício 4.3.2.** (4.109) Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + \cos(t) = y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.136a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.136b)$$

A solução analítica é  $y(t) = \frac{1}{2} \cos(t) - \frac{1}{2} \sin(t)$ . Faça testes numéricos com  $h = 10^{-1}$ ,  $10^{-2}$ ,  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$ , observe os resultados obtidos e o erro  $\varepsilon := |\tilde{y}(1) - y(1)|$ , onde  $\tilde{y}$  corresponde a solução numérica. Faça testes para:

- Método do Ponto Médio.
- Método de Euler Modificado.
- Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem.

O erro tem o comportamento esperado? Justifique sua resposta.

**Exercício 4.3.3.** Considere os métodos de Runge-Kutta aplicados para computar a solução do PVI (4.109). Para cada um, faça um esboço do gráfico do erro  $e(t; h = 10^{-1}) = |\tilde{y}(t) - y(t)|$  e verifique se ele tem a forma esperada conforme a estimativa do erro global (4.91).

**Exercício 4.3.4.** Mostre que o **Método de Kutta** é  $O(h^3)$ . Sua iteração é definida por

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{6} (\phi_1 + 4\phi_2 + \phi_3), \end{aligned} \quad (4.137)$$

com  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ , onde

$$\begin{aligned} \phi_1 &= f(t, y) \\ \phi_2 &= f(t + h/2, y + h\phi_1/2) \\ \phi_3 &= f(t + h, y - h\phi_1 + 2h\phi_2). \end{aligned} \quad (4.138)$$

Aplique-o para o PVI dado no Exercício (4.109) e verifique se o erro global satisfaz a ordem esperada.

**Exercício 4.3.5.** Considere o seguinte PVI

$$y' = y^2 - ty, \quad 1 < t \leq 2, \quad (4.139a)$$

$$y(1) = -2. \quad (4.139b)$$

Use os seguintes métodos de Runge-Kutta com passo  $h = 0.1$  para computar o valor aproximado de  $y(2)$ :

- Método do Ponto Médio.
- Método de Euler Modificado.
- Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem.

**Exercício 4.3.6.** Considere o seguinte PVI

$$y' - t^2 y = 0, \quad 1 < t \leq 3, \quad (4.140a)$$

$$y(1) = \frac{1}{2}. \quad (4.140b)$$

Use os seguintes métodos de Runge-Kutta com passo  $h = 10^{-2}$  para computar o valor aproximado de  $y(3)$ :

- Método do Ponto Médio.
- Método de Euler Modificado.
- Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem.

## 4.4 Método de Euler Implícito

Seja o Problema de Valor Inicial (PVI)

$$y' = f(t, y), t_0 < t \leq t_f, \quad (4.141a)$$

$$y(t_0) = y_0, \quad (4.141b)$$

com dados  $t_0, t_f \in \mathbb{R}$  e  $y_0 \in \mathbb{R}$ , sendo a função  $y = y(t)$  a incógnita.

Consideramos a discretização no tempo  $t^{(k)} := t_0 + hk$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ , com passo  $h := (t_f - t_0)/n$ . De (4.141) e do Teorema Fundamental do Cálculo temos

$$y(t^{(k+1)}) = y(t^{(k)}) + \int_{t^{(k)}}^{t^{(k+1)}} f(t, y) dt. \quad (4.142)$$

A integral pode ser aproximada por

$$\int_{t^{(k)}}^{t^{(k+1)}} f(t, y) dt \approx hf(t^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \quad (4.143)$$

donde obtemos

$$y(t^{(k+1)}) \approx y(t^{(k)}) + hf(t^{(k+1)}, y^{(k+1)}). \quad (4.144)$$

Isto nos motiva a **iteração do Método de Euler Implícito**<sup>9</sup>

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(t^{(k+1)}, y^{(k+1)}), \end{aligned} \quad (4.145)$$

sendo  $y^{(k)} \approx y(t^{(k)})$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

<sup>9</sup>Leonhard Paul Euler, 1707-1783, matemático e físico suíço. Fonte: [Wikipédia](#).

**Exemplo 4.4.1.** Consideremos o seguinte PVI

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \quad (4.146a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.146b)$$

Na Tabela 4.6, temos as aproximações  $\tilde{y}(1) \approx y(1)$  computadas pelo Método de Euler Implícito com diferentes passos  $h$ .

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.23660	$2.1e-1$
$10^{-2}$	2.04660	$1.9e-2$
$10^{-3}$	2.02930	$1.9e-3$
$10^{-4}$	2.02759	$1.9e-4$
$10^{-5}$	2.02741	$1.9e-5$
$10^{-6}$	2.02740	$1.9e-6$

Tabela 4.6: Resultados referentes ao Exemplo 4.4.1

Código 4.5: eulerImp.py

```

1 import numpy as np
2 from scipy.optimize import fsolve
3
4 def eulerimp(f, t0, y0, h, n):
5     t = t0
6     y = y0
7     for k in range(n):
8         y = fsolve(lambda x:
9                     x - y - h*f(t+h, x),
10                    x0 = y, xtol=1e-14)[0]
11         t += h
12     return t, y
13
14 def f(t, y):
15     return y + np.sin(t)
16
17 # analítica
18 def exata(t):
19     return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)

```

```

20
21 h = 1e-1
22 n = round(1./h)
23 t,y = eulerimp(f, 0., 0.5, h, n)
24 print(f'{h:.1e}: {y:.5e} {np.abs(y-exata(1)):.1e}')

```

#### 4.4.1 Análise Numérica

O Método de Euler Implícito é  $O(h)$ . De fato, tomando o polinômio de Taylor

$$y(t) = y(t+h) - hf(t+h, y(t+h)) + O(h^2), \quad (4.147)$$

temos

$$\tau(t, y; h) := \Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h) \quad (4.148)$$

$$= \underbrace{\frac{y(t+h) - y(t)}{h}}_{:=\Delta} - \underbrace{f(t+h, y(t+h); h)}_{:=\Phi} \quad (4.149)$$

$$= O(h). \quad (4.150)$$

#### Estabilidade

Um método é dito ser estável quando pequenas perturbações na condição inicial produzem pequenas alterações nas aproximações subsequentes, i.e. os resultados dependem continuamente dos dados iniciais.

**Exemplo 4.4.2.** Consideramos o seguinte PVI

$$y' = -40y, 0 < t \leq 1, \quad (4.151a)$$

$$y(0) = \frac{1}{3}. \quad (4.151b)$$

A solução exata é  $y(t) = \frac{1}{3}e^{-40t}$ . Na tabela abaixo, temos os resultados obtidos por computações com o Método de Euler (Explícito,  $\tilde{y}_e$ ) e o Método de Euler Implícito ( $\tilde{y}_i$ ) para  $h = 10^{-1}$  e  $10^{-2}$ .

h	$ \tilde{y}_e(1) - y(1) $	$ \tilde{y}_i(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.0e+04	3.8e-08
$10^{-2}$	1.4e-18	8.1e-16

**Estabilidade do Euler Explícito**

Consideramos o PVI

$$y' = \lambda y, t > 0, \quad (4.152a)$$

$$y(0) = y_0, \quad (4.152b)$$

para dados  $\lambda < 0$  e  $y_0 \in \mathbb{R}$ .

A iteração do **Método de Euler Explícito** para este PVI consiste em

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + h\lambda y^{(k)}, \end{aligned} \quad (4.153)$$

donde temos

$$y^{(k+1)} = (1 + h\lambda)^{k+1} y_0. \quad (4.154)$$

Tendo em vista a solução exata  $y(t) = y_0 e^{\lambda t}$ , temos que o erro global é

$$\left| y(t^{(k)}) - y^{(k)} \right| = \left| y_0 e^{\lambda h k} - y_0 (1 + h\lambda)^k \right| \quad (4.155)$$

$$= \left| (e^{\lambda h})^k - (1 + h\lambda)^k \right| |y_0| \quad (4.156)$$

e, portanto, a exatidão é determinada por quão bem  $1 + h\lambda$  aproxima  $e^{\lambda h}$ . Observamos que, para qualquer  $\lambda < 0$ ,  $(e^{\lambda h})^k \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow \infty$ . Por outro lado, para  $y^{(k)} \rightarrow 0$ , quando  $t \rightarrow 0$ , é necessário que  $|1 + h\lambda| < 1$ , i.e. o passo do Método de Euler fica restrito

$$h < \frac{2}{|\lambda|} \quad (4.157)$$

Supondo um erro de arredondamento  $\delta_0$  (apenas) na condição inicial, as aproximações subsequentes do Método de Euler Explícito ficariam

$$y^{(k+1)} = (1 + h\lambda)^{k+1} (y_0 + \delta_0), \quad (4.158)$$

donde temos que

$$\delta^{(k)} = (1 + h\lambda)^k \delta_0 \quad (4.159)$$

é o valor propagado de  $\delta_0$  na  $k$ -ésima iteração. Ou seja, quando  $|1 + h\lambda| > 1$ , temos que  $\delta^{(k)} \rightarrow \infty$  quando  $k \rightarrow \infty$  e o método é instável. Concluimos que o **Método de Euler Explícito é estável para**

$$h < \frac{2}{|\lambda|}. \quad (4.160)$$

### Estabilidade do Euler Implícito

O Método de Euler Implícito é incondicionalmente estável. Para o PVI (4.152), o método produz as aproximações

$$y^{(k)} = (1 - h\lambda)^{-k} y_0. \quad (4.161)$$

Aqui, para qualquer  $\lambda < 0$ , temos que

$$(1 - h\lambda)^{-k} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty, \quad (4.162)$$

para qualquer escolha do passo  $h > 0$ . Isto mostra a estabilidade incondicional do método. Também, o Exercício 4.4.7 mostra que o método é convergente para o PVI (4.152).

### 4.4.2 Exercícios

**Exercício 4.4.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' = 50y + 50, 0 < t \leq 1, \quad (4.163a)$$

$$y(0) = 0, \quad (4.163b)$$

com solução exata  $y(t) = e^{50t} - 1$ . Use o Método de Euler Implícito com  $h = 10^{-1}$  para computar uma aproximação de  $y(1)$ . Então, verifique a ordem de convergência para diferentes passos  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$  e  $10^{-4}$ .

**Exercício 4.4.2.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' = -50y + 50, 0 < t \leq 1, \quad (4.167a)$$

$$y(0) = 2, \quad (4.167b)$$

com solução exata  $y(t) = 1 + e^{-50t}$ . Com  $h = 10^{-1}$ , compute a aproximação de  $y(1)$  dada pelo

a) Método de Euler Explícito.

b) Método de Euler Implícito.

Por que os resultados são tão diferentes entre os métodos? Escolha um passo  $h$  em que ambos produzam resultados satisfatórios e justifique sua escolha.



**Exercício 4.4.3.** Use o Método de Euler Implícito, com  $h = 10^{-1}$ , para computar aproximações para a solução do PVI discutido no Exemplo 4.1.1. Compare os resultados com aqueles apresentados com o Método de Euler Explícito.

**Exercício 4.4.4.** O problema de valor inicial

$$y' = \pi [\cos^2(\pi t) - \sin^2(\pi t)], \quad t > 0 \quad (4.168a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.168b)$$

tem solução analítica  $y(t) = \sin(\pi t) \cos(\pi t)$ . Compute a aproximação  $\tilde{y}(1) \approx y(1)$  pelo Método de Euler Implícito com passo  $h = 10^{-1}$  e forneça o erro  $\varepsilon := |\tilde{y}(1, h) - y(1)|$ .

**Exercício 4.4.5.** Use o Método de Euler Implícito para computar a solução de

$$y' = e^{2t} - 2y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.169a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.169b)$$

Escolha um passo  $h$  adequado de forma que  $y(1)$  seja computado com precisão de 5 dígitos significativos.

**Exercício 4.4.6.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.170a)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.170b)$$

Use o Método de Euler Implícito para computar o valor aproximado de  $y(2)$  com precisão de 6 dígitos significativos.

## Análise Numérica

**Exercício 4.4.7.** Mostre que o Método de Euler Implícito é convergente para a solução exata do PVI (4.152) para qualquer  $\lambda < 0$ .

## 4.5 Métodos de Passo Múltiplo

Seja um Problema de Valor Inicial (PVI)

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t_0 < t \leq t_f, \quad (4.175a)$$

$$y(t_0) = y_0. \quad (4.175b)$$

Assumimos uma discretização uniforme no tempo  $t^{(k)} = t_0 + kh$ , com tamanho de passo  $h = (t_f - t_0)/n$ . Do [Teorema Fundamental do Cálculo](#), temos

$$y(t^{(k+i)}) = y(t^{(k-j)}) + \int_{t^{(k-j)}}^{t^{(k+i)}} f(s, y(s)) ds. \quad (4.176)$$

A ideia é aproximar a integral por uma quadratura de Newton<sup>10</sup>-Cotes<sup>11</sup>. Das regras<sup>12</sup>, temos

$$\int_{t^{(k-j)}}^{t^{(k+i)}} f(s, y(s)) ds \approx \sum_{l=1}^m f(s^{(l)}, y(s^{(l)})) w^{(l)}, \quad (4.177)$$

onde  $s^{(l)}$  são os nodos e  $w^{(l)}$  os pesos da quadratura,  $l = 1, 2, \dots, m$ .

### 4.5.1 Métodos de Adams-Bashforth

Métodos de Adams-Bashforth são métodos explícitos de passo múltiplo obtidos ao escolhermos  $j = 0$  e  $i = 1$  em (4.177), i.e.

$$y(t^{(k+1)}) = y(t^{(k)}) + \int_{t^{(k)}}^{t^{(k+1)}} f(s, y(s)) ds. \quad (4.178)$$

Aplicando as regras de Newton-Cotes, escolhemos os nodos de quadratura  $s_l = t^{(k-l+1)}$ ,  $l = 1, 2, \dots, m$ , e, então

$$\int_{t^{(k)}}^{t^{(k+1)}} f(x, y(x)) dx \approx \sum_{l=1}^m f(s_l, y(s_l)) w_l, \quad (4.179)$$

<sup>10</sup>Isaac Newton, 1642 - 1727, matemático, físico, astrônomo, teólogo e autor inglês. Fonte: [Wikipédia](#).

<sup>11</sup>Roger Cotes, 1682 - 1716, matemático inglês. Fonte: [Wikipédia](#).

<sup>12</sup>Consulte as [Notas de Aula: Matemática Numérica II: Integração: Regras de Newton-Cotes](#).

e

$$w_l = \int_{t^{(k)}}^{t^{(k+1)}} \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq l}}^m \frac{s - s^{(p)}}{s^{(l)} - x^{(p)}} ds. \quad (4.180)$$

Agora, fazendo a mudança de variável  $u = (s - t^{(k)})/h$ , obtemos

$$w_l = h \int_0^1 \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq l}}^m \frac{u + p - 1}{p - l} du \quad (4.181)$$

Donde, obtemos o seguinte esquema numérico

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h \sum_{l=1}^m w_l f(t^{(k-l+1)}, y^{(k-l+1)}), \quad (4.182)$$

onde

$$w_l = \int_0^1 \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq l}}^m \frac{s + p - 1}{p - l} ds. \quad (4.183)$$

**Observação 4.5.1.** (Ordem de Truncamento.) A ordem de truncamento de um Método de Adams-Bashforth de  $m$ -passos é  $O(h^m)$  [2].

### Método de Adams-Bashforth de Ordem 2

Tomando  $m = 2$  em (4.183), temos

$$c_1 = \int_0^1 s + 1 ds = \frac{3}{2} \quad (4.184)$$

e

$$c_2 = \int_0^1 -s ds = -\frac{1}{2}. \quad (4.185)$$

Então, de (4.182) temos a **iteração do método de Adams-Bashforth de 2 passos**:

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(1)} &= \tilde{y}_1, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{2} [3f(t^{(k)}, y^{(k)}) - f(t^{(k-1)}, y^{(k-1)})], \end{aligned} \quad (4.186)$$

com  $t^{(k)} = t_0 + kh$ ,  $h = (t_f - t_0)/n$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ .

**Exemplo 4.5.1.** Consideramos o seguinte PVI

$$y' - y = \text{sen}(t), t > 0 \quad (4.187a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.187b)$$

Na Tabela 4.7, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo Método de Adams-Bashforth de 2 passos. Como este método é de ordem 2, escolhamos inicializá-lo pelo método do ponto médio, de forma a mantermos a consistência.

Tabela 4.7: Resultados referentes ao Exemplo 4.5.1

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.01582	$1.2e-02$
$10^{-2}$	2.02727	$1.3e-04$
$10^{-3}$	2.02739	$1.3e-06$
$10^{-4}$	2.02740	$1.3e-08$
$10^{-5}$	2.02740	$1.3e-10$

Código 4.6: abs2.py

```

1 import numpy as np
2
3 def ab2(f, t0, y0, h, n):
4
5     # inicialização
6     y1 = y0 + h/2*f(t0, y0)
7     y1 = y0 + h*f(t0+h/2, y1)
8     t1 = t0 + h
9
10    # iterações
11    for k in range(1,n):
12        y = y1 + h/2*(3*f(t1, y1) \
13                    - f(t0, y0))
14        t = t1 + h
15
16        t0 = t1
17        y0 = y1
18

```

```

19         t1 = t
20         y1 = y
21
22     return t, y
23
24 def f(t, y):
25     return y + np.sin(t)
26
27 # analítica
28 def exata(t):
29     return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)
30
31 h = 1e-1
32 n = round(1./h)
33 t,y = ab2(f, 0., 0.5, h, n)
34 print(f'{h:.1e}: {y:.5e} {np.abs(y-exata(1)):.1e}')
```

### Método de Adams-Bashforth de Ordem 4

Tomando  $m = 4$  em (4.183) obtemos, de (4.182), a **iteração do método de Adams-Bashforth de 4 passos**

$$\begin{aligned}
 y^{(0)} &= y_0, \\
 y^{(1)} &= \tilde{y}_1, \\
 y^{(2)} &= \tilde{y}_2, \\
 y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{24} \left[ 55f(t^{(k)}, y^{(k)}) \right. \\
 &\quad \left. - 59f(t^{(k-1)}, y^{(k-1)}) + 37f(t^{(k-2)}, y^{(k-2)}) \right. \\
 &\quad \left. - 9f(t^{(k-3)}, y^{(k-3)}) \right],
 \end{aligned} \tag{4.188}$$

**Exemplo 4.5.2.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \tag{4.189}$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \tag{4.190}$$

Na Tabela 4.8, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo método de Adams-Bashforth de 4 passos. Como este método é de ordem 3,

escolhemos inicializá-lo pelo método de Runge-Kutta de ordem 4, de forma a mantermos a consistência.

Tabela 4.8: Resultados referentes ao Exemplo 4.5.2

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.02735	$5.0e-05$
$10^{-2}$	2.02740	$7.7e-09$
$10^{-3}$	2.02740	$7.9e-13$

Código 4.7: ab4.py

```

1 import numpy as np
2
3 def ab4(f, t0, y0, h, n):
4
5     t = np.empty(5)
6     t[0] = t0
7     y = np.empty(5)
8     y[0] = y0
9
10    # inicialização
11    for k in range(3):
12        phi1 = f(t[k], y[k])
13        phi2 = f(t[k]+h/2, y[k] + h*phi1/2)
14        phi3 = f(t[k]+h/2, y[k] + h*phi2/2)
15        phi4 = f(t[k]+h, y[k] + h*phi3)
16
17        y[k+1] = y[k] + h/6 \
18            * (phi1 + 2*phi2 + 2*phi3 + phi4)
19        t[k+1] = t[k] + h
20
21    # iterações
22    for k in range(3,n):
23        y[4] = y[3] + h/24*(55*f(t[3], y[3]) \
24            - 59*f(t[2], y[2]) \
25            + 37*f(t[1], y[1]) \
26            - 9*f(t[0], y[0]))
27        t[4] = t[3] + h
28
```

```

29         t[:4] = t[1:]
30         y[:4] = y[1:]
31
32     return t[4], y[4]
33
34 def f(t, y):
35     return y + np.sin(t)
36
37 # analítica
38 def exata(t):
39     return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)
40
41 h = 1e-3
42 n = round(1./h)
43 t,y = ab4(f, 0., 0.5, h, n)
44 print(f'{h:.1e}: {y:.5e} {np.abs(y-exata(1)):.1e}')

```

## 4.5.2 Métodos de Adams-Moulton

Métodos de Adams-Moulton são esquemas implícitos obtidos tomando-se  $i = 1, j = 0$  em (4.176) e incluindo-se  $t^{(k+1)}$  como nodo da quadratura em (4.177).

### Método de Admans-Moulton de 2 Passos

A iteração do de Admans-Moulton de 2 Passos (A-B-2)<sup>13</sup> é

$$\begin{aligned}
 y^{(0)} &= y_0, \\
 y^{(1)} &= \tilde{y}_1, \\
 y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{12} \left[ 5f(t^{(k+1)}, y(t^{(k+1)})) \right. \\
 &\quad \left. + 8f(t^{(k)}, y(t^{(k)})) \right. \\
 &\quad \left. - f(t^{(k-1)}, y(t^{(k-1)})) \right]
 \end{aligned} \tag{4.191}$$

**Observação 4.5.2.** (Estimativa do Erro Local.) O método A-B-2 tem erro de truncamento local da  $O(h^3)$ .

<sup>13</sup>Consulte o Exercício 4.5.6

A inicialização do método A-B-2 requer a computação de  $y^{(1)}$  por algum método de passo simples. Manter a consistência é um desafio e uma alternativa é a utilização de um esquema preditor-corretor.

### Método Preditor-Corretor

Um **Método Preditor-Corretor** consiste em acoplar um método explícito com um implícito. A cada passo no tempo  $t^{(k)}$ , o **método explícito (preditor)** é usado para computar uma primeira aproximação  $\tilde{y}^{(k)} \approx y(t^{(k)})$  e, o **método implícito (corretor)** é usado para computar  $y^{(k)}$ , usando  $\tilde{y}^{(k)}$  no esquema.

**Exemplo 4.5.3.** Consideremos o seguinte PVI

$$y' - y = \sin(t), 0 < t \leq 1, \quad (4.192a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.192b)$$

Na Tabela 4.9, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo Método Preditor-Corretor de Adams de 2 passos<sup>14</sup>. Para a inicialização, usamos o Método do Ponto Médio 4.126, como preditor o Método de Adams-Bashforth de 2 passos (4.186) e como corretor o Método de Adams-Moulton (4.191).

Tabela 4.9: Resultados referentes ao Exemplo 4.5.3.

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2.02638	1.0e-03
$10^{-2}$	2.02739	1.1e-06
$10^{-3}$	2.02740	1.2e-09

Código 4.8: pca2.py

```

1 import numpy as np
2
3 def pca2(f, t0, y0, h, n):
4
5     t = np.empty(3)
6     t[0] = t0

```

<sup>14</sup>Com erro de truncamento local de  $O(h^2)$ .



```
7     y = np.empty(3)
650 8     y[0] = y0
9
10    # inicialização (PM 2)
11    y[1] = y[0] + h/2*f(t[0], y[0])
600 12    y[1] = y[0] + h*f(t[0]+h/2, y[1])
13    t[1] = t[0] + h
14
15
550 16    # iterações
17    for k in range(1,n):
18
500 19        # preditor (AB 2)
20        y[2] = y[1] + h/2*(3*f(t[1],y[1]) \
21                               - f(t[0], y[0]))
22        t[2] = t[1] + h
450 23        # corretor (AM 2)
24        y[2] = y[1] + h/12*(5*f(t[2],y[2]) \
25                               + 8*f(t[1], y[1]) \
400 26                               - f(t[0], y[0]))
27
28        t[:2] = t[1:]
29        y[:2] = y[1:]
350 30
31    return t[2], y[2]
32
33 def f(t, y):
34     return y + np.sin(t)
35
36 # analítica
250 37 def exata(t):
38     return np.exp(t) - 0.5*np.sin(t) - 0.5*np.cos(t)
39
40 h = 1e-1
200 41 n = round(1./h)
42 t,y = pca2(f, 0., 0.5, h, n)
43 print(f'{h:.1e}: {y:.5e} {np.abs(y-exata(1)):.1e}')
```

### Método de Adams-Moulton de 4 Passos

O Método de Adams-Moulton de 4 Passos é um método implícito com erro de truncamento local de  $O(h^5)$ . Sua iteração consiste em

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(1)} &= \tilde{y}_1, \\ y^{(2)} &= \tilde{y}_2, \\ y^{(3)} &= \tilde{y}_3, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{720} \left[ 251f(t^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \right. \\ &\quad \left. + 646f(t^{(k)}, y^{(k)}) - 264f(t^{(k-1)}, y^{(k-1)}) \right. \\ &\quad \left. + 106f(t^{(k-2)}, y^{(k-2)}) - 19f(t^{(k-3)}, y^{(k-3)}) \right]. \end{aligned} \quad (4.193)$$

**Exemplo 4.5.4.** Consideramos o seguinte PVI

$$y' - y = \sin(t), 0 < t \leq 1, \quad (4.194a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.194b)$$

Podemos computar uma aproximação para  $y(1)$  usando um esquema preditor-corretor com: inicialização pelo Método RK-4 4.131, preditor o Método de Adams-Bashforth de 4 passos (4.188) e como corretor o Método de Adams-Moulton (4.193). Isto nos fornece um método com erro de truncamento local mínimo de  $O(h^4)$ . Consulte o Exercício 4.5.4.

### 4.5.3 Exercícios

**Exercício 4.5.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.195a)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.195b)$$

Inicializando pelo Método de Euler, use os seguintes métodos de passo múltiplo com  $h = 0,1$  para computar o valor aproximado de  $y(2)$ :

a) método de Adams-Bashforth de ordem 2.

b) método de Adams-Bashforth de ordem 3.

c) método de Adams-Bashforth de ordem 4.

**Exercício 4.5.2.** (4.109) Considere o PVI

$$y' + \cos(t) = y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.196a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.196b)$$

Usando um método de inicialização adequado, aplique os seguintes métodos para computar aproximações para  $y(1)$ :

a) Método de Adams-Bashforth de 2 Passos.

b) Método de Adams-Bashforth de 4 Passos.

Em cada caso, verifique se seus resultados satisfazem a ordem esperada do erro de truncamento local.

**Exercício 4.5.3.** Desenvolva o Método de Adams-Bashforth de ordem 3. Para tanto, assuma  $m = 3$  em (4.183) para obter as iterações

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{12} \left[ 23f(t^{(k)}, y^{(k)}) \right. \\ &\quad \left. - 16f(t^{(k-1)}, y^{(k-1)}) + 5f(t^{(k-2)}, y^{(k-2)}) \right], \end{aligned} \quad (4.197)$$

Escolha um método adequado para inicializá-lo e implemente-o para computar a solução aproximada de  $y(1)$  para o PVI

$$y' - y = \sin(t), \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.198a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.198b)$$

**Exercício 4.5.4.** Considere o PVI

$$y' - y = \sin(t), \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.199a)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.199b)$$

Compute aproximações para  $y(1)$  usando um esquema preditor-corretor com: inicialização pelo Método RK-4 4.131, preditor o Método de Adams-Bashforth de 4 passos (4.188) e como corretor o Método de Adams-Moulton (4.193). Verifique que isso nos fornece um método com erro de truncamento local mínimo de  $O(h^4)$ .

**Exercício 4.5.5.** O Método de Adams-Moulton de 3 passos (AM-3) é um método implícito com erro de truncamento local de  $O(h^4)$ . Sua iteração consiste em

$$\begin{aligned} y^{(0)} &= y_0, \\ y^{(1)} &= \tilde{y}_1, \\ y^{(2)} &= \tilde{y}_2, \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{24} \left[ 9f(t^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \right. \\ &\quad \left. + 19f(t^{(k)}, y^{(k)}) - 5f(t^{(k-1)}, y^{(k-1)}) \right. \\ &\quad \left. + f(t^{(k-2)}, y^{(k-2)}) \right]. \end{aligned} \tag{4.200}$$

Refaça o Exercício 4.5.4 substituindo o método corretor pelo AM-3. Verifique se suas computações satisfazem o esperado erro de truncamento local.

## Análise Numérica

**Exercício 4.5.6.** Mostre o desenvolvimento do Método de Adams-Moulton de 2 passos (4.191).

## 4.6 Método adaptativo com controle de erro

[[tag:revisar]]

Consideremos um problema de valor inicial

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0, \tag{4.201}$$

$$y(t_0) = y_0. \tag{4.202}$$

e um método de passo simples

$$y^{(1)} = y_0, \tag{4.203}$$

$$y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) = y^{(i)} + h^{(i+1)}\Phi(t^{(i)}, y^{(i)}; h^{(i+1)}), \quad (4.204)$$

com  $t^{(i)} = t_0 + (i-1)h^{(i)}$ . Nesta seção, discutiremos uma estimativa para o maior valor de  $h^{(i+1)}$  tal que o erro de discretização global  $e(t^{(i+1)}; h^{(i+1)})$  seja controlado por uma dada tolerância  $TOL$ , i.e.

$$|e(t^{(i+1)}; h^{(i+1)})| := |y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y(t^{(i+1)})| \approx TOL. \quad (4.205)$$

Para um método de ordem  $h^p$ , pode-se mostrar que (veja, [3, Cap. 7, Seç. 7.2])

$$y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) = y(t^{(i+1)}) + e_p(t^{(i+1)})(h^{(i+1)})^p, \quad (4.206)$$

onde  $e(t^{(i+1)})$  é uma função apropriada. Então, assumindo que  $e(t^{(i)}; h^{(i)}) = 0$ , temos

$$e_p(t^{(i+1)}) = h^{(i+1)}e'_p(t^{(i)}) \quad (4.207)$$

e, portanto, para termos (4.205) impomos que

$$|(h^{(i+1)})^{p+1}e'_p(t^{(i)})| = TOL. \quad (4.208)$$

Daí, se obtermos uma aproximação para  $e'_p(t^{(i)})$  teremos uma aproximação para o passo  $h^{(i+1)}$ .

Para estimarmos  $e_p(t^{(i+1)})$ , observamos que de (4.206) temos

$$y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) = y(t^{(i+1)}) + e_p(t^{(i+1)})\frac{(h^{(i+1)})^p}{2^p} \quad (4.209)$$

e, então, subtraindo esta de (4.206) temos

$$y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) = e_p(t^{(i+1)})\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)^p(2^p - 1), \quad (4.210)$$

donde

$$e_p(t^{(i+1)})\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)^p = \frac{y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)}{2^p - 1}. \quad (4.211)$$

Daí, de (4.207), obtemos

$$e'_p(t^{(i)})h^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)^p = \frac{y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)}{2^p - 1}, \quad (4.212)$$

o que nos fornece a seguinte aproximação de  $e'_p(t^{(i)})$

$$e'_p(t^{(i)}) = \frac{1}{(h^{(i+1)})^{p+1}} \frac{2^p}{2^p - 1} \left[ y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) \right]. \quad (4.213)$$

Assim sendo, de (4.208) temos que o passo  $h^{(i+1)}$  apropriado é tal que

$$\frac{2^p}{2^p - 1} \left| y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) \right| \approx TOL. \quad (4.214)$$

Com base nesta estimativa podemos propor o seguinte método de passo adaptativo. Partindo de uma escolha arbitrária de  $h$ , computamos  $y^{(i+1)}(h)$  e  $y^{(i+1)}(h/2)$  de  $y^{(i)}$ . Então, enquanto

$$\frac{2^p}{2^p - 1} \left| y^{(i+1)}(h) - y^{(i+1)}\left(\frac{h}{2}\right) \right| > TOL, \quad (4.215)$$

tomamos sucessivas divisões de  $h$  por 2, até satisfazermos (4.214). Obtido o  $h$  que satisfaz (4.214), temos computado  $y^{(i+1)}$  com  $h^{(i+1)} = h$ .

**Exemplo 4.6.1.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \quad (4.216)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.217)$$

A Figura 4.4 mostra a comparação entre  $y(t)$  e a solução numérica obtida da aplicação do Método de Euler com passo adaptativo. No método, utilizamos o passo inicial  $h^{(1)} = 0,1$  e tolerância  $TOL = 10^{-4}$ . Ao compararmos esta figura com a Figura (4.1) fica evidente o controle do erro.

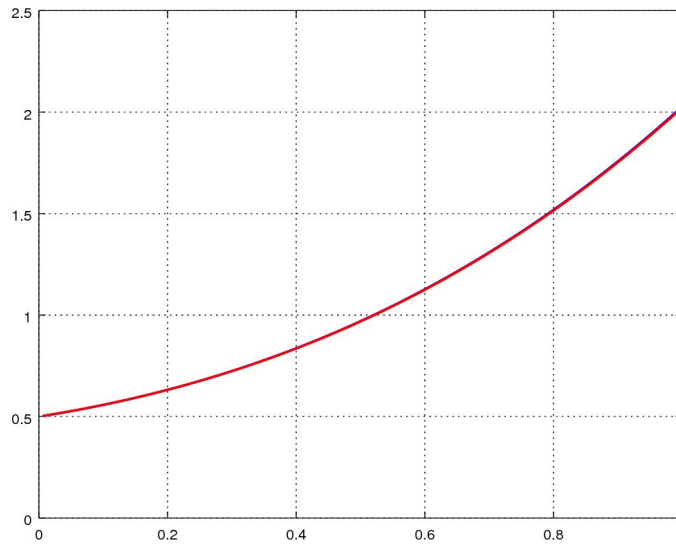


Figura 4.4: Resultados referentes ao Exemplo 4.6.1.

### 4.6.1 Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 4.6.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.218)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.219)$$

Use o Método de Euler com passo adaptativo para computar o valor aproximado de  $y(2)$ . Para tanto, utilize o passo inicial  $h = 0,1$  e a tolerância de  $TOL = 10^{-4}$ .

## Capítulo 5

# Problema de Valor de Contorno

Neste capítulo, estudamos métodos numéricos para resolver **Problemas de Valores de Contorno** da forma

$$u'' = f(x, u, u'), \quad a < x < b, \quad (5.1a)$$

$$\eta_1 u'(a) + \theta_1 u(b) = g_1 \quad (5.1b)$$

$$\eta_2 u'(b) + \theta_2 u(b) = g_2 \quad (5.1c)$$

onde a incógnita é  $u = u(x)$  com dada  $f = f(x, u, u')$  e dados parâmetros  $\eta_1, \theta_1$  (não simultaneamente nulos),  $\eta_2, \theta_2$  (não simultaneamente nulos),  $g_1$  e  $g_2$ .

### 5.1 Método de Diferenças Finitas

Consideramos o seguinte problema linear de valor de contorno (PVC)

$$u'' + \alpha(x)u' + \beta(x)u = f(x), \quad a < x < b, \quad (5.2a)$$

$$u(a) = g, \quad (5.2b)$$

$$u(b) = h. \quad (5.2c)$$

onde a incógnita é  $u = u(x)$  com dada fonte  $f = f(x)$  e dados parâmetros  $g$  e  $h$ .

A aproximação pelo **Método de Diferenças Finitas** (MDF) de (5.2a)-(5.2c) surge da substituição das derivadas por Fórmulas de Diferenças Finitas.



De forma geral, o método pode ser dividido em três etapas: 1. discretização do domínio, 2. discretização das equações, 3. resolução do problema discreto.

### 1. Discretização do Domínio.

A discretização do domínio é seu particionamento em subintervalos (células computacionais) e pontos (nodos computacionais). Por simplicidade, vamos considerar apenas o caso de um particionamento uniforme. Particionamos o domínio  $D = [a, b]$  em  $n$  de subintervalos de tamanho de malha

$$h = \frac{b - a}{n}, \quad (5.3)$$

e os nodos da partição podem ser indexados da seguinte forma

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad (5.4)$$

com  $i = 1, 2, 3, \dots, n + 1$ .

### 2. Discretização das Equações.

Começando por (5.2a), em um nodo  $x = x_i$ ,  $i = 2, 3, \dots, n$ , temos

$$u''(x_i) + \alpha(x_i)u'(x_i) + \beta(x_i)u(x_i) = f(x_i). \quad (5.5)$$

Podemos substituir a segunda derivada de  $u$  pela fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$

$$u''(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i - h) - 2u(x_i) + u(x_i + h))}{h^2}}_{D_{0,h^2}^2 u(x_i)} + O(h^2). \quad (5.6)$$

A primeira derivada de  $u$  também pode ser substituída pela fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$

$$u'(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i + h) - u(x_i - h))}{2h}}_{D_{0,h^2} u(x_i)} + O(h^2). \quad (5.7)$$

Agora, denotando  $u_i \approx u(x_i)$ , temos  $u_{i-1} \approx u(x_i - h)$  e  $u_{i+1} \approx u(x_i + h)$ . Substituindo as derivadas pelas fórmulas de diferenças finitas, temos de (5.5)

que

$$\left(\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}\right) + \alpha(x_i) \left(\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}\right) + \beta(x_i)u_i + O(h^2) = f(x_i), \quad (5.8)$$

Rearranjando os termos e desconsiderando o termo do erro de truncamento, obtemos o seguinte sistema de equações lineares

$$\left(\frac{1}{h^2} - \frac{\alpha_i}{2h}\right)u_{i-1} + \left(\beta_i - \frac{2}{h^2}\right)u_i + \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\alpha_i}{2h}\right)u_{i+1} = f_i, \quad (5.9)$$

onde, usamos a notação  $\alpha_i = \alpha(x_i)$ ,  $\beta_i = \beta(x_i)$  e  $f_i = f(x_i)$ .

Observamos que este sistema consiste em  $n - 1$  equações envolvendo as  $n + 1$  incógnitas  $u_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n + 1$ . Para fechá-lo, usamos as condições de contorno. De (5.2b), temos

$$u_1 = g \quad (5.10)$$

e de (5.2c) temos

$$u_{n+1} = h, \quad (5.11)$$

lembrando que  $u_0 \approx u(x_0)$  e  $u_n \approx u(x_n)$ .

Por fim, as equações (5.9)-(5.11) formam o seguinte **problema discretizado**

$$u_1 = g, \quad (5.12a)$$

$$\left(\frac{1}{h^2} - \frac{\alpha_i}{2h}\right)u_{i-1} + \left(\beta_i - \frac{2}{h^2}\right)u_i + \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\alpha_i}{2h}\right)u_{i+1} = f_i, \quad (5.12b)$$

$$u_{n+1} = h, \quad (5.12c)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n$ .

### 3. Resolução do Problema Discreto.

O problema discreto (5.12) consiste em um sistema linear de  $n + 1$  equações com  $n + 1$  incógnitas. Na forma matricial temos

$$A\mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (5.13)$$

onde  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{n+1})$  é o vetor das incógnitas,  $\mathbf{b} = (g, f_2, f_3, \dots, f_n, h)$ . A matriz dos coeficientes é  $A = [a_{i,j}]_{i,j=1}^{n+1,n+1}$  e seus elementos não nulos são

$$a_{1,1} = 1, \quad a_{i,i-1} = \frac{1}{h^2} - \frac{\alpha_i}{2h}, \quad (5.14)$$

$$a_{i,i} = \beta_i - \frac{2}{h^2}, \quad (5.15)$$

$$a_{i,i+1} = \frac{1}{h^2} + \frac{\alpha_i}{2h}, \quad (5.16)$$

$$a_{n+1,n+1} = 1, \quad (5.17)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n$ .

A resolução do problema discreto se resume, a resolver o sistema  $A\mathbf{u} = \mathbf{b}$ , o que pode ser feito por qualquer método numérico apropriado.

**Exemplo 5.1.1.** Consideramos o seguinte PVC

$$-u'' = \pi^2 \sin(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.18)$$

$$u(0) = 0, \quad (5.19)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.20)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \sin(\pi x)$ . Usando o MDF como acima, encontramos o problema discreto

$$u_1 = 0, \quad (5.21a)$$

$$-\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} = \pi^2 \sin(\pi x_i), \quad (5.21b)$$

$$u_{n+1} = 0, \quad (5.21c)$$

com tamanho de malha  $h = 1/n$  e nodos  $x_i = (i - 1)h$  indexados por  $i = 1, 2, \dots, n + 1$ .

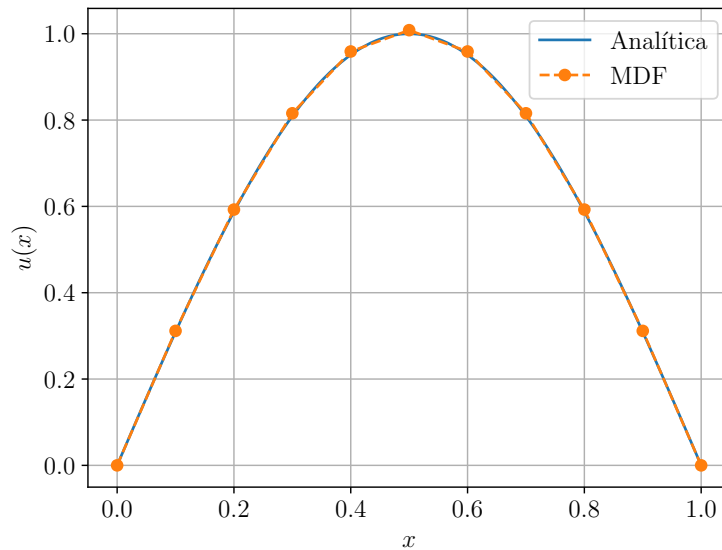


Figura 5.1: Resultado referente ao Exemplo 5.1.1.

Tabela 5.1: Resultados referentes ao Exemplo 5.1.1.

$h$	$\ \tilde{u} - u\ _{L^2}$
$1.0e-1$	$1.8e-2$
$5.0e-2$	$6.5e-3$
$2.5e-2$	$2.3e-3$
$1.0e-3$	$5.8e-4$

Resolvendo este sistema com  $h = 10^{-1}$  obtemos a solução numérica apresentada na Figura 5.1. Ainda, na Tabela 5.1 temos a comparação na norma  $L^2$  da solução numérica  $\tilde{\mathbf{u}}$  com a solução analítica  $\mathbf{u} = (u(x_i))_{i=1}^{n+1}$  para diferentes escolhas de  $h$ .

Código 5.1: pvc\_mdf.py

```

1 import numpy as np
2
3 # malha
4 n = 10

```

```

5  h = 1./n
6  xx = np.linspace(0., 1., n+1)
7
8  # fonte
9  def f(x):
10     return np.pi**2*np.sin(np.pi*x)
11
12 # prob discreto
13 A = np.zeros((n+1, n+1))
14 b = np.empty(n+1)
15
16 # c.c. x = 0.
17 A[0,0] = 1.
18 b[0] = 0.
19
20 # pts internos
21 for i in range(1,n):
22     A[i,i-1] = -1./h**2
23     A[i,i] = 2./h**2
24     A[i,i+1] = -1./h**2
25     b[i] = f(xx[i])
26
27 # c.c. x = 1.
28 A[n,n] = 1.
29 b[n] = 0.
30
31 # resol
32 u = npla.solve(A, b)

```

### 5.1.1 Exercícios

**Exercício 5.1.1.** Considere o PVC

$$-u'' = \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.22)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.23)$$

$$u(1) = -1. \quad (5.24)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Use o MDF para computar aproximações numéricas  $\tilde{u}_h$  com tamanhos de malha  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$

e verifique o erro absoluto  $\varepsilon_{\text{abs}} := \|\tilde{\mathbf{u}}_h - \mathbf{u}\|$ .

**Exercício 5.1.2.** Considere o PVC

$$-u'' = 2, \quad -1 < x < 1, \quad (5.25)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.26)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.27)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = 1 - x^2$ . Use o MDF com  $n = 20$  subintervalos na malha e verifique o erro absoluto  $\varepsilon_{\text{abs}} := \|\tilde{\mathbf{u}}_h - \mathbf{u}\|$ . Por que o erro está próximo precisão de máquina? Justifique sua resposta.

**Exercício 5.1.3.** Considere o seguinte PVC

$$-u'' + u' = f(x), \quad -1 < x < 1, \quad (5.28a)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.28b)$$

$$u'(1) = 0, \quad (5.28c)$$

onde

$$f(x) = \begin{cases} 1 & , x \leq 0 \\ 0 & , x > 0 \end{cases} \quad (5.29)$$

Use uma aproximação adequada pelo método de diferenças finitas para obter o valor aproximado de  $u(0)$  com precisão de 2 dígitos significativos.

**Exercício 5.1.4.** Considere o PVC

$$-u'' = \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.30)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.31)$$

$$u'(1) = 0. \quad (5.32)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Aplique o MDF para computar aproximações numéricas usando a:

a) fórmula de diferenças finitas  $D_{-,h}u(x)$  no contorno  $x = 1$ .

b) fórmula de diferenças finitas  $D_{-,h^2}u(x)$  no contorno  $x = 1$ .

Quais das duas produz o resultado mais preciso? Justifique sua resposta.

## 5.2 Método de Elementos Finitos

Consideramos o seguinte problema linear de valor de contorno (PVC)

$$-u'' = f(x), \quad a < x < b, \quad (5.33a)$$

$$u(a) = 0, \quad (5.33b)$$

$$u(b) = 0. \quad (5.33c)$$

onde a incógnita é  $u = u(x)$  com dada fonte  $f = f(x)$ .

A solução pelo **Método de Elementos Finitos** (FEM) de (5.2a)-(5.2c) surge da aproximação do problema em um espaço de dimensão finita de funções. São três passos fundamentais: 1. escrever a formulação fraca do problema<sup>1</sup>, 2. escrever a formulação de elementos finitos e 3. resolver o problema de elementos finitos.

### 1. Formulação Fraca

Para obter a **formulação fraca** do PVC (5.3)-(5.33c), multiplicamos (5.3) por uma arbitrária função teste  $v = v(x)$

$$-u''v = fv \quad (5.34)$$

e integramos no domínio  $a \leq x \leq b$ , i.e.

$$-\int_a^b u''v \, dx = \int_a^b fv \, dx. \quad (5.35)$$

Então, aplicando **integração por partes** no primeiro termo do lado esquerdo, obtemos

$$\int_a^b u'v' \, dx - [u'v]_{x=a}^b = \int_a^b fv \, dx. \quad (5.36)$$

Vamos denotar o produto interno em  $L^2([a,b])$ <sup>2</sup> por

$$(u, v)_2 := \int_a^b uv \, dx \quad (5.37)$$

<sup>1</sup>Por convenção, (5.2a)-(5.2c) é chamado de formulação forte do problema.

<sup>2</sup> $u \in L^2([a,b]) \Leftrightarrow \int_a^b |u|^2 \, dx < \infty$ .

e nos contornos

$$\langle u, v \rangle := u(b)v(b) - u(a)v(a). \quad (5.38)$$

Com isso, definimos a **formulação fraca** como o seguinte problema: encontrar  $u \in V := H_0^1([a, b])^3$  tal que

$$a(u, v) = l(v), \quad \forall v \in V, \quad (5.39)$$

onde a **forma bilinear** é

$$a(u, v) := (u', v')_2 \quad (5.40)$$

e a **forma linear** é

$$l(v) := (f, v)_2. \quad (5.41)$$

## 2. Formulação de Elementos Finitos

A **formulação de elementos finitos** do problema (5.3)-(5.33c) é obtida a partir de (5.39) pela substituição do espaço de funções  $V$  por um **espaço de dimensão finita**  $V_h$ . A ideia é que  $V_h \rightarrow V$ , bem como a solução de elementos finitos  $u_h \rightarrow u \in V$  quando  $h \rightarrow 0$ .

Para construir o **espaço de elementos finitos**  $V_h$ , vamos considerar elementos do tipo

$$P_1(I) := \{v = v(x); v(x) = c_0 + c_1x, \\ x \in I, c_0, c_1 \in \mathbb{R}\}, \quad (5.42)$$

onde  $I$  é um intervalo fechado.

Sobre o domínio, assumimos uma malha uniforme

$$M([a, b]) := \{x_1, x_2, \dots, x_{n+1}\} \quad (5.43)$$

com  $h = (b - a)/n$ ,  $x_i = a + (i - 1)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n + 1$ . Nesta, definimos o espaço de funções

$$V_{h,0} := \left\{ v = v(x); v \in C^0[a, b], v(a) = v(b) = 0, \right. \\ \left. v|_{[x_i, x_{i+1}]} \in P_1([x_i, x_{i+1}]), i = 1, 2, \dots, n \right\}. \quad (5.44)$$

---

<sup>3</sup> $H_0^1([a, b]) := \{u = u(x); u, u' \in L^2([a, b]), u(a) = u(b) = 0\}.$



Pode-se mostrar que  $V_h = \text{span}\{\phi_i\}_{i=1}^{n-1}$ , com base nodal

$$\phi_j(x_i) = \begin{cases} 1 & , i = j, \\ 0 & , i \neq j \end{cases} \quad (5.45)$$

para  $i, j = 2, \dots, n$  e  $\phi_1(a) = 0 = \phi_n(b)$ . Podemos verificar que

$$\phi_i(x) = \begin{cases} (x - x_{i-1})/h & , x \in [x_{i-1}, x_i], \\ (x_{i+1} - x)/h & , x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & , \text{noutros casos} \end{cases} \quad (5.46)$$

Com isso, definimos a **formulação de elementos finitos** sendo o seguinte problema: encontrar  $u_h \in V_{h,0}$  tal que

$$a(u_h, v_h) = l(v_h), \quad \forall v_h \in V_h. \quad (5.47)$$

Tendo em vista que  $V_h = \text{span}\{\phi_i\}_{i=1}^{n-1}$ , este é equivalente a

$$a(u_h, \phi_j) = l(\phi_j), \quad \forall 1 \leq j \leq n-1. \quad (5.48)$$

### 3. Resolução do Problema de Elementos Finitos

O problema de elementos finitos (5.48) consiste em um sistema linear  $A\mathbf{u} = \mathbf{b}$ . De fato, a solução  $u_h \in V_{h,0}$  pode ser escrita como a seguinte combinação linear

$$u_h = \sum_{j=1}^{n-1} u_j \phi_j. \quad (5.49)$$

Logo, temos que

$$a(u_h, \phi_i) = \left( \sum_{j=1}^{n-1} u_j \phi_j, \phi_i \right)_2, \quad (5.50a)$$

$$= \sum_{j=1}^{n-1} u_j (\phi_j, \phi_i)_2, \quad (5.50b)$$

$$= A\mathbf{u}, \quad (5.50c)$$

onde a **matriz dos coeficientes** é  $A = [a_{i,j} := (\phi_j, \phi_i)]_{i,j=1}^{n-1}$  e o **vetor das incógnitas** é  $\mathbf{u} = (u_j)_{j=1}^{n-1}$ . Doutro lado, temos

$$l(\phi_i) = (f, \phi_i)_2, \quad (5.51)$$

o que nos fornece o **vetor dos termos constantes**  $\mathbf{b} = (b_i := (f, \phi_i)_2)_{i=1}^{n-1}$ .

O cálculo dos elementos de  $A$  fornece

$$a_{i,i} = (\phi'_i, \phi'_i)_2 \quad (5.52a)$$

$$= \int_a^b (\phi'_i)^2 dx \quad (5.52b)$$

$$= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} (\phi'_i)^2 dx \quad (5.52c)$$

$$= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left[ \left( \frac{x - x_{i-1}}{h} \right)' \right]^2 dx \quad (5.52d)$$

$$+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[ \left( \frac{x_{i+1} - x}{h} \right)' \right]^2 dx \quad (5.52e)$$

$$= \frac{2}{h}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (5.52f)$$

$$a_{i,i+1} = (\phi'_{i+1}, \phi'_i)_2 \quad (5.53a)$$

$$= \int_a^b \phi'_{i+1} \phi'_i dx \quad (5.53b)$$

$$= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left( \frac{x_{i+1} - x}{h} \right)' \left( \frac{x - x_{i+1}}{h} \right)' dx \quad (5.53c)$$

$$= -\frac{1}{h}, \quad i = 1, 2, \dots, n-2, \quad (5.53d)$$

$$a_{i-1,i} = (\phi'_{i-1}, \phi'_i)_2 \quad (5.54a)$$

$$= \int_a^b \phi_{i-1} \phi_i dx \quad (5.54b)$$

$$= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left( \frac{x_i - x}{h} \right)' \left( \frac{x - x_i}{h} \right)' dx \quad (5.54c)$$

$$= -\frac{1}{h}, \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.54d)$$

observando que, noutros casos,  $a_{i,j} = 0$ .

Um cálculo aproximado dos elementos de  $\mathbf{b}$  fornece<sup>4</sup>

$$b_i = (f, \phi_i)_2 \quad (5.55a)$$

<sup>4</sup>Por simplicidade, usando a regra do ponto médio para aproximar as integrais.

$$= \int_a^b f(x) \phi_i(x) dx \quad (5.55b)$$

$$= \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \frac{(x - x_{i-1})}{h} dx \quad (5.55c)$$

$$+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) \frac{(x_{i+1} - x)}{h} dx \quad (5.55d)$$

$$\approx \frac{h}{2} f(x_{i-1/2}) + \frac{h}{2} f(x_{i+1/2}). \quad (5.55e)$$

**Exemplo 5.2.1.** Consideramos o seguinte PVC

$$-u'' = \pi^2 \sin(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.56)$$

$$u(0) = 0, \quad (5.57)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.58)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \sin(\pi x)$ .

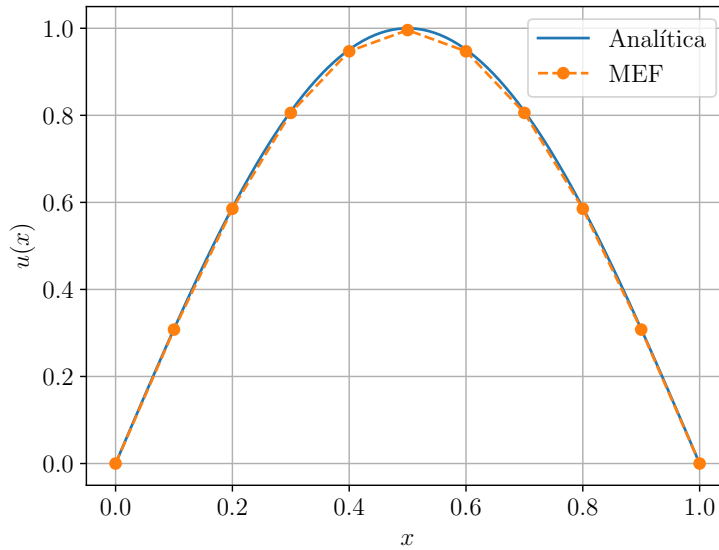


Figura 5.2: Resultado referente ao Exemplo 5.2.1.

Resolvendo este sistema com  $h = 10^{-1}$  obtemos a solução numérica apresentada na Figura 5.2.

Código 5.2: pvc\_mef.py

```
1 import numpy as np
2
3 # malha
4 n = 10
5 h = 1./n
6 xx = np.linspace(0., 1., n+1)
7
8 # fonte
9 def f(x):
10     return np.pi**2*np.sin(np.pi*x)
11
12 # prob discreto
13 A = np.zeros((n-1, n-1))
14 b = np.empty(n-1)
15
16 # c.c. x = 0.
17 A[0,0] = 2./h
18 A[0,1] = -1./h
19 b[0] = h/2 * (f(xx[1]-0.5*h) + f(xx[1]+0.5*h))
20
21 # pts internos
22 for i in range(1,n-2):
23     A[i,i-1] = -1./h
24     A[i,i] = 2./h
25     A[i,i+1] = -1./h
26     b[i] = h/2 * (f(xx[i+1]-0.5*h) + f(xx[i+1]+0.5*h))
27
28 # c.c. x = 1.
29 A[n-2,n-3] = -1./h
30 A[n-2,n-2] = 2./h
31 b[n-2] = h/2 * (f(xx[n-1]-0.5*h) + f(xx[n-1]+0.5*h))
32
33 # resol
34 u = npla.solve(A, b)
35 ## c.c. (dirichlet)
36 u = np.concatenate(([0.],u,[0.]))
```

### 5.2.1 Exercícios

**Exercício 5.2.1.** Considere o PVC

$$-u'' = \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.59)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.60)$$

$$u(1) = -1. \quad (5.61)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Use o MEF para computar aproximações numéricas  $\tilde{\mathbf{u}}_h$  com tamanhos de malha  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$  e verifique o erro absoluto  $\varepsilon_{\text{abs}} := \|\tilde{\mathbf{u}}_h - \mathbf{u}\|$ .

**Exercício 5.2.2.** Considere o PVC

$$-u'' = 2, \quad -1 < x < 1, \quad (5.62)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.63)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.64)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = 1 - x^2$ . Use o MEF com  $n = 20$  subintervalos na malha e verifique o erro absoluto  $\varepsilon_{\text{abs}} := \|\tilde{\mathbf{u}}_h - \mathbf{u}\|$ . Por que o erro está próximo precisão de máquina? Justifique sua resposta.

**Exercício 5.2.3.** Considere o seguinte PVC

$$-u'' + u' = f(x), \quad -1 < x < 1, \quad (5.65a)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.65b)$$

$$u'(1) = 0, \quad (5.65c)$$

onde

$$f(x) = \begin{cases} 1 & , x \leq 0 \\ 0 & , x > 0 \end{cases} \quad (5.66)$$

Use uma aproximação adequada pelo MEF para obter o valor aproximado de  $u(0)$  com precisão de 2 dígitos significativos.

**Exercício 5.2.4.** Considere o PVC

$$-u'' = \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.67)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.68)$$

$$u'(1) = 0. \quad (5.69)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Aplique o MEF para computar uma aproximação numérica com erro absoluto de no máximo  $10^{-3}$  na norma  $L^2$ .

## 5.3 Método de Volumes Finitos

O Método de Volumes Finitos (MVF) é um método de discretização apropriado para problemas conservativos. Consideramos o seguinte problema linear de valor de contorno (PVC)

$$-u_{xx} = f(x), \quad a < x < b, \quad (5.70a)$$

$$u(a) = 0, \quad (5.70b)$$

$$u(b) = 0. \quad (5.70c)$$

onde a incógnita é  $u = u(x)$  com dada fonte  $f = f(x)$ . A Eq. (5.70) pode ser reescrita na forma conservativa

$$\operatorname{div}(\mathbf{F}) = f, \quad (5.71)$$

onde  $\mathbf{F} = -u_x$

### 1. Discretização Espacial.

Assumimos uma malha do domínio  $[a, b]$  da forma

$$a = x_{\frac{1}{2}} < x_1 < x_{\frac{3}{2}} < \cdots < x_{i-\frac{1}{2}} < x_i < x_{i+\frac{1}{2}} < \cdots < x_n < x_{n+\frac{1}{2}} = b, \quad (5.72)$$

onde  $h = (b - a)/n$ ,  $x_{i-\frac{1}{2}} = a + (i - 1)h$ ,  $h^- = h^+ = h/2$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Também denotamos  $K_i = (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$  a  $i$ -ésima célula da malha.

### 2. Discretização das Equações.

No MVF, as incógnitas  $u_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , são as aproximações para o valor médio de  $u$  nas células  $K_i$ , i.e.

$$u_i = \frac{1}{|K_i|} \int_a^b u(x) dx. \quad (5.73)$$

O problema discreto para  $u_i$  é obtido tomando a média da Eq. na célula  $K_i$ , donde temos

$$-\frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_{xx} dx = \frac{1}{h} \int_{K_i} f dx, \quad (5.74a)$$

$$\frac{1}{h} \left[ -u_x \left( x_{i+\frac{1}{2}} \right) + u_x \left( x_{i-\frac{1}{2}} \right) \right] = \frac{1}{h} \int_{K_i} f dx \quad (5.74b)$$

Por **fórmula de diferenças finitas central**, temos

$$u_x \left( x_{i+\frac{1}{2}} \right) = \frac{u_i - u_{i-1}}{h} + O(h) \quad (5.75)$$

e

$$u_x \left( x_{i-\frac{1}{2}} \right) = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + O(h) \quad (5.76)$$

Com isso, obtemos as equações

$$\frac{1}{h} \left( -\frac{u_{i+1} - u_i}{h} + \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \right) = \frac{1}{h} \int_{K_i} f dx, \quad (5.77)$$

Rearranjando os termos e aproximando a integral de  $f$  pela **regra do ponto médio**, obtemos

$$-\frac{1}{h^2} u_{i-1} + \frac{2}{h^2} u_i - \frac{1}{h^2} u_{i+1} = f_i, \quad (5.78)$$

onde  $f_i := f(x_i)$  e  $i = 2, 3, \dots, n-1$ .

Na célula  $K_1$ , tomamos a aproximação

$$u_x \left( x_{\frac{1}{2}} \right) = \frac{u_1 - u_{\frac{1}{2}}}{h/2} + O(h), \quad (5.79a)$$

$$== \frac{u_1}{h/2} + O(h). \quad (5.79b)$$

Aplicando na Eq. (5.74b), obtemos

$$\frac{1}{h} \left( -\frac{u_2 - u_1}{h} + \frac{u_1}{h/2} \right) = \frac{1}{h} \int_{K_1} f dx, \quad (5.80)$$

Analogamente, integrando na célula  $K_n$  de fronteira, obtemos

$$\frac{1}{h} \left( \frac{u_n}{h/2} + \frac{u_n - u_{n-1}}{h} \right) = \frac{1}{h} \int_{K_n} f dx. \quad (5.81)$$

Por fim, obtemos o **problema discreto**

$$\frac{3}{h^2}u_1 - \frac{1}{h^2}u_2 = f_1, \quad (5.82a)$$

$$-\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} = f_i, \quad (5.82b)$$

$$-\frac{1}{h^2}u_{n-1} + \frac{3}{h^2}u_n = f_n, \quad (5.82c)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n-1$ .

### 3. Resolução do Problema Discreto.

A resolução do problema discreto se resume a computar a solução do sistema linear (5.82). Sua forma matricial é  $A\mathbf{u} = \mathbf{b}$ , onde a matriz de coeficientes  $A = [a_{i,j}]_{i,j=1}^{n,n}$  tem elementos da diagonal são

$$a_{1,1} = \frac{3}{h^2}, \quad (5.83a)$$

$$a_{i,i} = \frac{2}{h^2}, \quad 2 \leq i \leq n-1, \quad (5.83b)$$

$$a_{n,n} = \frac{3}{h^2}, \quad (5.83c)$$

e os demais  $a_{i,j}$  para  $i \neq j$

$$a_{i,j} = \begin{cases} -\frac{1}{h^2} & , j = i-1 \text{ ou } j = i+1, \\ 0 & , \text{noutros casos} \end{cases} \quad (5.84)$$

O vetor dos termos constantes é  $\mathbf{b} = (b_i = f_i)_{i=1}^n$ ,  $f_i = f(x_i)$  e o vetor das incógnitas é  $\mathbf{u} = (u_i)_{i=1}^n$ , sendo  $u_i$  a aproximação do valor médio de  $u$  na célula  $K_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

**Exemplo 5.3.1.** Consideramos o seguinte PVC

$$-u'' = \pi^2 \sin(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.85)$$

$$u(0) = 0, \quad (5.86)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.87)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \sin(\pi x)$ .

Resolvendo este sistema com  $h = 10^{-1}$  obtemos a solução numérica apresentada na Figura 5.3.



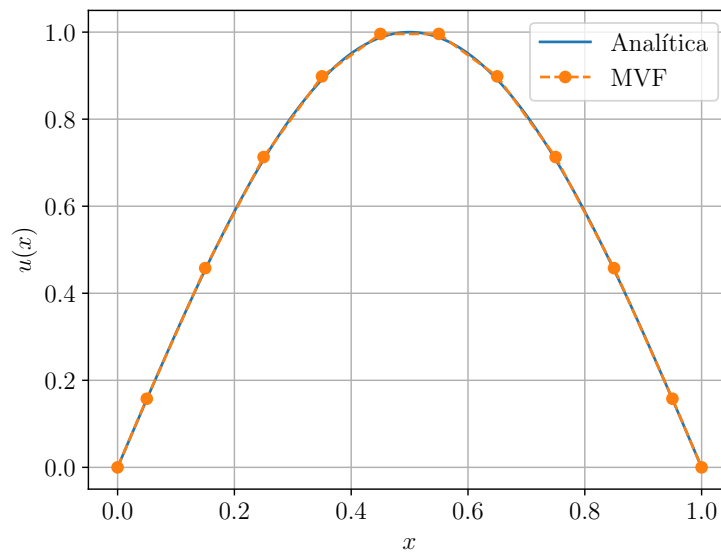


Figura 5.3: Resultado referente ao Exemplo 5.3.1.

Código 5.3: pvc\_mvfv.py

```
1 import numpy as np
2
3 # fonte
4 def f(x):
5     return np.pi**2*np.sin(np.pi*x)
6
7 # malha
8 n = 10
9 h = 1./n
10 xx = np.linspace(h/2, 1.-h/2, n)
11
12 # prob. discreto
13 A = np.zeros((n,n))
14 b = np.empty(n)
15
16 # c.c. x = 0
17 A[0,0] = 3./h**2
18 A[0,1] = -1./h**2
```

```

19 b[0] = f(xx[0])
20
21 # pts internos
22 for i in range(1,n-1):
23     A[i,i-1] = -1./h**2
24     A[i,i] = 2./h**2
25     A[i,i+1] = -1./h**2
26     b[i] = f(xx[i])
27
28 # c.c. x = 1
29 A[n-1,n-2] = -1./h**2
30 A[n-1,n-1] = 3./h**2
31 b[n-1] = f(xx[n-1])
32
33 # resol prob disc
34 u = npla.solve(A, b)
35
36 xx = np.concatenate(([0.],xx,[1.]))
37 u = np.concatenate(([0.],u,[0.]))

```

### 5.3.1 Exercícios

**Exercício 5.3.1.** Considere o PVC

$$-u'' = \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.88)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.89)$$

$$u(1) = -1. \quad (5.90)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Use o MVF para computar aproximações numéricas  $\tilde{u}_h$  com tamanhos de malha  $h = 10^{-1}$ ,  $10^{-2}$ ,  $10^{-3}$ ,  $10^{-4}$  e verifique o erro absoluto  $\varepsilon_{h,\text{abs}} := \|\tilde{u}_h - \mathbf{u}\|$ .

**Exercício 5.3.2.** Considere o PVC

$$-u'' = 2, \quad -1 < x < 1, \quad (5.91)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.92)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.93)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = 1 - x^2$ . Use o MVF com  $n = 20$  subintervalos na malha e verifique o erro absoluto  $\varepsilon_{\text{abs}} := \|\tilde{\mathbf{u}}_h - \mathbf{u}\|$ .

**Exercício 5.3.3.** Considere o seguinte PVC

$$-u'' + u' = f(x), \quad -1 < x < 1, \quad (5.94a)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.94b)$$

$$u'(1) = 0, \quad (5.94c)$$

onde

$$f(x) = \begin{cases} 1 & , x \leq 0 \\ 0 & , x > 0 \end{cases} \quad (5.95)$$

Use uma aproximação adequada pelo MVF para obter o valor aproximado de  $u(0)$  com precisão de 2 dígitos significativos.

**Exercício 5.3.4.** Considere o PVC

$$-u'' = \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.96)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.97)$$

$$u'(1) = 0. \quad (5.98)$$

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Aplique o MVF para computar uma aproximação numérica com erro absoluto de no máximo  $10^{-3}$  na norma  $L^2$ .

## 5.4 Problemas Não-Lineares

Vamos estudar a resolução de **Problemas Não-Lineares de Valores de Contorno** da forma

$$u_{xx} = f(x, u, u_x), \quad a \leq x \leq b, \quad (5.99a)$$

$$u(a) = u_a, \quad (5.99b)$$

$$u(b) = u_b, \quad (5.99c)$$

onde  $f = f(x, u, u_x)$  é uma função não linear para  $u$  ou  $u_x$ .

Empregando o **Método de Diferenças Finitas** (MDF), começamos assumindo uma **malha** uniforme de  $n$ -subintervalos com **nodos**  $x_i = a + (i - 1)h$ , **tamanho de malha**  $h = (b - a)/n$ ,  $i = 1, 2, \dots, n+1$ . Denotando  $u_i \approx u(x_i)$  e aplicando fórmulas de diferenças finitas centrais para  $u_{xx}$  e  $u_x$ , a Eq. (5.99a) fornece

$$\frac{1}{h^2}u_{i-1} - \frac{2}{h^2}u_i + \frac{1}{h^2}u_{i+1} = f\left(x_i, u_i, \frac{1}{2h}u_{i+1} - \frac{1}{2h}u_{i-1}\right), \quad (5.100)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n$ . As condições de contorno Eqs. (5.99b)-(5.99c), fornecem as equações de fechamento

$$u_1 = u_a, \quad (5.101a)$$

$$u_{n+1} = u_b. \quad (5.101b)$$

Com isso, temos que o **problema discreto** associado consiste em: **encontrar  $\mathbf{u} = (u_i)_{i=1}^{n+1}$  solução do seguinte sistema de equações não-lineares**

$$u_1 - u_a = 0, \quad (5.102a)$$

$$-\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} + f\left(x_i, u_i, \frac{1}{2h}u_{i+1} - \frac{1}{2h}u_{i-1}\right) = 0, \quad (5.102b)$$

$$u_{n+1} - u_b = 0. \quad (5.102c)$$

A **resolução do problema discreto** (5.102) pode ser feito com o **Método de Newton**<sup>5</sup>. Para tanto, observamos que o sistema tem a forma vetorial

$$F(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \quad (5.103)$$

onde  $F(\mathbf{u}) = (f_i(\mathbf{u}))_{i=1}^{(n+1)}$  é a função vetorial de componentes

$$f_1(\mathbf{u}) = u_1 - u_a, \quad (5.104a)$$

<sup>5</sup>Isaac Newton, 1642 - 1727, matemático, físico, astrônomo, teólogo e autor inglês. Fonte: [Wikipédia](#).

$$f_i(\mathbf{u}) = -\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} + f\left(x_i, u_i, \frac{1}{2h}u_{i+1} - \frac{1}{2h}u_{i-1}\right), \quad (5.104b)$$

$$f_{n+1}(\mathbf{u}) = u_{n+1} - u_b, \quad (5.104c)$$

com  $i = 2, 3, \dots, n$ . A **iteração do Método de Newton** consiste em

$$\mathbf{u}^{(0)} = \text{aprox. inicial}, \quad (5.105a)$$

$$\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}^{(k)}, \quad (5.105b)$$

onde  $\boldsymbol{\delta}^{(k)}$  é a **atualização de Newton** computada por

$$J_F(\mathbf{u}^{(k)})\boldsymbol{\delta}^{(k)} = -F(\mathbf{u}^{(k)}), \quad (5.106)$$

para  $k = 0, 1, 2, \dots$  até que um critério de parada seja satisfeito. A **matriz jacobiana**<sup>6</sup> é denotada por  $J_F(\mathbf{u}^{(k)}) = [j_{i,j}]_{i,j=1}^{n+1,n+1}$  e tem elementos não nulos

$$j_{1,1} = 1, \quad (5.107)$$

$$j_{i,i-1} = -\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}f_{u_x}\left(x_i, u_i, \frac{1}{2h}u_{i+1} - \frac{1}{2h}u_{i-1}\right), \quad (5.108a)$$

$$j_{i,i} = \frac{2}{h^2} + f_u\left(x_i, u_i, \frac{1}{2h}u_{i+1} - \frac{1}{2h}u_{i-1}\right), \quad (5.108b)$$

$$j_{i,i+1} = -\frac{1}{h^2} + \frac{1}{2h}f_{u_x}\left(x_i, u_i, \frac{1}{2h}u_{i+1} - \frac{1}{2h}u_{i-1}\right), \quad (5.108c)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n$  e

$$j_{n+1,n+1} = 1. \quad (5.109)$$

**Exemplo 5.4.1.** Vamos considerar o seguinte PVC

$$uu_x - u_{xx} = \pi \sin(\pi x) [\pi + \cos(\pi x)], \quad 0 < x < 1, \quad (5.110a)$$

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (5.110b)$$

<sup>6</sup>Carl Gustav Jakob Jacobi, 1804 - 1851, matemático alemão. Fonte: [Wikipédia](#).

Rearranjando os termos, podemos escrevê-lo na forma da Eq. (5.99), com  $u_a = u_b = 0$  e

$$f(x, u, u_x) = uu_x - \pi \sin(\pi x) [\pi + \cos(\pi x)]. \quad (5.111)$$

Com isso, calculamos

$$f_u(x, u, u_x) = u_x, \quad (5.112a)$$

$$f_{u_x}(x, u, u_x) = u. \quad (5.112b)$$

Então, a aplicação do MDF-Newton com  $h = 10^{-1}$  fornece o resultado da Fig. 5.4. A solução exata é  $u(x) = \sin(\pi x)$ .

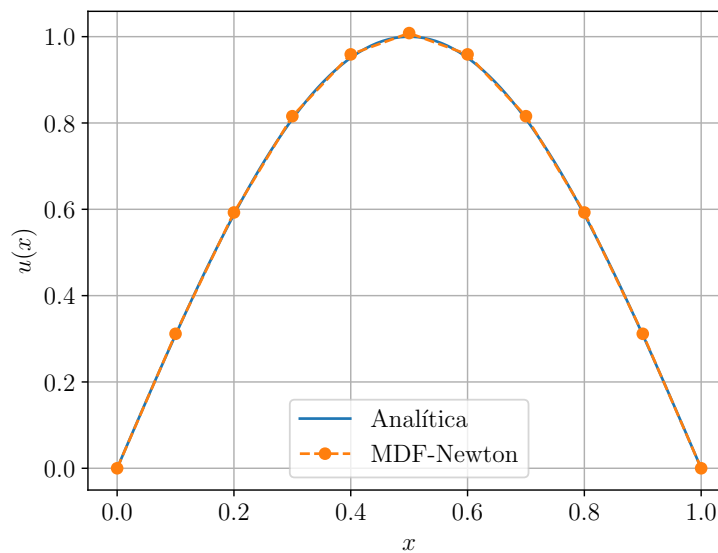


Figura 5.4: Resultado da aplicação do MDF-Newton para o PVC do Ex. 5.4.1.

Código 5.4: mdf-newton.py

```
1 import numpy as np
2 import numpy.linalg as npla
3 from numpy import pi, sin, cos
4
```

```
5 # parâmetros
6 n = 10
7 h = 1./n
8 xx = np.linspace(0., 1., n+1)
9
10 # c.c. Dirichlet
11 ua = 0.
12 ub = 0.
13
14 def f(x, u, ux):
15     return u*ux - pi*sin(pi*x)*(pi + cos(pi*x))
16
17 def fu(x, u, ux):
18     return ux
19
20 def fux(x, u, ux):
21     return u
22
23 # rhs
24 def F(u):
25     y = np.empty(n+1)
26     # f_1
27     y[0] = u[0] - ua
28     # f_i
29     for i in range(1,n):
30         ux = u[i+1]/(2*h) - u[i-1]/(2*h)
31         y[i] = -1./h**2*u[i-1] + 2./h**2*u[i] - 1./h**2*u[i+1] \
32             + f(xx[i], u[i], ux)
33     # f_{n+1}
34     y[n] = u[n] - ub
35
36     return y
37
38 # jacobiana
39 def J(u):
40     J = np.zeros((n+1,n+1))
41     J[0,0] = 1.
42     for i in range(1,n):
43         ux = 1./(2*h)*u[i+1] - 1./(2*h)*u[i-1]
44         J[i,i-1] = -1./h**2 - 1/(2*h)\
```

```

45         * fux(xx[i], u[i], ux)
46         J[i,i] = 2/h**2 + fu(xx[i], u[i], ux)
47         J[i,i+1] = -1./h**2 + 1/(2*h)\
48             * fux(xx[i], u[i], ux)
49     J[n,n] = 1.
50
51     return J
52
53 # aprox inicial
54 u = np.zeros(n+1)
55
56 # iterações de Newton
57 maxiter = 10
58 for k in range(maxiter):
59
60     # passo de Newton
61     dlta = npla.solve(J(u), -F(u))
62
63     # atualização
64     u += dlta
65
66     ndlta = npla.norm(dlta)
67     print(f'{k+1}: norm = {ndlta:.2e}')
68     if (ndlta < 1e-10):
69         print('convergiu.')
70         break

```

### 5.4.1 Exercícios

**Exercício 5.4.1.** Considere o PVC

$$u^2 - u_{xx} = \cos^2(\pi x) + \pi^2 \cos(\pi x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.113a)$$

$$u(0) = 1, \quad (5.113b)$$

$$u(1) = -1. \quad (5.113c)$$

Este problema tem solução analítica  $u(x) = \cos(\pi x)$ . Use o MDF-Newton para computar  $u_h$  aproximações de  $u$  para  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$ . Então, verifique a convergência com base no erro  $\varepsilon_h := \|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}\|_2$ . A convergência tem a taxa esperada? Justifique sua resposta.



**Exercício 5.4.2.** Considere o PVC

$$uu_x - u_{xx} = 2 + x(1 - x)(1 - 2x), \quad 0 < x < 1, \quad (5.114a)$$

$$u_x(0) = 1, \quad (5.114b)$$

$$u(1) = 0. \quad (5.114c)$$

Este problema tem solução analítica  $u(x) = x(1 - x)$ . Use o MDF-Newton para computar  $u_h$  aproximações de  $u$  para  $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$ :

- aplicando as diferenças finitas  $D_{0,h^2}u(x)$  para  $0 < x < 1$  e  $D_{+,h}u(x)$  para  $x = 0$ .
- aplicando as diferenças finitas  $D_{0,h^2}u(x)$  para  $0 < x < 1$  e  $D_{+,h^2}u(x)$  para  $x = 0$ .

Qual dessas formulações tem a melhor taxa de convergência do erro em relação ao passo de malha  $h$ ? Justifique e verifique sua resposta.

**Exercício 5.4.3.** Desenvolva uma versão do método MEF-Newton ([Método de Elementos Finitos](#) com o [Método de Newton](#)) para computar a solução aproximada do PVC dado no Exemplo 5.4.1. Implemente-o e verifique a convergência do método para  $h = 10^{-1}, 10^{-2}$  e  $10^{-3}$ .

**Exercício 5.4.4.** Desenvolva uma versão do método MVF-Newton ([Método de Volumes Finitos](#) com o [Método de Newton](#)) para computar a solução aproximada do PVC dado no Exemplo 5.4.1. Implemente-o e verifique a convergência do método para  $h = 10^{-1}, 10^{-2}$  e  $10^{-3}$ .

**Exercício 5.4.5.** Desenvolva uma versão do método MEF-Newton ([Método de Elementos Finitos](#) com o [Método de Newton](#)) para computar a solução aproximada do PVC dado no Exercício 5.4.2. Implemente-o e verifique a convergência do método para  $h = 10^{-1}, 10^{-2}$  e  $10^{-3}$ .

**Exercício 5.4.6.** Desenvolva uma versão do método MVF-Newton ([Método de Volumes Finitos](#) com o [Método de Newton](#)) para computar a solução aproximada do PVC dado no Exercício 5.4.2. Implemente-o e verifique a convergência do método para  $h = 10^{-1}, 10^{-2}$  e  $10^{-3}$ .

# Capítulo 6

## Equações Diferenciais Parciais

[[tag:revisar]]

Neste capítulo, discutimos alguns tópicos fundamentais da aplicação do método de diferenças finitas para a simulação (aproximação da solução) de equações diferenciais parciais.

### 6.1 Equação de Poisson

[[tag:revisar]]

A equação de Poisson em um domínio retangular  $D = (x_{\text{ini}}, x_{\text{fin}}) \times (y_{\text{ini}}, y_{\text{fin}})$  com condições de contorno de Dirichlet homogêneas refere-se o seguinte problema

$$u_{xx} + u_{yy} = f(x, y), (x, y) \in D, \quad (6.1)$$

$$u(x_{\text{ini}}, y) = 0, y_{\text{ini}} \leq y \leq y_{\text{fin}}, \quad (6.2)$$

$$u(x_{\text{fin}}, y) = 0, y_{\text{ini}} \leq y \leq y_{\text{fin}}, \quad (6.3)$$

$$u(x, y_{\text{ini}}) = 0, x_{\text{ini}} \leq x \leq x_{\text{fin}}, \quad (6.4)$$

$$u(x, y_{\text{fin}}) = 0, x_{\text{ini}} \leq x \leq x_{\text{fin}}, \quad (6.5)$$

onde  $u = u(x, y)$  é a incógnita.

A aplicação do método de diferenças finitas para resolver este problema consiste dos mesmos passos usados para resolver problemas de valores de

contorno (veja Capítulo 5), a saber: 1. construção da malha, 2. discretização das equações, 3. resolução do problema discreto.

### 1. Construção da malha

Tratando-se do domínio retangular  $\overline{D} = [x_{\text{ini}}, x_{\text{fin}}] \times [y_{\text{ini}}, y_{\text{fin}}]$ , podemos construir uma malha do produto cartesiano de partições uniformes dos intervalos  $[x_{\text{ini}}, x_{\text{fin}}]$  e  $[y_{\text{ini}}, y_{\text{fin}}]$ . Mais explicitamente, tomamos

$$x_i := x_{\text{ini}} + (i - 1)h_x, \quad h_x = \frac{x_{\text{fin}} - x_{\text{ini}}}{n_x - 1}, \quad (6.6)$$

$$y_j := y_{\text{ini}} + (j - 1)h_y, \quad h_y = \frac{y_{\text{fin}} - y_{\text{ini}}}{n_y - 1}, \quad (6.7)$$

onde  $i = 1, 2, \dots, n_x$ ,  $j = 1, 2, \dots, n_y$ , sendo  $n_x$  e  $n_y$  o número de subintervalos escolhidos para as partições em  $x$  e  $y$ , respectivamente.

O produto cartesiano das partições em  $x$  e  $y$  nos fornece uma partição do domínio  $\overline{D}$  da forma

$$P(\overline{D}) = \{(x_1, y_1), (x_1, y_2), \dots, (x_i, y_j), \dots, (x_{n_x}, y_{n_y})\}, \quad (6.8)$$

cujos nodos  $(x_i, y_j)$  podem ser indexados (enumerados) por  $k = j + (i - 1)n_x$ . Por simplicidade, no decorrer do texto, assumiremos  $n_x = n_y =: n$  e, por conseguinte,  $h_x = h_y = h$ .

### 2. Discretização das equações

Usando a fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  para a segunda derivada, temos

$$u_{xx}(x, y) = \frac{u(x + h, y) - 2u(x, y) + u(x - h, y)}{h^2} + O(h^2), \quad (6.9)$$

$$u_{yy}(x, y) = \frac{u(x, y + h) - 2u(x, y) + u(x, y - h)}{h^2} + O(h^2). \quad (6.10)$$

Daí, denotando  $u_{ij} \approx u(x_i, y_j)$  temos

$$u_{xx}(x_i, y_j) = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + O(h^2), \quad (6.11)$$

$$u_{yy}(x_i, y_j) = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} + O(h^2). \quad (6.12)$$

Então, da equação 6.1 temos

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} + O(h^2) = f(x_i, y_j). \quad (6.13)$$

Adora, denotando  $u_k := u_{j+(i-1)n}$ , desprezando o termo do erro de truncamento e rearranjando os termos nesta última equação temos

$$\frac{1}{h^2}u_{k-n} + \frac{1}{h^2}u_{k-1} - \frac{4}{h^2}u_k + \frac{1}{h^2}u_{k+1} + \frac{1}{h^2}u_{k+n} = f(x_i, y_j), \quad (6.14)$$

para  $i, j = 2, 3, \dots, n-1$ . Isto é, esta última expressão nos fornece um sistema de  $(n-2)^2$  equações para  $n^2$  incógnitas  $u_k$ .

Para fechar o sistema, usamos as condições de contorno (6.2)-(6.5):

$$u_{1,j} = 0, \quad u_{n,j} = 0, \quad (6.15)$$

$$u_{i,1} = 0, \quad u_{i,n} = 0, \quad (6.16)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Com isso, o problema discreto obtido da aplicação do método de diferenças finitas consiste no sistema linear de  $n^2$  equações (6.14)-e(6.16) para as  $n^2$  incógnitas  $u_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, n^2$ .

### 3. Resolução do problema discreto

O problema discreto (6.14)-(6.16) pode ser escrito na forma matricial

$$A\tilde{u} = b, \quad (6.17)$$

onde o vetor da incógnitas é  $\tilde{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{n^2})$  e o vetor dos termos constantes  $b$  é tal que

$$i = 1, n, j = 1, 2, \dots, n : b_k = 0, \quad (6.18)$$

$$i = 1, 2, \dots, n, j = 1, n : b_k = 0, \quad (6.19)$$

$$i, j = 2, 3, \dots, n-1 : b_k = f(x_i, y_j). \quad (6.20)$$

Além disso, a matriz dos coeficientes  $A$  é tal que

$$i = 1, n, j = 1, 2, \dots, n : a_{k,k} = 1, \quad (6.21)$$

$$i = 1, 2, \dots, n, j = 1, n : a_{k,k} = 1, \quad (6.22)$$

$$i, j = 2, 3, \dots, n-1 : a(k, k-n) = \frac{1}{h^2}, \quad (6.23)$$

$$a(k, k-1) = \frac{1}{h^2}, \quad (6.24)$$

$$a(k, k) = -\frac{4}{h^2}, \quad (6.25)$$

$$a(k, k+1) = \frac{1}{h^2}, \quad (6.26)$$

$$a(k, k+n) = \frac{1}{h^2}. \quad (6.27)$$

Assim sendo, basta empregarmos um método apropriado para resolver o sistema linear (6.17) para obter a solução aproximada de  $u$  nos nodos  $(x_i, y_j)$ .

**Exemplo 6.1.1.** Consideremos o seguinte problema

$$u_{xx} + u_{yy} = -\sin(x)\sin(y), \quad (x, y) \in (0, \pi) \times (0, \pi), \quad (6.28)$$

$$u(0, y) = 0, \quad y \in [0, \pi], \quad (6.29)$$

$$u(\pi, y) = 0, \quad y \in [0, \pi], \quad (6.30)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad x \in [0, \pi], \quad (6.31)$$

$$u(x, \pi) = 0, \quad x \in [0, \pi]. \quad (6.32)$$

A Figura 6.1 mostra um esboço do gráfico da solução aproximada obtida pelo método de diferenças finitas apresentado acima (equações (6.14)-(6.16)) com  $n = 11$ , i.e.  $h = \pi/10$ .

$n$	$\ \tilde{u} - u\ _{L^2}$
6	4,2e-2
11	2,1e-2
21	1,0e-2
41	5,1e-3
81	2,6e-3

Tabela 6.1: Resultados referentes ao Exemplo 6.1.1.

Na Tabela 6.1 temos a norma  $L^2$  da diferença entre a solução aproximada  $\tilde{u}$  e a solução analítica  $u(x, y) = 0,5 \sin(x) \sin(y)$  nos pontos de malha computados com diferentes escolhas de  $n$ .

Os resultados obtidos neste exemplo podem ser obtidos no GNU Octave com o seguinte código:

Notas de Aula - Pedro Konzen \*/\* Licença CC-BY-SA 4.0

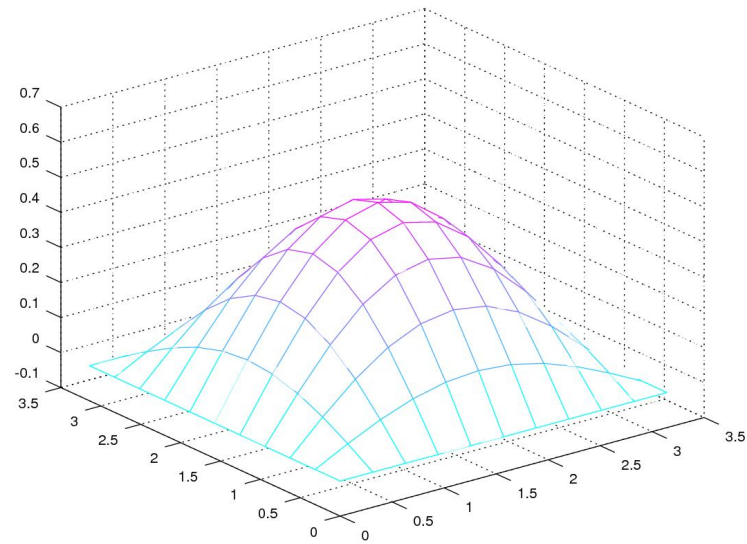


Figura 6.1: Resultado referente ao Exemplo 6.1.1.

```
#params
n=11;
h=pi/(n-1);

#fonte
f = @(x,y) -sin(x).*sin(y);

#malha
x = linspace(0,pi,n);
y = linspace(0,pi,n);

#sistema MDF
A = sparse(n*n,n*n);
b = zeros(n*n,1);

#cc x=0 e x=pi
for i=[1,n]
    for j=1:n
```

```
        k = i + (j-1)*n;
        A(k,k)=1;
        b(k) = 0;
    endfor
endfor

#cc y=0, y=pi
for j=[1,n]
    for i=1:n
        k = i + (j-1)*n;
        A(k,k)=1;
        b(k) = 0;
    endfor
endfor

#nodos internos
for i=2:n-1
    for j=2:n-1
        k = i + (j-1)*n;
        A(k,k-n) = 1/h^2;
        A(k,k-1) = 1/h^2;
        A(k,k) = -4/h^2;
        A(k,k+1) = 1/h^2;
        A(k,k+n) = 1/h^2;

        b(k) = f(x(i),y(j));
    endfor
endfor

u = A\b;

#visu
z = zeros(n,n);
for i=1:n
    for j=1:n
        k = i + (j-1)*n;
        z(i,j) = u(k);
    endfor
```

```

endfor
colormap("cool")
mesh(x,y,z)

ua = zeros(n*n,1);
for i=1:n
    for j=1:n
        k=i+(j-1)*n;
        ua(k) = 0.5*sin(x(i))*sin(y(j));
    endfor
endfor
printf("%d %1.5E %1.1E\n",n,h,norm(u-ua))

```

## Exercícios

[[tag:revisar]]

### Exercício 6.1.1.

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x), (x, y) \in (0, 1)^2, \quad (6.33)$$

$$u(0, y) = 0, y \in [0, 1], \quad (6.34)$$

$$u(1, y) = 0, y \in [0, 1], \quad (6.35)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, x \in [0, 1], \quad (6.36)$$

$$u(x, 1) = 0, x \in [0, 1]. \quad (6.37)$$

onde

$$f(x) = \begin{cases} 1 & , x \leq 0,5 \\ 0 & , x > 0,5 \end{cases} \quad (6.38)$$

Use uma aproximação adequada pelo método de diferenças finitas para obter o valor aproximado de  $u(0,5, 0,5)$  com precisão de 2 dígitos significativos.

## 6.2 Equação do calor

[[tag:revisar]]



A equação do calor definida em  $D = (x_{\text{ini}}, x_{\text{fin}})$  com condição inicial dada e condições de contorno de Dirichlet homogêneas refere-se o seguinte problema

$$u_t - \alpha u_{xx} = f(t, x), \quad t > t_0, \quad x \in D, \quad (6.39)$$

$$u(t_0, x) = u_0(x), \quad x \in D, \quad (6.40)$$

$$u(t, x_{\text{ini}}) = 0, \quad t > t_0, \quad (6.41)$$

$$u(t, x_{\text{fin}}) = 0, \quad t > t_0 \quad (6.42)$$

onde  $u = u(t, x)$  é a incógnita.

O problema acima é um problema de valor inicial com condições de contorno. Uma das estratégias numéricas de solução é o chamado método de Rothe, o qual trata separadamente as discretizações espacial e temporal. Aqui, vamos começar pela discretização espacial e, então, trataremos a discretização temporal.

### Discretização espacial

Na discretização espacial, aplicaremos o método de diferenças finitas. Começamos considerando uma partição do domínio  $P(\overline{D}) = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  com pontos  $x_i = x_{\text{ini}} + (i - 1)h$  igualmente espaçados por  $h = (x_{\text{fin}} - x_{\text{ini}})$ . Então, denotando  $u_i = u_i(t) \approx u(t, x_i)$  e usando da fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$  para as derivadas segundas na equação (6.39), temos

$$\frac{d}{dt} u_i - \alpha \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} = f(t, x_i), \quad (6.43)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n - 1$ . Agora, das condições de contorno, temos  $u_1 = 0$  e  $u_n = 0$ , donde obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\frac{d}{dt} u_2 = -\frac{2\alpha}{h^2} u_2 + \frac{\alpha}{h^2} u_3 + f(t, x_2), \quad (6.44)$$

$$\frac{d}{dt} u_i = \frac{\alpha}{h^2} u_{i-1} - \frac{2\alpha}{h^2} u_i + \frac{\alpha}{h^2} u_{i+1} + f(t, x_i), \quad (6.45)$$

$$\frac{d}{dt} u_{n-1} = \frac{\alpha}{h^2} u_{n-2} - \frac{2\alpha}{h^2} u_{n-1} + f(t, x_{n-1}), \quad (6.46)$$

$$(6.47)$$

onde  $i = 3, 4, \dots, n - 2$  e com condições iniciais dadas por (6.40), i.e.

$$u_j(t_0) = u_0(x), \quad j = 2, 3, \dots, n - 1. \quad (6.48)$$

Ainda, observamos que o sistema (6.44) pode ser escrito de forma mais compacta como

$$\frac{d\tilde{u}}{dt} = A\tilde{u} + \tilde{f}, \quad (6.49)$$

onde  $\tilde{u}(t) = (u_2(t), u_3(t), \dots, u_{n-1}(t))$ ,  $\tilde{f}(t) = (f(t, x_2), f(t, x_3), \dots, f(t, x_{n-1}))$  e  $A$  é uma matriz  $(n-2) \times (n-2)$  da forma

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{2\alpha}{h^2} & \frac{\alpha}{h^2} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{\alpha}{h^2} & -\frac{2\alpha}{h^2} & \frac{\alpha}{h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{h^2} & -\frac{2\alpha}{h^2} & \frac{\alpha}{h^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & 0 & \cdots & \frac{\alpha}{h^2} & -\frac{2\alpha}{h^2} \end{bmatrix}. \quad (6.50)$$

### Discretização temporal

Aqui, vamos usar o método de Euler (veja, ??) para aproximar a solução de (6.50)-(6.48). Para tanto, escolhemos um passo de tempo  $h_t > 0$  e denotamos  $t^{(k)} = t_0 + (k-1)h_t$ ,  $\tilde{u}^{(k)} \approx \tilde{u}(t^{(k)})$  e  $\tilde{f}^{(k)} = \tilde{f}(t^{(k)})$ . Com isso, a iteração do método de Euler nos fornece

$$\tilde{u}^{(1)} = \tilde{u}_0 \quad (6.51)$$

$$\tilde{u}^{(k+1)} = \tilde{u}^{(k)} + h_t (A\tilde{u}^{(k)} + \tilde{f}^{(k)}), \quad (6.52)$$

com  $k = 1, 2, \dots$ . Equivalentemente, escrevemos

$$\tilde{u}^{(1)} = \tilde{u}_0 \quad (6.53)$$

$$\tilde{u}^{(k+1)} = (I - h_t A) \tilde{u}^{(k)} + h_t \tilde{f}^{(k)}. \quad (6.54)$$

**Observação 6.2.1.** O esquema numérico acima é **condicionalmente estável**. Pode-se mostrar a seguinte condição de estabilidade [?, Cap. 12, Seq. 2]:

$$\alpha \frac{h_t}{h^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (6.55)$$

**Exemplo 6.2.1.** Consideremos o seguinte problema

$$u_t - u_{xx} = \sin(x), \quad t > 0, \quad 0 \leq x \leq \pi, \quad (6.56)$$

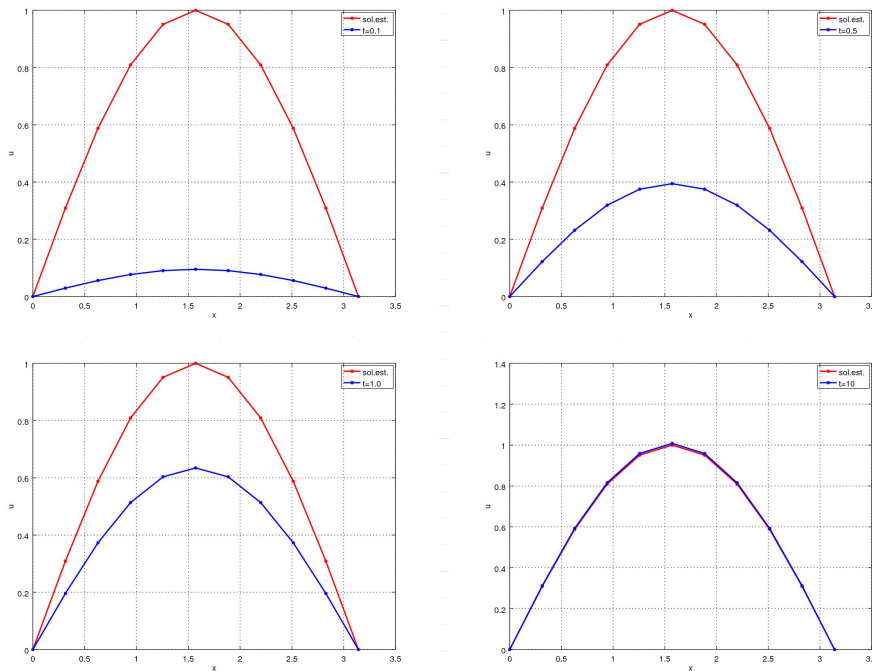


Figura 6.2: Resultados referentes ao Exemplo 6.2.1.

$$u(0,x) = 0, \quad 0 < x < \pi, \quad (6.57)$$

$$u(t,0) = 0, \quad t > 0 \quad (6.58)$$

$$u(t,\pi) = 0, \quad t > 0. \quad (6.59)$$

Este problema tem solução estacionário  $u(x) = \sin(x)$ . Na Figura 6.2, temos o esboço das soluções numéricas em diferentes tempos  $t$  usando o esquema numérico acima com  $h = 10^{-1}$  e  $h_t = 10^{-3}$ .

No GNU Octave, podemos computar os resultados discutidos neste exemplo com o seguinte código:

```
#params
n=11;
h=pi/(n-1);

tf=1;
ht=10^-3;
```

```
nt=round(tf/ht)+1;

#fonte
f = @(x) sin(x);

#malha
t=[0:ht:(nt-1)*ht]';
x=[0:h:(n-1)*h]';

#matriz MDF
A = sparse(n-2,n-2);
A(1,1)=-2/h^2;
A(1,2)=1/h^2;
for i=2:n-3
    A(i,i-1)=1/h^2;
    A(i,i)=-2/h^2;
    A(i,i+1)=1/h^2;
endfor
A(n-2,n-3)=1/h^2;
A(n-2,n-2)=-2/h^2;

#c.i.
u=zeros(n,1);

#iter. de Euler
for k=1:nt-1
    u(2:n-1)=u(2:n-1)+ht*(A*u(2:n-1)+f(x(2:n-1)));
endfor

#visu
uest = @(x) sin(x);
plot(x,uest(x),'r.-',...
     x,u,'b.-');grid
xlabel('x');
ylabel('u');
legend('sol.est.','sol.num.');
```

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 6.2.1.** Considere o seguinte problema

$$u_t - u_{xx} = f(x), \quad t > 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (6.60)$$

$$u(0, x) = 0, \quad 0 < x < 1, \quad (6.61)$$

$$u(t, 0) = 1, \quad t > 0 \quad (6.62)$$

$$u(t, 1) = 0, \quad t > 0. \quad (6.63)$$

com

$$f(x) = \begin{cases} 1 & , x \leq 0,5, \\ 0 & , x > 0,5 \end{cases} \quad (6.64)$$

Use o método de diferenças finitas para obter uma aproximação de  $u(1, 0.5)$  com dois dígitos significativos de precisão.

## 6.3 Equação da onda

[[tag:revisar]]

A equação da onda definida em  $D := (x_{\text{ini}}, x_{\text{fin}})$  com condições iniciais dadas e condições de contorno de Dirichlet homogêneas refere-se o seguinte problema

$$u_{tt} - \alpha u_{xx} = 0, \quad t > t_0, \quad x \in D, \quad (6.65)$$

$$u(x, t_0) = f(x), \quad x \in D, \quad (6.66)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t_0) = g(x), \quad x \in D, \quad (6.67)$$

$$u(x_{\text{ini}}, t) = 0, \quad t > t_0, \quad (6.68)$$

$$u(x_{\text{fin}}, t) = 0, \quad t > t_0 \quad (6.69)$$

onde  $u = u(x, t)$  é a incógnita.

Aqui, para aplicarmos o método de diferenças finitas, vamos escolher os tempos  $t^{(j)} = t_0 + (j - 1)h_t$ ,  $j = 1, 2, \dots, n_t$ , com passo temporal  $h_t > 0$ , e

os pontos  $x_i = x_{\text{ini}} + (i - 1)h_x$ ,  $i = 1, 2, \dots, n_x$ , com passo no espaço espacial  $h_x = (x_{\text{fin}} - x_{\text{ini}})/(n_x - 1)$ .

Da escolha das discretizações temporal e espacial, podemos usar a fórmula de diferenças finitas de ordem 2 para discretizarmos a equação (6.65). Para tanto, denotamos  $u_{i,j} \approx u(x_i, t_j)$  e de (6.65) temos

$$\frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h_t^2} - \alpha \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h_x^2} = 0, \quad (6.70)$$

para  $j = 2, 3, \dots, n_t - 1$  e  $i = 2, 3, \dots, n_x - 1$ . Rearranjando os termos, temos

$$u_{i,j+1} = \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} u_{i-1,j} + 2 \left( 1 - \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} \right) u_{i,j} + \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} u_{i+1,j} - u_{i,j-1}, \quad (6.71)$$

para  $j = 2, 3, \dots, n_t - 1$  e  $i = 2, 3, \dots, n_x - 1$ .

Agora, das condições de contorno (6.68) e (6.69), temos  $u_{1,j} = u_{n_x,j} = 0$ ,  $j = 2, 3, \dots, n_t$ . Com isso, o sistema (6.71) torna-se

$$u_{2,j+1} = 2 \left( 1 - \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} \right) u_{2,j} + \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} u_{3,j} - u_{2,j-1}, \quad (6.72)$$

$$u_{i,j+1} = \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} u_{i-1,j} + 2 \left( 1 - \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} \right) u_{i,j} + \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} u_{i+1,j} - u_{i,j-1}, \quad (6.73)$$

$$u_{n_x-1,j+1} = \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} u_{n_x-2,j} + 2 \left( 1 - \alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} \right) u_{n_x-1,j} - u_{n_x-1,j-1}, \quad (6.74)$$

$$(6.75)$$

para  $i = 3, 4, \dots, n_x$  e  $j = 2, 3, \dots, n_t$ . Este sistema de equações pode ser escrita na seguinte forma matricial

$$\begin{bmatrix} u_{2,j+1} \\ u_{3,j+1} \\ \vdots \\ u_{n_x-1,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda & 2(1-\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{2,j} \\ u_{3,j} \\ \vdots \\ u_{n_x-1,j} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u_{2,j-1} \\ u_{3,j-1} \\ \vdots \\ u_{n_x-1,j-1} \end{bmatrix}, \quad (6.76)$$

para  $j = 2, 3, \dots, n_t - 1$ , onde  $\lambda := \alpha h_t^2 / h_x^2$ .

Esta última equação (6.76) nos permite computar iterativamente a aproximação  $u_{i,j+1}$  a partir das aproximações  $u_{i,j}$  e  $u_{i,j-1}$ . Para inicializar as iterações, precisamos de  $u_{i,1}$  e  $u_{i,2}$ ,  $i = 2, 3, \dots, n_x$ . A primeira é dada pela condição inicial (6.66), da qual temos

$$u_{i,1} = f(x_i), \quad i = 2, 3, \dots, n_t. \quad (6.77)$$

Agora, usando a fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem 1 na condições inicial (6.67), obtemos

$$u_{i,2} = u_{i,1} + h_t g(x_i), \quad i = 2, 3, \dots, n_t. \quad (6.78)$$

Com tudo isso, observamos que as equações (6.77), (6.78) e (6.76), nesta ordem, nos fornece um algoritmo iterativo no tempo para computar as aproximações da solução  $u$ .

**Observação 6.3.1.** Pode-se mostrar a seguinte condição de estabilidade

$$\alpha \frac{h_t^2}{h_x^2} \leq 1. \quad (6.79)$$

**Exemplo 6.3.1.** Consideremos o seguinte problema

$$u_{tt} - u_{xx} = 0, \quad t > 0, \quad 0 < x < 1, \quad (6.80)$$

$$u(0, x) = x(1 - x), \quad 0 < x < 1, \quad (6.81)$$

$$u_t(0, x) = 0, \quad 0 < x < 1, \quad (6.82)$$

$$u(t, 0) = 0, \quad t > 0 \quad (6.83)$$

$$u(t, \pi) = 0, \quad t > 0. \quad (6.84)$$

Na Figura 6.3, temos o esboço das soluções numéricas em diferentes tempos  $t$  usando o esquema numérico acima com  $h_t = 10^{-2}$  e  $h_x = 10^{-1}$ .

No GNU Octave, podemos computar os resultados discutidos neste exemplo com o seguinte código:

```
#params
nx=11;
```

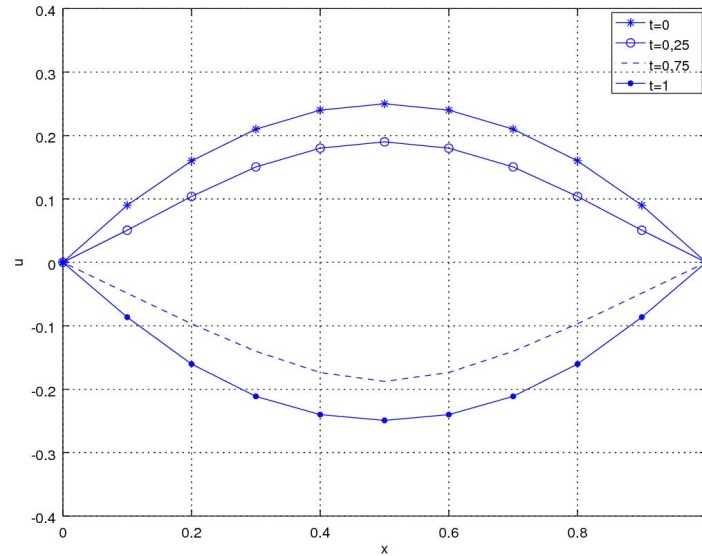


Figura 6.3: Resultados referentes ao Exemplo 6.3.1.

```

hx=1/(nx-1);

tf=1;
ht=10^-2;
nt=round(tf/ht)+1;

lambda = ht^2/hx^2;

#malha
t=[0:ht:(nt-1)*ht]';
x=[0:hx:(nx-1)*hx]';

#u
u0=zeros(nx,1);
u1=zeros(nx,1);
u=zeros(nx,1);

#c.i. 1

```



```
for i=2:nx-1
    u0(i)=x(i)*(1-x(i));
endfor

#c.i. 2
u1=zeros(nx,1);
for i=2:nx-1
    u1(i)=u0(i)+ht*0;
endfor

#matriz MDF
A = sparse(nx-2,nx-2);
A(1,1)=2*(1-lambda);
A(1,2)=lambda;
for i=2:nx-3
    A(i,i-1)=lambda;
    A(i,i)=2*(1-lambda);
    A(i,i+1)=lambda;
endfor
A(nx-2,nx-3)=lambda;
A(nx-2,nx-2)=2*(1-lambda);

#iteracoes
for k=2:nt-1
    u(2:nx-1)=A*u1(2:nx-1) - u0(2:nx-1);
    u0=u1;
    u1=u;
endfor

#visu
plot(x,u1,'b-');grid
xlabel('x');
ylabel('u');
```

## Exercício

[[tag:revisar]]

**Exercício 6.3.1.** Considere o seguinte problema

$$u_{tt} - u_{xx} = 0, \quad t > 0, \quad 0 < x < 1, \quad (6.85)$$

$$u(0, x) = x(1 - x), \quad 0 < x < 1, \quad (6.86)$$

$$u_t(0, x) = 1, \quad 0 < x < 1, \quad (6.87)$$

$$u(t, 0) = 0, \quad t > 0 \quad (6.88)$$

$$u(t, \pi) = 0, \quad t > 0. \quad (6.89)$$

Use o método de diferenças finitas para obter uma aproximação de  $u(0,75, 1)$  com dois dígitos significativos de precisão.

# Resposta dos Exercícios

**Exercício 1.1.1.**  $f'(\pi/3) = -0.866025e+0, h = 10^{-7}$

**Exercício 1.1.2.**  $f'(\pi/3) = -0.866025e+0, h = 10^{-6}$

**Exercício 1.1.3.**  $f'(\pi/3) = -0.866025e+0, h = 10^{-3}$

**Exercício 1.1.4.** a)  $D_{+,h}f(2.5) = 1,05949$ ; b)  $D_{-,h}f(2.5) = 1,05877$ ;  
c)  $D_{0,h^2}f(2.5) = 1,05913$ ;

**Exercício 1.1.5.**

$i$	$dy/dx$
1	$4.0e-2$
2	$7.5e-1$
3	$1.3e+0$
4	$1.1e+0$
5	$7.5e-1$
6	$8.0e-1$

**Exercício 1.1.8.**

$i$	$dy/dx$
1	$5.0e-2$
2	$7.5e-1$
3	$1.3e+0$
4	$1.1e+0$
5	$7.5e-1$
6	$8.5e-1$

**Exercício 1.2.1.** a)  $7.25162e-2$ ; b)  $7.24701e-2$ ; c)  $7.24696e-2$ ; d)  $7.24696e-2$ ;  $h = 10^{-2}$ ;

**Exercício 1.2.2.**  $f''(1) = 3.92288e+0$ ,  $h = 10^{-3}$ .

**Exercício 1.2.3.** 4.0;

**Exercício 1.3.1.** 1.05913

**Exercício 1.3.2.**

- a)  $\frac{1}{12h} [3f(x-4h) - 16f(x-3h) + 36f(x-2h) - 48f(x-h) + 25f(x)]$   
 b)  $\frac{1}{12h} [-f(x-3h) + 6f(x-2h) - 18f(x-h) + 10f(x) + 3f(x+h)]$   
 c)  $\frac{1}{12h} [f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)]$   
 d)  $\frac{1}{12h} [-3f(x-h) - 10f(x) + 18f(x+h) - 6f(x+2h) + f(x+3h)]$   
 e)  $\frac{1}{12h} [-25f(x) + 48f(x+h) - 36f(x+2h) + 16f(x+3h) - 3f(x+4h)]$

**Exercício 1.3.3.**

$i$	1	2	3	4	5	6
$dy/dx$	$1,7500e-1$	$7,2500e-1$	$1,4250e+0$	$1,1250e+0$	$4,2500e-1$	$1,6750e+0$

**Exercício 2.1.2.** a) 1,05919; b) 1,05916; c) 1,05913

**Exercício 3.1.1.**  $I = 1.08414e-1$ , a)  $\tilde{I} = 1.09356e-01$ ,  $|\tilde{I} - I| = 9.4e-4$ ,  
 b)  $\tilde{I} = 1.08413e-01$ ,  $|\tilde{I} - I| = 7.1e-07$ , c)  $\tilde{I} = 1.07942e-01$ ,  $|\tilde{I} - I| = 4.7e-04$

**Exercício 3.1.2.** a)  $3,33647e-1$ ; b)  $1,71368e-1$ ; c)  $2,79554e-1$

**Exercício 3.1.3.** a)  $4,02000e-1$ ; b)  $1,04250E+0$ ; c)  $8,08667e-1$

**Exercício 3.1.4.** a)  $\tilde{I} = 8.08667e-01$ , b)  $\tilde{I}_1 = 3.82333e-01$ , c)  $\tilde{I}_2 = 4.29333e-01$ , d)  $\tilde{\tilde{I}} = 8.11667e-01$ . (mais exata)

**Exercício 3.1.5.** Use um procedimento semelhante aquele usado para determinar a ordem do erro de truncamento da regra de Simpson.

**Exercício 3.1.6.**  $h := \frac{(b-a)}{3}$ ,

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{3h}{2} \left[ f\left(a + \frac{1}{3}(b-a)\right) + f\left(a + \frac{2}{3}(b-a)\right) \right] + O(h^3).$$

**Exercício 3.2.1.** a)  $2.69264e-1$ ; b)  $2.68282e-1$ ; c)  $2.68937e-1$

**Exercício 3.2.2.** Dica: para cada quadratura, observe a convergência das aproximações com sucessivos refinamentos no número de intervalos.

**Exercício 3.2.3.** a)  $8.12000e-1$ ; b)  $1.03850$ ; c)  $8.11667e-1$

**Exercício 3.3.1.**  $2,68953e-1$

**Exercício 3.4.1.** 1

**Exercício 3.4.2.** Dica: use a regra do ponto médio.

**Exercício 3.4.3.**  $x_1 = 0$ ,  $\omega_1 = 2$

**Exercício 3.4.4.**

$$\omega_1 + \omega_2 = 1 \tag{3.85}$$

$$x_1\omega_1 + x_2\omega_2 = \frac{1}{2} \quad (3.86)$$

$$x_1^2\omega_1 + x_2^2\omega_2 = \frac{1}{3} \quad (3.87)$$

**Exercício 3.4.5.** Dica: consulte o grau de exatidão da regra de Simpson.

**Exercício 3.5.1.** a)  $-2.61712e-1$ ; b)  $2.55351e-1$ ; c)  $8.97510e-2$ ; d)  $1.27411e-1$ ; e)  $1.21016e-1$ .

**Exercício 3.5.2.** a)  $-1.54617e-1$ ; b)  $-1.50216e-1$ ; c)  $-1.47026e-1$ ; d)  $-1.47190e-1$ ; e)  $-1.47193e-1$ .

**Exercício 3.5.3.** a)  $1.21016e-1$ ; b)  $1.21744e-1$ ; c)  $1.21744e-1$

**Exercício 3.5.4.**  $5.93738e-1$

**Exercício 3.6.1.** a)  $-2,84951E-01$ ; b)  $2,66274e-01$ ; c)  $1,49496e-01$ ; d)  $1,60085e-01$ ; e)  $1,59427e-01$ .

**Exercício 3.6.2.** a)  $-1,03618e-1$ ; b)  $-5,56446e-2$ ; c)  $-4,19168e-2$

**Exercício 3.6.3.** a)  $-1,31347$ ; b)  $-1,23313$ ; c)  $-1,26007$

**Exercício 3.7.1.**  $1,2e-1$

**Exercício 4.1.1.**  $\tilde{y}(1.5) = 3.14159e-1$ ,  $e(1, h) = 3.1E-01$

**Exercício 4.1.2.**  $h = 10^{-6}$ ,  $\tilde{y}(1) = 1.8134e+0$

**Exercício 4.1.3.**  $-5.58858e-1$

**Exercício 4.1.4.**  $|\tilde{y}(1) - y(1)| = 3.4e+2$ . Dica: verifique as hipóteses do Teorema 4.1.1.

	$h$	$\tilde{y}(1)$	$\ \tilde{y}(1) - y(1)\ $
<b>Exercício 4.1.5.</b>	$10^{-1}$	(2.387, 5.077)	$7.4e-1$
	$10^{-2}$	(2.500, 5.693)	$1.1e-1$
	$10^{-3}$	(2.520, 5.793)	$1.2e-2$
	$10^{-4}$	(2.523, 5.803)	$1.2e-3$
	$10^{-5}$	(2.523, 5.804)	$1.2e-4$
	$10^{-6}$	(2.523, 5.804)	$1.2e-5$

**Exercício 4.1.6.** Dica: O PVI do Exemplo 4.1.4 é um problema rígido.

**Exercício 4.1.7.** Dica: use o polinômio de Taylor de grau 2 de  $e^\delta$ .

**Exercício 4.1.8.** Dica: estude a demonstração do Teorema 4.1.1.

**Exercício 4.1.9.**  $h = \sqrt{2\delta/M}$ . Dica: Encontre o mínimo de  $E(h) := M/2 + \delta/h^2$ .

	$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
<b>Exercício 4.2.1.</b>	$1e-1$	$-1.52293e-1$	$1.7e-3$
	$1e-2$	$-1.50602e-1$	$1.8e-5$
	$1e-3$	$-1.50585e-1$	$1.8e-7$
	$1e-4$	$-1.50584e-1$	$1.8e-9$

**Exercício 4.2.2.** Dica: o gráfico de  $e(t; h = 10^{-1})$  tem a forma de uma função exponencial crescente.

**Exercício 4.2.3.**  $h = 10^{-2}$ ,  $\tilde{y}(1) = -1.50584e-1$

**Exercício 4.2.4.** Dica:  $y(2) = -2.10171e-1$ .

**Exercício 4.2.5.** Dica:  $y(2) = 2.90306e+3$ .

**Exercício 4.3.1.** a)  $-6.00654e-1$ ; b)  $-6.00703e-1$ ; c)  $-5.99608e-1$

**Exercício 4.3.3.** Dica: o gráfico de  $e(t; h = 10^{-1})$  tem a forma de uma função exponencial crescente para todos os métodos de R-K.

**Exercício 4.3.5.** Dica:  $y(2) = -2.10171e-1$ .

**Exercício 4.3.6.** Dica:  $y(3) = 2.90306e+3$ .

**Exercício 4.4.1.** Dica.

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + hf(t^{(k+1)}, y^{(k+1)}) \quad (4.164)$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h(50y^{(k+1)} + 50) \quad (4.165)$$

$$y^{(k+1)} = \frac{y^{(k)} + 50h}{1 - 50h}. \quad (4.166)$$

**Exercício 4.4.2.** Dica: consulte a condição de estabilidade (4.160).

**Exercício 4.4.4.**  $\tilde{y}(1.5) = 3.14159e-1$ ,  $\varepsilon = 3.1E-01$

**Exercício 4.4.7.**

$$y(t^{(k)}) = y_0 e^{\lambda t^{(k)}} \quad (4.171)$$

$$= y_0 \lim_{h \rightarrow 0^+} (1 - h\lambda)^{-t^{(k)}/h} \quad (4.172)$$

$$= y_0 \lim_{h \rightarrow 0^+} (1 - h\lambda)^{-k} \quad (4.173)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0^+} y^{(k)}. \quad (4.174)$$

**Exercício 4.5.1.** a)  $-6.00696e-1$ ; b)  $-5.96694e-1$ ; c)  $-5.96161e-1$

**Exercício 4.5.2.** Dica: solução analítica é  $y(t) = \frac{1}{2} \cos(t) - \frac{1}{2} \sin(t)$ .

a) Inicialização pelo Método do Ponto Médio,  $\tau = O(h^2)$ ; b) Inicialização pelo Método de RK-4,  $\tau = O(h^4)$ .



**Exercício 4.5.3.** Dica: use um Método de R-K com  $O(h^P)$ ,  $p \geq 3$ , como inicializador.

**Exercício 4.5.4.** Dica: solução analítica é  $y(t) = e^t - \frac{1}{2} \sin(t) - \frac{1}{2} \cos(t)$ .

**Exercício 4.5.5.** Dica:  $\tau = O(h^4)$ .

**Exercício 4.6.1.**  $-5.99240e-1$

	$h$	$\ \tilde{u} - u\ _{L^2}$
<b>Exercício 5.1.1.</b>	$10^{-1}$	$3.9e-3$
	$10^{-2}$	$1.2e-4$
	$10^{-3}$	$3.9e-6$
	$10^{-4}$	$1.2e-7$

**Exercício 5.1.2.**  $\varepsilon_{\text{abs}} = 3.1e-14$ .

**Exercício 5.1.3.**  $7,2e-1$

**Exercício 5.1.4.** b) resultado mais preciso.

**Exercício 5.2.3.**  $7,2e-1$

**Exercício 5.3.3.**  $7,2e-1$

**Exercício 5.4.1.**

$h$	$\varepsilon_h$
$10^{-1}$	$4.0e-03$
$10^{-2}$	$1.3e-04$
$10^{-3}$	$4.0e-06$
$10^{-4}$	$1.3e-07$

**Exercício 5.4.2.** b) tem melhor taxa de convergência.

**Exercício 6.1.1.** Código.  $2,9e-2$

**Exercício 6.2.1.** Código.  $5,6e-1$

**Exercício 6.3.1.** Código.  $6,3e-2$

# Bibliografia

- [1] Björk, A.. Numerical Methods for Least Squares Problems. SIAM, 1996.
- [2] Burden, R.L.; Faires, J.D.; Burden, A.M.. Análise Numérica. 3. ed., Cengage Learning, 2016. ISBN: 978-8522123414. Acesso [SABI+UFRGS](#).
- [3] Isaacson, E.; Keller H.B.. Analysis of Numerical Methods. Dover, 1994.
- [4] Lemire, D.. Number Parsing at a Gigabyte per Second. Software: Practice and Experience, 51(8), 2021, 1700-1727. DOI: [10.1002/spe.2984](#).
- [5] Nocedal, J.; Wright, S.J.. Numerical Optimization. Springer, 2006.
- [6] Press, W.H.; Teukolsky, S.A.; Vetterling, W.T.; Flannery, B.P.. Numerical Recipes. 3. ed., Cambridge University Press, 2007.
- [7] Ralston, A.; Rabinowitz, P.. A First Course in Numerical Analysis. 2. ed., Dover: New York, 2021. ISBN 048641454X.
- [8] Stoer, J.; Bulirsch, R.. Introduction to numerical analysis. 2. ed., Springer-Verlag, 1993.