

# Matemática Numérica II

Pedro H A Konzen

4 de julho 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

Capa	i
Licença	ii
Prefácio	iii
Sumário	v
<b>1 Derivação</b>	<b>1</b>
1.1 Derivadas de primeira ordem . . . . .	1
1.1.1 Desenvolvimento por polinômio de Taylor . . . . .	3
1.2 Derivadas de segunda ordem . . . . .	8
1.3 Diferenças finitas por polinômios interpoladores . . . . .	11
1.3.1 Fórmulas de dois pontos . . . . .	12
1.3.2 Fórmulas de cinco pontos . . . . .	14
<b>2 Técnicas de extrapolação</b>	<b>16</b>
2.1 Extrapolação de Richardson . . . . .	16
2.1.1 Sucessivas extrapolações . . . . .	21
2.1.2 Exercícios . . . . .	22
<b>3 Integração</b>	<b>24</b>
3.1 Regras de Newton-Cotes . . . . .	24
3.1.1 Regras de Newton-Cotes fechadas . . . . .	25
3.1.2 Regras de Newton-Cotes abertas . . . . .	28
3.2 Regras compostas de Newton-Cotes . . . . .	30
3.2.1 Regra composta do ponto médio . . . . .	31
3.2.2 Regra composta do trapézio . . . . .	31

3.2.3	Regra composta de Simpson . . . . .	32
3.3	Quadratura de Romberg . . . . .	35
3.4	Grau de exatidão . . . . .	36
3.5	Quadratura Gauss-Legendre . . . . .	39
3.5.1	Intervalos de integração arbitrários . . . . .	45
3.6	Quadraturas gaussianas com pesos . . . . .	48
3.6.1	Quadratura de Gauss-Chebyshev . . . . .	48
3.6.2	Quadratura de Gauss-Laguerre . . . . .	50
3.6.3	Quadratura de Gauss-Hermite . . . . .	51
3.7	Método de Monte Carlo . . . . .	53
<b>4</b>	<b>Problema de Valor Inicial</b>	<b>55</b>
4.1	Método de Euler . . . . .	55
4.1.1	Análise Numérica . . . . .	59
4.2	Métodos de Runge-Kutta . . . . .	66
4.2.1	Métodos de Runge-Kutta de ordem 2 . . . . .	66
4.2.2	Método de Runge-Kutta de ordem 4 . . . . .	68
4.3	Método adaptativo com controle de erro . . . . .	70
4.4	Métodos de passo múltiplo . . . . .	73
4.4.1	Métodos de Adams-Bashforth . . . . .	74
<b>5</b>	<b>Problema de valor de contorno</b>	<b>78</b>
5.1	Método de diferenças finitas . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Equações Diferenciais Parciais</b>	<b>85</b>
6.1	Equação de Poisson . . . . .	85
6.2	Equação do calor . . . . .	91
6.3	Equação da onda . . . . .	96
	<b>Respostas dos Exercícios</b>	<b>102</b>

# Capítulo 1

## Derivação

[[tag:revisar]]

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

### 1.1 Derivadas de primeira ordem

[[tag:revisar]]

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 razão fundamental, i.e.

$$f'(x) \approx \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x)}{h}}_{D_h f(x)}. \quad (1.2)$$

Analisando a Figura 1.1 vemos que, 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  $(x+h, f(x+h))$ .

---

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

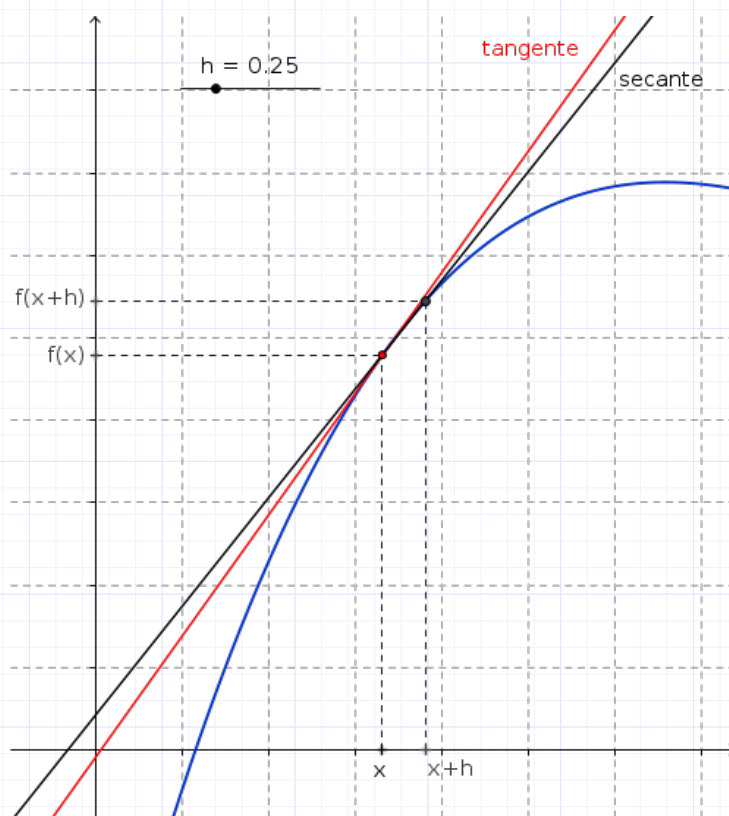


Figura 1.1: Interpretação geométrica da aproximação da derivada pela razão fundamental. Veja no [Geogebra](#).

**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 razão fundamental (1.2), temos

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_h f(x) = \frac{f\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - f\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h} \quad (1.3)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h}. \quad (1.4)$$

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

$h$	$Df(\pi/3)$
$10^{-1}$	4,55902E-1
$10^{-2}$	4,95662E-1
$10^{-3}$	4,99567E-1
$10^{-5}$	4,99996E-1
$10^{-10}$	5.00000E-1

Tabela 1.1: Valores aproximados da derivada de  $f(x) = \sin(x)$  no ponto  $x = \pi/6$  usado a expressão (1.2).

No GNU Octave, podemos fazer estes cálculos com o seguinte código:

```
f = @(x) sin(x);
Df = @(x,h) (f(x+h)-f(x))/h;
x=pi/3;
h=1e-1;
printf('%1.5e\n',Df(x,h))
```

A aproximação (1.2) é uma **fórmula de diferenças finitas**. Existem várias aproximações deste tipo que podem ser derivadas. Além disso, tais derivações nos permitem estimar o erro na utilização de tais fórmulas para a aproximação de derivadas. Na sequência, discutiremos o desenvolvimento de fórmulas de diferenças finitas usando polinômios de Taylor.

### 1.1.1 Desenvolvimento por polinômio de Taylor

[[tag:revisar]]



Aqui, discutimos a obtenção de fórmulas de diferenças finitas via polinômio de Taylor.

### Diferenças finitas progressiva de ordem $h$

[[tag:revisar]]

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

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + O(h^2). \quad (1.5)$$

Agora, isolando  $f'(x)$ , obtemos

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h). \quad (1.6)$$

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

$$D_{+,h}f(x) := \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (1.7)$$

Observemos que a ordem da fórmula se refere a ordem 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

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_{+,h}f(x) = \frac{f\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - f\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h} \quad (1.8)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3} + h\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3}\right)}{h}. \quad (1.9)$$

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  $D_{+,h}f(\pi/3)$ .

No GNU Octave, podemos fazer estes cálculos com o seguinte código:

```
f = @(x) sin(x);
Df = @(x,h) (f(x+h)-f(x))/h;
x=pi/3;
h=1e-1;
printf('%1.5e %1.1e\n',Df(x,h),abs(cos(x)-Df(x,h)))
```

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

**Observação 1.1.1.** No exemplo acima (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  $h$  (veja, 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 do de truncamento. Isto se deve a dominância dos erros de arredondamento para valores muito pequenos de  $h$ .

Para mais informações sobre o comportamento do erro de arredondamento em fórmulas de diferenças finitas, veja, por exemplo, [REAMAT - Cálculo Numérico - Versão GNU Octave - Diferenças Finitas - Erro de arredondamento](#).

### Diferenças finitas regressiva de ordem $h$

[[tag:revisar]]

Substituindo  $h$  por  $-h$  na equação (1.5), obtemos

$$f(x - h) = f(x) - hf'(x) + O(h^2), \quad (1.10)$$

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

$$D_{-,h}f(x) = \frac{f(x) - f(x - h)}{h}. \quad (1.11)$$

**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

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_{-,h}f(x) = \frac{f\left(\frac{\pi}{3}\right) - f\left(\frac{\pi}{3} - h\right)}{h} \quad (1.12)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3} - h\right)}{h}. \quad (1.13)$$

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  $D_{-,h}f(\pi/3)$ .

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

No GNU Octave, podemos fazer estes cálculos com o seguinte código:

```
f = @(x) sin(x);
Df = @(x,h) (f(x)-f(x-h))/h;
x=pi/3;
h=1e-1;
printf('%1.5E %1.1E\n',Df(x,h),abs(cos(x)-Df(x,h)))
```

### Diferenças finitas central de ordem $h^2$

[[tag:revisar]]

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

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + O(h^3) \quad (1.14)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + O(h^3). \quad (1.15)$$

Então, subtraindo esta segunda equação da primeira, temos

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + O(h^3). \quad (1.16)$$

Agora, isolando  $f'(x)$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2), \quad (1.17)$$

o que nos fornece a chamada fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$

$$D_{0,h^2}f(x) := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \quad (1.18)$$

**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

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx D_{0,h^2}f(x) = \frac{f\left(\frac{\pi}{3}+h\right) - f\left(\frac{\pi}{3}-h\right)}{2h} \quad (1.19)$$

$$= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3}+h\right) - \sin\left(\frac{\pi}{3}-h\right)}{2h}. \quad (1.20)$$

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

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  $D_{0,h^2}f(\pi/3)$ .

No GNU Octave, podemos fazer estes cálculos com o seguinte código:

```
f = @(x) sin(x);
Df = @(x,h) (f(x+h)-f(x-h))/(2*h);
x=pi/3;
h=1e-1;
printf('%1.5E %1.1E\n',Df(x,h),abs(cos(x)-Df(x,h)))
```

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 1.1.1.** Calcule aproximações da derivada de

$$f(x) = \frac{\text{sen}(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (1.21)$$

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 1.1.2.** 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 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.

## 1.2 Derivadas de segunda ordem

[[tag:revisar]]

Diferentemente do que é costumeiro 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 de primeira ordem. Na sequência, desenvolveremos e aplicaremos uma fórmula de diferenças finitas central para a aproximação de derivadas de segunda ordem.

Consideremos os seguintes polinômios de Taylor de grau 3 de  $f(x)$  em torno do ponto  $x$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4), \quad (1.22)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4). \quad (1.23)$$

$$(1.24)$$

Somando estas duas equações, obtemos

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + O(h^4). \quad (1.25)$$

Então, isolando  $f''(x)$  temos

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2). \quad (1.26)$$

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

$$D_{0,h^2}^2 f(x) := \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \quad (1.27)$$

**Exemplo 1.2.1.** Consideremos 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.

$$f''(x) \approx D_{0,h^2} D_{0,h^2} f(x) = \frac{D_{0,h^2} f(x+h) - D_{0,h^2} f(x-h)}{2h} \quad (1.28)$$

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

$$f''(x) \approx D_{0,h^2}^2 f(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \quad (1.29)$$

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 valores moderados de  $h$ ) do que as sucessivas aplicações de  $D_{0,h^2}$ . De fato, uma rápida inspeção de (1.28) mostra que

$$D_{0,h^2} D_{0,h^2} f(x) = \underbrace{\frac{f(x+2h) - 2f(x) + f(x-2h)}{4h^2}}_{D_{0,(2h)^2}^2 f(x)}. \quad (1.30)$$

No GNU Octave, podemos fazer estes cálculos com o seguinte código:

Notas de Aula - Pedro Konzen \*/\* Licença CC-BY-SA 4.0

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	$1,2E-07$

```

f = @(x) sin(x) + x^2;
Df = @(x,h) (f(x+h)-f(x-h))/(2*h);
DDf = @(x,h) (Df(x+h,h)-Df(x-h,h))/(2*h);
D2f = @(x,h) (f(x+h) - 2*f(x) + f(x-h))/(h^2);
x=pi/6;
h=1e-1;
printf('%1.5E %1.1E %1.5E %1.1E\n',...
    DDf(x,h),abs(1.5-DDf(x,h)),...
    D2f(x,h),abs(1.5-D2f(x,h)))

```

## Exercícios

[[tag:revisar]]

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

$$f(x) = \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (1.31)$$

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

- 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 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

[[tag:revisar]]

Aqui, discutimos a obtenção de 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

$$f(x) = p(x) + R_{n+1}(x), \quad (1.32)$$

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

$$R_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=1}^{n+1} (x - x_j). \quad (1.33)$$

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

Deste modo, a ideia para obtermos as fórmulas de diferenças é aproximar-mos  $f'(x)$  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  $(n +$*



### 1.3. DIFERENÇAS FINITAS POR POLINÔMIOS INTERPOLADORES

1) continuamente diferenciável, então o resíduo  $R_{n+1}^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - p^{(k)}(x)$  é

$$R_{n+1}^{(k)} = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1-k)!} \prod_{j=1}^{n+1-k} (x - \xi_j), \quad (1.34)$$

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].  $\square$

#### 1.3.1 Fórmulas de dois pontos

[[tag:revisar]]

Seja  $p(x)$  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.

$$f(x) = p(x) + R_2(x) \quad (1.35)$$

$$= f(x_1) \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + f(x_2) \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} + R_2(x). \quad (1.36)$$

Denotando  $h = x_2 - x_1$ , temos

$$f(x) = f(x_1) \frac{x - x_2}{-h} + f(x_2) \frac{x - x_1}{h} + R_2(x). \quad (1.37)$$

e, derivando com respeito a  $x$

$$f'(x) = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h} + R_2^{(1)}(x), \quad (1.38)$$

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

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

$$f(x) = \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x)}{h}}_{D_{+,h}f(x)} + O(h). \quad (1.39)$$

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

$$f(x) = \underbrace{\frac{f(x) - f(x-h)}{h}}_{D_{-,h}f(x)} + O(h). \quad (1.40)$$

### Fórmulas de três pontos

[[tag:revisar]]

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.

$$f(x) = f(x_1) \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \quad (1.41)$$

$$+ f(x_2) \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} \quad (1.42)$$

$$+ f(x_3) \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} + R_3(x). \quad (1.43)$$

Derivando em relação a  $x$ , obtemos

$$f'(x) = f(x_1) \frac{(x_2-x_3)(2x-x_2-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_2-x_3)} \quad (1.44)$$

$$+ f(x_2) \frac{(x_1-x_3)(-2x+x_1+x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_2-x_3)} \quad (1.45)$$

$$+ f(x_3) \frac{(x_1-x_2)(2x-x_1-x_2)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_2-x_3)} + R_3^{(1)}(x). \quad (1.46)$$

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

$$D_{+,h_1,h_2}f(x) = \frac{1}{h_1h_2(h_1+h_2)} (-h_2(2h_1+h_2)f(x) \quad (1.47)$$

### 1.3. DIFERENÇAS FINITAS POR POLINÔMIOS INTERPOLADORES

$$+ (h_1 + h_2)^2 f(x + h_1) \quad (1.48)$$

$$- h_1^2 f(x + h_1 + h_2) \Big). \quad (1.49)$$

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

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

Escolhendo  $x = x_2$ ,  $x_1 = x - h$  e  $x_3 = x + h$  na equação (1.44), obtemos a **fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$**

$$D_{0,h^2} = \frac{1}{2h} [f(x + h) - f(x - h)]. \quad (1.51)$$

Por fim, escolhendo  $x = x_3$ ,  $x_1 = x - 2h$  e  $x_2 = x - h$  na equação (1.44), obtemos a **fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h^2$**

$$D_{-,h^2} = \frac{1}{2h} [3f(x) - 4f(x - h) + f(x - 2h)]. \quad (1.52)$$

#### 1.3.2 Fórmulas de cinco pontos

[[tag:revisar]]

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

$$f(x) = \sum_{i=1}^5 f(x_i) \left( \prod_{j=1, j \neq i}^5 \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) + R_5(x). \quad (1.53)$$

Calculando a derivada em relação a  $x$ , temos

$$f'(x) = \sum_{i=1}^5 f(x_i) \left( \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^5 \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, k \neq j}}^5 \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right) + R_5^{(1)}(x). \quad (1.54)$$

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  $h^4$

$$D_{+,h^4} f(x) := \frac{1}{12h} [f(x - 2h) - 8f(x - h) + 8f(x + h) - f(x + 2h)]. \quad (1.55)$$

**Exercícios**

[[tag:revisar]]

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

$$f(x) = \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} + x \quad (1.56)$$

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 traz e 3 pontos para frente.
- c) 2 pontos para traz e 2 pontos para frente.
- d) 3 pontos para traz e 1 pontos para frente.
- e) 4 pontos para traz.

**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

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

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

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

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*

$$I - F_1(h) = \sum_{i=1}^n k_1 h^{2i} + O(h^{2n+2}). \tag{2.17}$$

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 (1.50)).

**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 (1.55)).

### 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

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

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

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

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

[[tag:revisar]]

Neste capítulo, discutimos os métodos numéricos fundamentais para a aproximação de integrais definidas de funções. Tais métodos 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

[[tag:revisar]]

Dada uma função  $f(x)$  e um intervalo  $[a, b]$ , denotamos por

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

a integral de  $f(x)$  no intervalo  $[a, b]$ . A ideia das regras de Newton-Cotes é aproximar  $I$  pela integral de um polinômio interpolador de  $f(x)$  por pontos previamente selecionados.

Seja, então,  $p(x)$  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

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

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

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

$$= \int_a^b p(x) dx + \int_a^b R_{n+1}(x) dx \quad (3.7)$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{n+1} f(x_i) \int_a^b \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n+1} \frac{(x - x_j)}{x_i - x_j} dx}_{\text{quadratura}} + \underbrace{\int_a^b R_{n+1}(x) dx}_{\text{erro de truncamento}} \quad (3.8)$$

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, abordaremos as regras de Newton-Cotes mais usuais e estimaremos o erro de truncamento caso a caso. Para uma abordagem mais geral, recomenda-se consultar [3, Cap. 7, Sec. 1.1].

### 3.1.1 Regras de Newton-Cotes fechadas

[[tag:revisar]]

As regras de Newton-Cotes fechadas são aqueles que a quadratura incluem os extremos do intervalo de integração, i.e. os nodos extremos são  $x_1 = a$  e  $x_{n+1} = b$ .

### Regra do trapézio

[[tag:revisar]]

A regra do trapézio é obtida tomando-se os nodos  $x_1 = a$  e  $x_2 = b$ . Então, denotando  $h := b - a$ <sup>1</sup>, os pesos da quadratura são:

$$w_1 = \int_a^b \frac{x - b}{a - b} dx \quad (3.9)$$

$$= \frac{(b - a)}{2} = \frac{h}{2} \quad (3.10)$$

e

$$w_2 = \int_a^b \frac{x - a}{b - a} dx \quad (3.11)$$

$$= \frac{(b - a)}{2} = \frac{h}{2}. \quad (3.12)$$

Agora, estimamos o erro de truncamento com

$$E := \int_a^b R_2(x) dx \quad (3.13)$$

$$= \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2} (x - a)(x - b) dx \quad (3.14)$$

$$\leq C \left| \int_a^b (x - a)(x - b) dx \right| \quad (3.15)$$

$$= C \frac{(b - a)^3}{6} = O(h^3). \quad (3.16)$$

Portanto, a **regra do trapézio** é dada por

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} (f(a) + f(b)) + O(h^3). \quad (3.17)$$

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

$$I = \int_0^{1/4} xe^{-x^2} dx = -\frac{e^{-x^2}}{2} \Big|_0^{1/4} \quad (3.18)$$

<sup>1</sup>Neste capítulo,  $h$  é escolhido como a distância entre os nodos.

$$= \frac{1 - e^{-1/4}}{2} = 3,02935\text{E}-2. \quad (3.19)$$

Agora, usando a regra do trapézio, obtemos a seguinte aproximação para  $I$

$$I \approx \frac{h}{2}(f(0) + f(1/2)) \quad (3.20)$$

$$= \frac{1/4}{2} \left( 0 + \frac{1}{4} e^{-(1/4)^2} \right) = 2,93567\text{E}-2. \quad (3.21)$$

### Regra de Simpson

[[tag:revisar]]

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

$$w_1 = \int_a^b \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} dx \quad (3.22)$$

$$= \frac{(b-a)}{6} = \frac{h}{3}, \quad (3.23)$$

$$w_2 = \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} dx \quad (3.24)$$

$$= 4 \frac{(b-a)}{6} = 4 \frac{h}{3} \quad (3.25)$$

e

$$w_3 = \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} dx \quad (3.26)$$

$$= \frac{(b-a)}{6} = \frac{h}{3}. \quad (3.27)$$

Isto nos fornece a chamada **regra de Simpson**

$$I \approx \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \quad (3.28)$$

Nos resta estimar o erro de truncamento da regra de Simpson. Para tanto, consideramos a expansão em polinômio de Taylor de grau 3 de  $f(x)$  em torno do ponto  $x_2$ , i.e.

$$f(x) = f(x_2) + f'(x_2)(x - x_2) + \frac{f''(x_2)}{2}(x - x_2)^2$$



$$\begin{aligned}
& + \frac{f'''(x_2)}{6}(x - x_2)^3 \\
& + \frac{f^{(4)}(\xi_1(x))}{24}(x - x_2)^4,
\end{aligned} \tag{3.29}$$

donde

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x) dx &= 2hf(x_2) + \frac{h^3}{3}f''(x_2) \\
&+ \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi_1(x))(x - x_2)^4 dx.
\end{aligned} \tag{3.30}$$

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

$$f''(x_2) = \frac{f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)}{h^2} + O(h^2). \tag{3.31}$$

Ainda, o último termo da equação (3.30) pode ser estimado por

$$\left| \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi_1(x))(x - x_2)^4 dx \right| \leq C \left| \int_a^b (x - x_2)^4 dx \right| \tag{3.32}$$

$$= C(b - a)^5 = O(h^5). \tag{3.33}$$

Então, de (3.30), (3.31) e (3.1.1), temos

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] + O(h^5), \tag{3.34}$$

o que mostra que a **regra de Simpson tem erro de truncamento da ordem  $h^5$** .

**Exemplo 3.1.2.** Aproximando a integral dada no Exemplo 3.1.1 pela a regra de Simpson, temos

$$\int_0^{1/4} f(x) dx \approx \frac{1/8}{3} \left[ f(0) + 4f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{1}{4}\right) \right] \tag{3.35}$$

$$= \frac{1}{24} \left[ \frac{1}{2}e^{-(1/8)^2} + \frac{1}{4}e^{-(1/4)^2} \right] \tag{3.36}$$

$$= 3,02959E-2. \tag{3.37}$$

### 3.1.2 Regras de Newton-Cotes abertas

[[tag:revisar]]

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

**Regra do ponto médio**

[[tag:revisar]]

A regra do ponto médio é obtida usando apenas o nodo  $x_1 = (a + b)/2$ . Desta forma, temos

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b f(x_1) dx + \int_a^b f'(\xi(x))(x - x_1) dx, \quad (3.38)$$

donde, denotando  $h := (b - a)$ , temos

$$\int_a^b f(x) dx = hf\left(\frac{a+b}{2}\right) + O(h^3). \quad (3.39)$$

Deixa-se para o leitor a verificação do erro de truncamento (veja, Exercício 3.1.3).

**Exemplo 3.1.3.** Aproximando a integral dada no Exemplo 3.1.1 pela a regra do ponto médio, temos

$$\int_0^{1/4} f(x) dx \approx \frac{1}{4} f\left(\frac{1}{8}\right) \quad (3.40)$$

$$= \frac{1}{32} e^{-(1/8)^2} \quad (3.41)$$

$$= 3,07655\text{E}-2 \quad (3.42)$$

**Exercício**

[[tag:revisar]]

**Exercício 3.1.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^0 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.43)$$

usando a:

- regra do ponto médio.
- regra do trapézio.
- regra de Simpson.

**Exercício 3.1.2.** 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

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

- 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 3.1.3.** 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 3.1.4.** Obtenha a regra de Newton-Cotes aberta de 2 pontos e estime seu erro de truncamento.

## 3.2 Regras compostas de Newton-Cotes

[[tag:revisar]]

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.

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx, \quad (3.46)$$

onde  $a = x_1 < x_2 < \dots < x_{n+1} = b$ . 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

[[tag:revisar]]

Consideremos 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  $h = x_{i+1} - x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Então, aplicando a regra do ponto médio a cada integral nos subintervalos  $[\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}]$ , temos

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{\tilde{x}_i}^{\tilde{x}_{i+1}} f(x) dx \quad (3.47)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left[ hf \left( \frac{\tilde{x}_i + \tilde{x}_{i+1}}{2} \right) + O(h^3) \right]. \quad (3.48)$$

Agora, observando que  $h := (b - a)/n$  e escolhendo os nodos  $x_i = a + (i - 1/2)h$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , obtemos a **regra composta do ponto médio com  $n$  subintervalos**

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n hf(x_i) + O(h^2). \quad (3.49)$$

**Exemplo 3.2.1.** Consideremos 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

$$\underbrace{\int_a^b f(x) dx}_I \approx \underbrace{\sum_{i=1}^n hf(x_i)}_S, \quad (3.50)$$

onde  $h = 1/(4n)$  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.

### 3.2.2 Regra composta do trapézio

[[tag:revisar]]

Para obtermos a regra composta do trapézio, consideramos uma partição uniforme do intervalo de integração  $[a, b]$  da forma  $a = x_1 < x_2 < \dots <$

Tabela 3.1: Resultados referentes ao Exemplo 3.2.1.

$n$	$S$	$ I - S $
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

$x_{n+1} = b$  com  $h = x_{i+1} - x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Então, aplicando a regra do trapézio em cada integração nos subintervalos, obtemos

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \quad (3.51)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] + O(h^3) \right\} \quad (3.52)$$

$$= f(x_1) \frac{h}{2} + \sum_{i=2}^n h f(x_i) + f(x_{n+1}) \frac{h}{2} + O(h^2). \quad (3.53)$$

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

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} \left[ f(x_1) + \sum_{i=2}^n 2f(x_i) + f(x_{n+1}) \right] + O(h^2), \quad (3.54)$$

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

**Exemplo 3.2.2.** Consideremos 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

$$\underbrace{\int_a^b f(x) dx}_I \approx \frac{h}{2} \underbrace{\left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_i) + f(x_{n+1}) \right]}_S, \quad (3.55)$$

onde  $h = 1/(4n)$  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.

### 3.2.3 Regra composta de Simpson

[[tag:revisar]]

Tabela 3.2: Resultados referentes ao Exemplo 3.2.2.

$n$	$S$	$ I - S $
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

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

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{\tilde{x}_i}^{\tilde{x}_{i+1}} f(x) dx \quad (3.56)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{h}{3} \left[ f(\tilde{x}_i) + 4f\left(\frac{\tilde{x}_i + \tilde{x}_{i+1}}{2}\right) + f(\tilde{x}_{i+1}) \right] + O(h^5) \right\}. \quad (3.57)$$

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

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_{2i-1}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i}) + f(x_{n+1}) \right] + O(h^4) \quad (3.58)$$

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

$$\underbrace{\int_a^b f(x) dx}_I \approx \frac{h}{3} \underbrace{\left[ f(x_1) + 2 \sum_{i=2}^n f(x_{2i-1}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i}) + f(x_{n+1}) \right]}_S, \quad (3.59)$$

onde  $h = 1/(8n)$  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

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 3.2.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^0 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.60)$$

usando a:

- regra composta do ponto médio com 10 subintervalos.
- regra composta do trapézio com 10 subintervalos.
- regra composta de Simpson com 10 subintervalos.

**Exercício 3.2.2.** 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

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

- $\int_{2,0}^{2,4} f(x) dx$  usando a regra do ponto médio composta.
- $\int_{2,0}^{2,5} f(x) dx$  usando a regra do trapézio composta.
- $\int_{2,0}^{2,4} f(x) dx$  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

$$R_{k,1} := \frac{h_k}{2} \left[ f(a) + 2 \sum_{i=2}^{2k} f(x_i) + f(b) \right] \quad (3.61)$$

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

$$I := \int_a^b f(x) dx. \quad (3.62)$$

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

$$I - R_{k,1} = \sum_{i=1}^{\infty} k_i h_k^{2i}, \quad (3.63)$$

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

$$R_{k,j} := R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, \quad (3.64)$$

$j = 2, 3, \dots, n$ , 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

$$R_{1,1} := \frac{1}{2} [f(0) + f(1)] = 1,83940E-1 \quad (3.65)$$

$$R_{2,1} := \frac{1}{4} [f(0) + 2f(1/2) + f(1)] = 2,86670E-1. \quad (3.66)$$



Então, calculando

$$R_{2,2} = R_{2,1} + \frac{R_{2,1} - R_{1,1}}{3} = 3,20914\text{E}-1, \quad (3.67)$$

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

$$\int_{-1}^0 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.68)$$

usando a quadratura de Romberg de ordem 4.

## 3.4 Grau de exatidão

[[tag:revisar]]

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  $\{(x_i, w_i)\}_{i=1}^n$  tem grau de exatidão  $m$ , quando

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n p(x_i) w_i \quad (3.69)$$

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

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

$$\int_a^b x^k dx = \sum_{i=1}^n x_i^k w_i, \forall k \leq m. \quad (3.70)$$

**Exemplo 3.4.1.** Determinemos o grau de exatidão da regra do ponto médio. Para tanto, verificamos para quais  $k$  vale

$$\int_a^b x^k dx = (b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^k. \quad (3.71)$$

Vejam os:

- $k = 0$ :

$$\int_a^b x^0 dx = x|_a^b = b - a, \quad (3.72)$$

$$(b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^0 = b - a. \quad (3.73)$$

- $k = 1$ :

$$\int_a^b x^1 dx = \frac{x^2}{2} \Big|_a^b = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}, \quad (3.74)$$

$$(b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^1 = (b-a) \frac{(a+b)}{2} = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}. \quad (3.75)$$

- $k = 2$ :

$$\int_a^b x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_a^b = \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}, \quad (3.76)$$

$$(b-a) \left( \frac{a+b}{2} \right)^2 \neq \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}. \quad (3.77)$$

Ou seja, a regra do ponto média tem grau de exatidão 1.

**Exemplo 3.4.2.** Determinemos o grau de exatidão da regra de Simpson. Para tanto, verificamos para quais  $k$  vale

$$\int_a^b x^k dx = \frac{(b-a)}{6} \left( f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)^k. \quad (3.78)$$

Vejam os:

- $k = 0$ :

$$\int_a^b x^0 dx = x|_a^b = b - a, \quad (3.79)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^0 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^0 + b^0 \right) = b - a. \quad (3.80)$$

- $k = 1$ :

$$\int_a^b x^1 dx = \frac{x^2}{2} \Big|_a^b = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}, \quad (3.81)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^1 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^1 + b^1 \right) = \frac{(b-a)}{2} (a+b) \quad (3.82)$$

$$= \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2}. \quad (3.83)$$

- $k = 2$ :

$$\int_a^b x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_a^b = \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}, \quad (3.84)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^2 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^2 + b^2 \right) = \frac{(b-a)}{3} (a^2 + ab + b^2) \quad (3.85)$$

$$= \frac{b^3}{3} - \frac{a^3}{3}. \quad (3.86)$$

- $k = 3$ :

$$\int_a^b x^3 dx = \frac{x^4}{4} \Big|_a^b = \frac{b^4}{4} - \frac{a^4}{4}, \quad (3.87)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^3 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^3 + b^3 \right) \quad (3.88)$$

$$= \frac{(b-a)}{6} \left[ \frac{3a^3}{2} + \frac{3b}{2}a^2 + \frac{3a}{2}b^2 + \frac{3b^3}{2} \right] \quad (3.89)$$

$$= \frac{b^4}{4} - \frac{a^4}{4}. \quad (3.90)$$

- $k = 4$ :

$$\int_a^b x^4 dx = \frac{x^5}{5} \Big|_a^b = \frac{b^5}{5} - \frac{a^5}{5}, \quad (3.91)$$

$$\frac{(b-a)}{6} \left( a^4 + 4 \left( \frac{a+b}{2} \right)^4 + b^4 \right) \neq \frac{b^5}{5} - \frac{a^5}{5}. \quad (3.92)$$

Ou seja, a regra de Simpson tem grau de exatidão 3.

## Exercícios

[[tag:revisar]]

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

**Exercício 3.4.2.** Determine o nodo e o peso da quadratura numérica de um único nodo e de grau de exatidão 1 para o intervalo de integração  $[-1, 1]$ .

## 3.5 Quadratura Gauss-Legendre

[[tag:revisar]]

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

$$\int_{-1}^1 f(x) dx. \quad (3.93)$$

Consideremos o problema de determinar a quadratura de Gauss-Legendre de apenas um ponto. Começamos por exigir o grau de exatidão 0, o que nos leva a

$$w_1 x_1^0 = \int_{-1}^1 x^0 dx \Rightarrow w_1 = x|_{-1}^1 = 2. \quad (3.94)$$

Agora, exigindo o grau de exatidão 1, obtemos

$$w_1 x_1^1 = \int_{-1}^1 x^1 dx \Rightarrow 2x_1 = \frac{x^2}{2} \Big|_{-1}^1 = 0 \quad (3.95)$$

$$\Rightarrow x_1 = 0. \quad (3.96)$$

Com isso, concluímos que a quadratura de apenas um nodo de maior grau de exatidão para tais integrais é a de nodo  $x_1 = 0$  e  $w_1 = 2$ . A qual é, por acaso, a regra do ponto médio.

Observamos, também, que cada grau de exatidão nos fornece uma condição para determinarmos os nodos e os pesos da desejada quadratura. Mais precisamente, seguindo o raciocínio anterior, para determinarmos a quadratura de  $n$  pontos com maior grau de exatidão possível para integrais no intervalo  $[-1, 1]$ , acabaremos tendo que resolver um sistema de equações

$$\sum_{i=1}^n x_i^k w_i = \int_{-1}^1 x^k dx, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2n - 1. \quad (3.97)$$

Isto é, como teremos  $2n$  incógnitas ( $n$  nodos e  $n$  pesos) a determinar, poderemos exigir o grau de exatidão máximo de  $2n - 1$ .

O sistema (3.97) 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 pontos 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

$$\int_{-1}^1 p(x) P_n(x) dx = 0, \quad (3.98)$$

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*

$$w_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx. \quad (3.99)$$

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

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \sum_{i=1}^n p(x_i) w_i, \quad (3.100)$$

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

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \int_{-1}^1 \sum_{i=1}^n p(x_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \quad (3.101)$$

$$= \sum_{i=1}^n p(x_i) \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \quad (3.102)$$

$$= \sum_{i=1}^n p(x_i) w_i. \quad (3.103)$$

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

$$p(x) = q(x)P_n(x) + r(x), \quad (3.104)$$

onde  $q(x)$  e  $r(x)$  são polinômios 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 (3.98)), temos

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \int_{-1}^1 q(x)P_n(x) + r(x) dx \quad (3.105)$$

$$= \int_{-1}^1 r(x) dx. \quad (3.106)$$

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

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \sum_{i=1}^n r(x_i)w_i = \sum_{i=1}^n p(x_i)w_i. \quad (3.107)$$

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

**Exemplo 3.5.1.** Consideremos a quadratura de Gauss-Legendre de 2 nodos. Do teorema anterior (Teorema 3.5.1, seus nodos são as raízes do polinômio de Legendre de grau 2

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \quad (3.108)$$

as quais são

$$x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, \quad x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}. \quad (3.109)$$

Os pesos são, então

$$w_1 = \int_{-1}^1 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} dx \quad (3.110)$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{2} \left[ \frac{x^2}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3}x \right]_{-1}^1 \quad (3.111)$$

$$= 1 \quad (3.112)$$

e

$$w_2 = \int_{-1}^1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} dx \quad (3.113)$$

$$= -\frac{\sqrt{3}}{2} \left[ \frac{x^2}{2} - \frac{\sqrt{3}}{3}x \right]_{-1}^1 \quad (3.114)$$

$$= 1 \quad (3.115)$$

Ou seja, a quadratura de Gauss-Legendre de 2 pontos tem o seguinte conjunto de nodos e pesos  $\{(x_1 = -\sqrt{3}/3, w_1 = 1), (x_2 = \sqrt{3}/3, w_2 = 1)\}$ . Esta, por sua vez, é exata para polinômios de grau menor ou igual a 3. De fato, verificando para potência de  $x^k$  temos:

- $k = 0$ :

$$\int_{-1}^1 x^0 dx = 2 \quad (3.116)$$

$$x_1^0 w_1 + x_2^0 w_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^0 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^0 = 2. \quad (3.117)$$

- $k = 1$ :

$$\int_{-1}^1 x^1 dx = 0 \quad (3.118)$$

$$x_1^1 w_1 + x_2^1 w_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^1 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^1 = 0. \quad (3.119)$$

- $k = 2$ :

$$\int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3} \quad (3.120)$$

$$x_1^2 w_1 + x_2^2 w_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 = \frac{2}{3}. \quad (3.121)$$

- $k = 3$ :

$$\int_{-1}^1 x^3 dx = 0 \quad (3.122)$$

$$x_1^3 w_1 + x_2^3 w_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^3 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^3 = 0. \quad (3.123)$$

- $k = 4$ :

$$\int_{-1}^1 x^4 dx = \frac{2}{5} \quad (3.124)$$

$$x_1^4 w_1 + x_2^4 w_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^4 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^4 = \frac{2}{9}. \quad (3.125)$$



Tabela 3.5: Conjunto de nodos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre.

$n$	$x_i$	$w_i$
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 $\pm \frac{1}{3}\sqrt{5 - 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$ $\pm \frac{1}{3}\sqrt{5 + 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{128}{225}$ $\frac{322 + 13\sqrt{70}}{900}$ $\frac{322 - 13\sqrt{70}}{900}$

**Observação 3.5.1.** O conjunto de nodos e pesos da quadratura de Gauss-Legendre para  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  são apresentados na Tabela 3.5<sup>2</sup>. Alternativamente, a quadratura de Gauss-Legendre com  $n$  pontos tem seus nodos iguais as raízes de  $P_n(x)$  (o polinômio de Legendre de grau  $n$ ), e os pesos dados por (3.99) ou [6, Cap.4, Sec. 4.6]:

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2) [P'_n(x_i)]^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.126)$$

**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

<sup>2</sup>Disponível em [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Gaussian\\_quadrature&oldid=837460315](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Gaussian_quadrature&oldid=837460315).

aproximações com  $n = 1, 2$  e  $3$  pontos:

- $n = 1$ :

$$\int_{-1}^1 \cos(x) dx \approx 2 \cos 0 = 2. \quad (3.127)$$

- $n = 2$ :

$$\int_{-1}^1 x e^{-x^2} dx \approx \cos(-\sqrt{3}/3) + \cos(-\sqrt{3}/3) = 1,67582. \quad (3.128)$$

- $n = 3$ :

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 x e^{-x^2} dx &\approx \frac{8}{9} \cos 0 + \frac{5}{9} \cos(-\sqrt{3/5}) \\ &+ \frac{5}{9} \cos(\sqrt{3/5}) = 1,68300. \end{aligned} \quad (3.129)$$

$n$	$\tilde{I}$	$ 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

Tabela 3.6: Resultados referentes ao Exemplo 3.5.2.

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.

### 3.5.1 Intervalos de integração arbitrários

[[tag:revisar]]

Observamos que a quadratura de Gauss-Legendre foi desenvolvida para aproximar integrais definidas no intervalo  $[-1, 1]$ . Por sorte, uma integral definida em um intervalo arbitrário  $[a, b]$  pode ser reescrita como uma integral

no intervalo  $[-1, 1]$  através de uma mudança de variável apropriada. Mais precisamente, assumindo a mudança de variável

$$x = \frac{b-a}{2}(u+1) + a \quad (3.130)$$

temos

$$dx = \frac{b-a}{2} du \quad (3.131)$$

e, portanto,

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}(u+1) + a\right) \cdot \frac{b-a}{2} du. \quad (3.132)$$

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

$$\int_0^1 x e^{-x^2} dx. \quad (3.133)$$

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

$$\int_0^1 x e^{-x^2} dx = \int_{-1}^1 \left(\frac{u}{2} + \frac{1}{2}\right) e^{-\left(\frac{u}{2} + \frac{1}{2}\right)^2} du. \quad (3.134)$$

Então, aplicando a quadratura temos

$$\int_0^1 x e^{-x^2} dx = \left(-\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right) e^{-\left(-\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right)^2} + \left(\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right) e^{-\left(\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{2}\right)^2} \quad (3.135)$$

$$= 3,12754\text{E}-1. \quad (3.136)$$

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 3.5.1.** Aproxime

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.137)$$

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

$$\int_0^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.138)$$

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

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.139)$$

usando a quadratura de Gauss-Legendre com:

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

## 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

$$\int_a^b f(x)w(x) dx, \quad (3.140)$$

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

$$\int_a^b q(x)p_n(x)w(x) dx = 0, \quad (3.141)$$

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

$$\int_{-1}^1 f(x)(1-x^2)^{-1/2} dx. \quad (3.142)$$

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

$$x_i = \cos \left( \frac{2i-1}{2n} \pi \right), \quad (3.143)$$

$$w_i = \frac{\pi}{n}. \quad (3.144)$$

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

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (3.145)$$

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

- $n = 1$ :

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \pi e^{-\cos(\pi/2)^2} = \pi. \quad (3.146)$$

- $n = 2$ :

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{2} e^{-\cos(\pi/4)^2} + \frac{\pi}{2} e^{-\cos(3\pi/4)^2} \quad (3.147)$$

$$= 1,90547. \quad (3.148)$$

- $n = 3$ :

$$\int_{-1}^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{3} e^{-\cos(\pi/6)^2} + \frac{\pi}{3} e^{-\cos(\pi/2)^2} + \frac{\pi}{3} e^{-\cos(5\pi/6)^2} \quad (3.149)$$

$$= 2,03652. \quad (3.150)$$

$n$	$\tilde{I}$
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

$$\int_0^{\infty} f(x)e^{-x} dx. \quad (3.151)$$

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

$$w_i = -\frac{1}{n[L'_n(x_i)]^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.152)$$

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

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
	9,3950709E+00	5,3929471E-04
4	4,5366203E+00	3,8887909E-02
	1,7457611E+00	3,5741869E-01
	3,2254769E-01	6,0315410E-01
	1,2640801E+01	2,3369972E-05
	7,0858100E+00	3,6117587E-03
5	3,5964258E+00	7,5942450E-02
	1,4134031E+00	3,9866681E-01
	2,6356032E-01	5,2175561E-01

**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  $n$ .

$n$	$\tilde{I}$
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

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-x^2} dx. \quad (3.153)$$

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

$$w_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H'_n(x_i)]^2}. \quad (3.154)$$

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

**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

$$\int_{-1}^1 \frac{\operatorname{sen}(x+2) - e^{-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (3.155)$$

usando a quadratura de Gauss-Chebyshev com:



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
	-2,0201829E+00	1,9953242E-02
5	2,0201829E+00	1,9953242E-02
	-9,5857246E-01	3,9361932E-01
	9,5857246E-01	3,9361932E-01
	0,0000000E+00	9,4530872E-01

$n$	$\tilde{I}$
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.

- 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

$$\int_0^{\infty} (\text{sen}(x+2) - e^{-x^2}) e^{-x} dx \quad (3.156)$$

usando a quadratura de Gauss-Laguerre com:

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

**Exercício 3.6.3.** Aproxime

$$\int_{-\infty}^{\infty} \text{sen}(x+2)e^{-x^2} - e^{-2x^2} dx \quad (3.157)$$

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

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad (3.158)$$

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

$$I = \int_0^1 x e^{-x^2} dx \quad (3.159)$$

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

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x+2) - e^{-x^2}}{x^2 + \ln(x+2)} dx \quad (3.160)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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  $h = 1\text{E}-1$ .

$k$	$t^{(k)}$	$y^{(k)}$	$y(t^{(k)})$
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

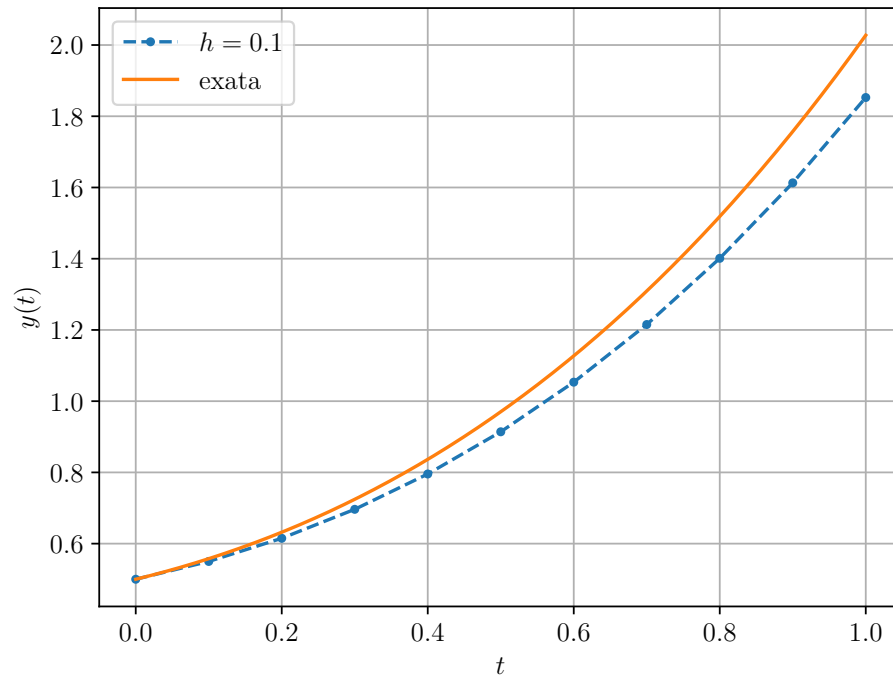


Figura 4.1: Esboço das soluções numérica (pontos) e analítica (linha) para o problema do Exemplo 4.1.1.

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

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

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 de Euler.

### Consistência

**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.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

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

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

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

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

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

### Exercícios

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

$$y' = \pi [\cos^2(\pi t) - \sin^2(\pi t)], \quad t > 0 \quad (4.54a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.54b)$$

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

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

$$y' = e^{2t} - 2y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.55a)$$

$$y(0) = 0. \quad (4.55b)$$

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

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.56a)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.56b)$$

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

$$y' = -30y, \quad 0 < t \leq 1, \quad (4.57a)$$

$$y(0) = \frac{1}{3} \quad (4.57b)$$

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)?

### Análise Numérica

**Exercício 4.1.5.** Mostre que se  $\delta > -1$ , então  $0 < 1 + \delta \leq e^\delta$ .

**Exercício 4.1.6.** 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 4.1.7.** 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 Runge-Kutta

[[tag:revisar]]

Os métodos de Runge-Kutta de  $s$ -estágios são métodos de passo simples da seguinte forma

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + h(c_1 k_1 + \cdots + c_s k_s) \quad (4.58)$$

onde

$$k_1 := f(t^{(i)}, y^{(i)}), \quad (4.59)$$

$$k_2 := f(t^{(i)} + \alpha_2 h, y^{(i)} + h\beta_{21} k_1), \quad (4.60)$$

$$k_3 := f(t^{(i)} + \alpha_3 h, y^{(i)} + h(\beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2)), \quad (4.61)$$

$$\vdots \quad (4.62)$$

$$k_s := f(t^{(i)} + \alpha_s h, y^{(i)} + h(\beta_{s1} k_1 + \cdots + \beta_{s,s-1} k_{s-1})), \quad (4.63)$$

$t^{(i)} = t_0 + (i-1)h$  e  $y^{(1)} = y_0$ .

Na sequência, discutimos alguns dos métodos de Runge-Kutta usualmente utilizados. Pode-se encontrar uma lista mais completa em [3, Cap. 8, Seq. 3.2].

### 4.2.1 Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

[[tag:revisar]]

Precisamos apenas de 2 estágios para obtermos métodos de Runge-Kutta de ordem 2. Portanto, assumimos

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + h \left[ c_1 f(t^{(i)}, y^{(i)}) + c_2 f(t^{(i)} + \alpha_2 h, y^{(i)} + h\beta_{21} f(t^{(i)}, y^{(i)})) \right]. \quad (4.64)$$

Neste caso, o erro de discretização local é dado por

$$\tau(t, y; h) = \Delta(t, y; h) - \Phi(t, y; h), \quad (4.65)$$

onde, da equação (4.25) temos

$$\Delta(t, y; h) = f(t, y(t)) + \frac{h}{2} [f_t(t, y) + f_y(t, y) f(t, y)] + O(h^2) \quad (4.66)$$

e de (4.64)

$$\Phi(t, y; h) = c_1 f(t, y) + c_2 f(t + \alpha_2 h, y + h\beta_{21} f(t, y)) \quad (4.67)$$

Agora, tomando a expansão de série de Taylor em torno de  $t$  de  $\Phi(t, y; h)$ , temos

$$\begin{aligned} \Phi(t, y; h) = (c_1 + c_2)f(t, y) + c_2 h[\alpha_2 f_t(t, y) \\ + \beta_{21} f_y(t, y)f(t, y)] + O(h^2). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Então, por comparação de (4.66) e (4.68), temos

$$c_1 + c_2 = 1 \quad (4.69)$$

$$c_2 \alpha_2 = \frac{1}{2} \quad (4.70)$$

$$c_2 \beta_{21} = \frac{1}{2}. \quad (4.71)$$

Assim sendo, temos mais de uma solução possível.

### Método do ponto médio

[[tag:revisar]]

O método do ponto médio é um método de Runge-Kutta de ordem 2 proveniente da escolha de coeficientes

$$c_1 = 0, \quad c_2 = 1, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad \beta_{21} = \frac{1}{2}. \quad (4.72)$$

Logo, a iteração do método do ponto médio é

$$y^{(1)} = y_0 \quad (4.73)$$

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + hf \left( t^{(i)} + \frac{h}{2}, y^{(i)} + \frac{h}{2} f(t^{(i)}, y^{(i)}) \right). \quad (4.74)$$

**Exemplo 4.2.1.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \text{sen}(t), t > 0 \quad (4.75)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.76)$$

Na Tabela 4.3, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  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
$10^{-5}$	2,02737	2,9E-05

Tabela 4.3: Resultados referentes ao Exemplo 4.2.1.

### Método de Euler modificado

[[tag:revisar]]

O método de Euler modificado é um método de Runge-Kutta de ordem 2 proveniente da escolha de coeficientes

$$c_1 = \frac{1}{2}, \quad c_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_2 = 1, \quad \beta_{21} = 1. \quad (4.77)$$

Logo, a iteração do método de Euler modificado é

$$y^{(1)} = y_0 \quad (4.78)$$

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + \frac{h}{2} \left[ f(t^{(i)}, y^{(i)}) + f(t^{(i)} + h, y^{(i)} + hf(t^{(i)}, y^{(i)})) \right]. \quad (4.79)$$

**Exemplo 4.2.2.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), \quad t > 0 \quad (4.80)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.81)$$

Na Tabela 4.4, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo método de Euler modificado com diferentes passos  $h$ .

### 4.2.2 Método de Runge-Kutta de ordem 4

[[tag:revisar]]

Um dos métodos de Runge-Kutta mais empregados é o seguinte método de ordem 4:

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (4.82)$$

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \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
$10^{-5}$	2,02737	2,9E-05

Tabela 4.4: Resultados referentes ao Exemplo 4.2.2

onde

$$k_1 := f(t^{(i)}, y^{(i)}), \quad (4.83)$$

$$k_2 := f(t^{(i)} + h/2, y^{(i)} + hk_1/2), \quad (4.84)$$

$$k_3 := f(t^{(i)} + h/2, y^{(i)} + hk_2/2), \quad (4.85)$$

$$k_4 := f(t^{(i)} + h, y^{(i)} + hk_3), \quad (4.86)$$

$t^{(i)} = t_0 + (i - 1)h$  e  $y^{(1)} = y_0$ .

**Exemplo 4.2.3.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \quad (4.87)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.88)$$

Na Tabela 4.5, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  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 4.2.3

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 4.2.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.89)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.90)$$

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 ordem 4.

### 4.3 Método adaptativo com controle de erro

[[tag:revisar]]

Consideremos um problema de valor inicial

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0, \quad (4.91)$$

$$y(t_0) = y_0. \quad (4.92)$$

e um método de passo simples

$$y^{(1)} = y_0, \quad (4.93)$$

$$y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) = y^{(i)} + h^{(i+1)}\Phi(t^{(i)}, y^{(i)}; h^{(i+1)}), \quad (4.94)$$

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.

$$|e(t^{(i+1)}; h^{(i+1)})| := |y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y(t^{(i+1)})| \approx TOL. \quad (4.95)$$

Para um método de ordem  $h^p$ , pode-se mostrar que (veja, [3, Cap. 7, Sec. 7.2])

$$y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) = y(t^{(i+1)}) + e_p(t^{(i+1)})(h^{(i+1)})^p, \quad (4.96)$$

onde  $e(t^{(i+1)})$  é uma função apropriada. Então, assumindo que  $e(t^{(i)}; h^{(i)}) = 0$ , temos

$$e_p(t^{(i+1)}) = h^{(i+1)}e'_p(t^{(i)}) \quad (4.97)$$

e, portanto, para termos (4.95) impomos que

$$|(h^{(i+1)})^{p+1}e'_p(t^{(i)})| = TOL. \quad (4.98)$$

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 (4.96) temos

$$y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) = y(t^{(i+1)}) + e_p(t^{(i+1)})\frac{(h^{(i+1)})^p}{2^p} \quad (4.99)$$

e, então, subtraindo esta de (4.96) temos

$$y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) = e_p(t^{(i+1)})\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)^p(2^p - 1), \quad (4.100)$$

donde

$$e_p(t^{(i+1)})\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)^p = \frac{y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)}{2^p - 1}. \quad (4.101)$$

Daí, de (4.97), obtemos

$$e'_p(t^{(i)})h^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)^p = \frac{y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right)}{2^p - 1}, \quad (4.102)$$

o que nos fornece a seguinte aproximação de  $e'_p(t^{(i)})$

$$e'_p(t^{(i)}) = \frac{1}{(h^{(i+1)})^{p+1}} \frac{2^p}{2^p - 1} \left[ y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) \right]. \quad (4.103)$$

Assim sendo, de (4.98) temos que o passo  $h^{(i+1)}$  apropriado é tal que

$$\frac{2^p}{2^p - 1} \left| y^{(i+1)}(h^{(i+1)}) - y^{(i+1)}\left(\frac{h^{(i+1)}}{2}\right) \right| \approx TOL. \quad (4.104)$$

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

$$\frac{2^p}{2^p - 1} \left| y^{(i+1)}(h) - y^{(i+1)}\left(\frac{h}{2}\right) \right| > TOL, \quad (4.105)$$

tomamos sucessivas divisões de  $h$  por 2, até satisfazermos (4.104). Obtido o  $h$  que satisfaz (4.104), temos computado  $y^{(i+1)}$  com  $h^{(i+1)} = h$ .

**Exemplo 4.3.1.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \quad (4.106)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.107)$$

A Figura 4.2 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.

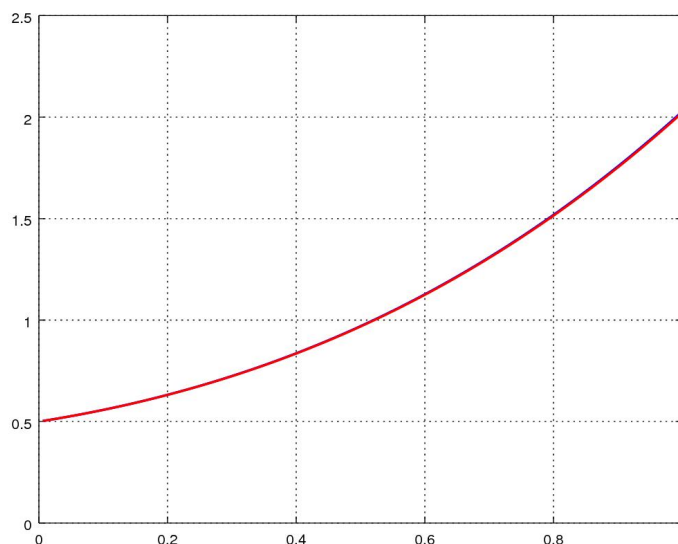


Figura 4.2: Resultados referentes ao Exemplo 4.3.1.

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 4.3.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.108)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.109)$$

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  $TOL = 10^{-4}$ .

## 4.4 Métodos de passo múltiplo

[[tag:revisar]]

Dado um problema de valor inicial

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0, \quad (4.110)$$

$$y(t_0) = y_0. \quad (4.111)$$

temos

$$y(t) = y(t_0) + \int_{t_0}^t f(s, y(s)) ds. \quad (4.112)$$

De forma mais geral, consideramos uma partição uniforme no tempo  $\{t_0 = t^{(1)} < t^{(2)} < \dots < t^{(i)} < \dots < t^{(n)} = t_f\}$ , onde  $t_f$  é um determinado tempo para o qual queremos computar uma aproximação para  $y(t_f)$ . Também, denotamos o passo no tempo por  $h = (t_f - t_0)/n$ . Com isso, a solução  $y(t)$  satisfaz

$$y(t^{(i+k)}) = y(t^{(i-j)}) + \int_{t^{(i-j)}}^{t^{(i+k)}} f(s, y(s)) ds. \quad (4.113)$$

A ideia é, então, aproximar a integral acima por uma quadratura numérica.

Seguindo as regras de Newton-Cotes (veja, Cap. 3 Seq. 3.1), escolhemos os nodos da quadratura como  $x_l = t^{(i-l+1)}$ ,  $l = 1, 2, \dots, m$ , e, então

$$\int_{t^{(i-j)}}^{t^{(i+k)}} f(x, y(x)) dx \approx \sum_{l=1}^m f(x_l, y(x_l)) w_l, \quad (4.114)$$

e

$$w_l = \int_{t^{(i-j)}}^{t^{(i+k)}} \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq l}}^m \frac{x - x_p}{x_l - x_p} dx. \quad (4.115)$$

Agora, fazendo a mudança de variável  $u = (x - t^{(i)})/h$ , obtemos

$$w_l = h \int_{-j}^k \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq l}}^m \frac{u + p - 1}{-l + p} du \quad (4.116)$$

Assim sendo, temos o seguinte esquema numérico

$$y^{(i+k)} = y^{(i-j)} + h \sum_{l=1}^m c_l f(t^{(i-l+1)}, y^{(i-l+1)}), \quad (4.117)$$

onde

$$c_l = \int_{-j}^k \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq l}}^m \frac{s + p - 1}{-l + p} ds. \quad (4.118)$$

Diferentes escolhas de  $j$ ,  $k$  e  $m$  não fornecem diferentes métodos. Observamos, ainda, que a ordem de um tal método de passo múltiplo é determinada pela ordem de truncamento da quadratura numérica usada (veja, por exemplo, [?, Cap. 5, Seq. 5.6]).

#### 4.4.1 Métodos de Adams-Bashforth

[[tag:revisar]]

Métodos de Adams-Bashforth são métodos de passo múltiplo obtidos ao escolhermos  $j = 0$  e  $k = 1$  no esquema numérico (4.117). Com isso, ao escolhermos  $m$  obtemos um método de ordem  $O(h^m)$  [?, Cap. 5, Seq. 5.6].

##### Método de Adams-Bashforth de ordem 2

[[tag:revisar]]

Tomando  $m = 2$  em (4.118), temos

$$c_1 = \int_0^1 s + 1 ds = \frac{3}{2} \quad (4.119)$$

e

$$c_2 = \int_0^1 -s ds = -\frac{1}{2}. \quad (4.120)$$

Então, de (4.117) temos a iteração do **método de Adams-Bashforth de 2 passos**:

$$y^{(1)} = y_0, \quad (4.121)$$

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + \frac{h}{2} \left[ 3f(t^{(i)}, y^{(i)}) - f(t^{(i-1)}, y^{(i-1)}) \right], \quad (4.122)$$

com  $t^{(i)} = t_0 + (i - 1)h$ .

**Exemplo 4.4.1.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \sin(t), t > 0 \quad (4.123)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.124)$$

Na Tabela 4.6, 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, escolhemos inicializá-lo pelo método do ponto médio, de forma a mantermos a consistência.

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \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

Tabela 4.6: Resultados referentes ao Exemplo 4.4.1

### Método de Adams-Bashforth de ordem 3

[[tag:revisar]]

Tomando  $m = 3$  em (4.118) obtemos, de (4.117), a iteração do **método de Adams-Bashforth de 3 passos**:

$$y^{(1)} = y_0, \quad (4.125)$$

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + \frac{h}{12} \left[ 23f(t^{(i)}, y^{(i)}) - 16f(t^{(i-1)}, y^{(i-1)}) + 5f(t^{(i-2)}, y^{(i-2)}) \right], \quad (4.126)$$

com  $t^{(i)} = t_0 + (i - 1)h$ .



**Exemplo 4.4.2.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \text{sen}(t), t > 0 \quad (4.127)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.128)$$

Na Tabela 4.7, temos as aproximações  $\tilde{y}(1)$  de  $y(1)$  computadas pelo método de Adams-Bashforth de 3 passos. Como este método é de ordem 3, escolhemos inicializá-lo pelo método de Runge-Kutta de ordem 4, de forma a garantirmos a consistência.

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \tilde{y}(1) - y(1) $
$10^{-1}$	2,02696	4,3E-04
$10^{-2}$	2,02739	5,9E-07
$10^{-3}$	2,02740	6,1E-10
$10^{-4}$	2,02740	6,6E-13

Tabela 4.7: Resultados referentes ao Exemplo 4.4.2

#### Método de Adams-Bashforth de ordem 4

[[tag:revisar]]

Tomando  $m = 4$  em (4.118) obtemos, de (4.117), a iteração do **método de Adams-Bashforth de 4 passos**:

$$y^{(1)} = y_0, \quad (4.129)$$

$$y^{(i+1)} = y^{(i)} + \frac{h}{24} \left[ 55f(t^{(i)}, y^{(i)}) - 59f(t^{(i-1)}, y^{(i-1)}) + 37f(t^{(i-2)}, y^{(i-2)}) - 9f(t^{(i-3)}, y^{(i-3)}) \right], \quad (4.130)$$

com  $t^{(i)} = t_0 + (i - 1)h$ .

**Exemplo 4.4.3.** Consideremos o seguinte problema de valor inicial

$$y' - y = \text{sen}(t), t > 0 \quad (4.131)$$

$$y(0) = \frac{1}{2}. \quad (4.132)$$

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.

$h$	$\tilde{y}(1)$	$ \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

Tabela 4.8: Resultados referentes ao Exemplo 4.4.3

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 4.4.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$y' + e^{-y^2+1} = 2, \quad t > 1, \quad (4.133)$$

$$y(1) = -1. \quad (4.134)$$

Inicializando pelo método de Euler, use os seguintes métodos de passo múltiplo com  $h = 0,1$  para computar o valor aproximado de  $y(2)$ :

- método de Adams-Bashforth de ordem 2.
- método de Adams-Bashforth de ordem 3.
- método de Adams-Bashforth de ordem 4.

## Capítulo 5

### Problema de valor de contorno

[[tag:revisar]]

Neste capítulo, discutimos sobre a aplicação do método de diferenças finitas para aproximar a solução de problemas de valores de contorno da forma

$$\alpha(x)u'' + \beta(x)u' + \gamma(x)u = f(x), \quad c_1 < x < c_2, \quad (5.1)$$

$$\eta_1 u'(c_1) + \theta_1 u(c_1) = g_1 \quad (5.2)$$

$$\eta_2 u'(c_2) + \theta_2 u(c_2) = g_2 \quad (5.3)$$

onde a incógnita  $u = u(x)$  e os são dados os coeficientes  $\alpha(x) \neq 0$ ,  $\beta(x)$ ,  $\gamma(x)$  e a função  $f(x)$ . Nas condições de contorno, são dados os coeficientes  $\eta_1$  e  $\theta_1$  não simultaneamente nulos, bem como, os coeficientes  $\eta_2$  e  $\theta_2$ , também, não simultaneamente nulos.

#### 5.1 Método de diferenças finitas

[[tag:revisar]]

Consideramos o seguinte problema linear de valor de contorno

$$\alpha(x)u'' + \beta(x)u' + \gamma(x)u = f(x), \quad c_1 < x < c_2, \quad (5.4)$$

$$\eta_1 u'(c_1) + \theta_1 u(c_1) = g_1 \quad (5.5)$$

$$\eta_2 u'(c_2) + \theta_2 u(c_2) = g_2 \quad (5.6)$$

onde a incógnita  $u = u(x)$  e os são dados os coeficientes  $\alpha(x) \neq 0$ ,  $\beta(x)$ ,  $\gamma(x)$  e a função  $f(x)$ . Nas condições de contorno, são dados os coeficientes  $\eta_1$  e  $\theta_1$  não simultaneamente nulos, bem como, os coeficientes  $\eta_2$  e  $\theta_2$ , também, não simultaneamente nulos.

A aproximação pelo método de diferenças finitas de (5.4)-(5.6) surge da substituição das derivadas por fórmulas de diferenças finitas. Isto requer a a prévia discretização do domínio do problema. Mais precisamente, a aplicação do método de diferenças finitas envolve três procedimentos básicos: 1. discretização do domínio, 2. discretização das equações, 3. resolução do problema discreto.

### 1. Discretização do domínio

A discretização do domínio refere-se ao particionamento do mesmo em pontos espaçados uniformemente ou não. Aqui, para mantermos a simplicidade, vamos considerar apenas o caso de um particionamento uniforme. Desta forma, escolhemos o número  $n$  de pontos da partição e, então, o passo é dado por

$$h = \frac{c_2 - c_1}{n - 1}, \quad (5.7)$$

e os pontos da partição podem ser indexados da seguinte forma

$$x_i = c_1 + (i - 1)h. \quad (5.8)$$

### 2. Discretização das equações

Começando pela equação (5.4), no ponto  $x = x_i$  temos

$$\alpha(x_i)u''(x_i) + \beta(x_i)u'(x_i) + \gamma(x_i)u(x_i) = f(x_i) \quad (5.9)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n - 1$ . Podemos substituir a segunda derivada de  $u$  pela fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$ , i.e.

$$u''(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i - h) - 2u(x_i) + u(x_i + h)}{h^2}}_{D_{0,h^2}^2 u(x_i)} + O(h^2). \quad (5.10)$$

A primeira derivada de  $u$  também pode ser substituída pela fórmula de diferenças finitas central de ordem  $h^2$ , i.e.

$$u'(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h}}_{D_{0,h^2} u(x_i)} + O(h^2). \quad (5.11)$$

Agora, denotando  $u_i \approx u(x_i)$ , temos  $u_{i-1} \approx u(x_i - h)$  e  $u_{i+1} \approx u(x_i + h)$ . Então, substituindo as derivadas pelas fórmulas de diferenças finitas acima na equação (5.9), obtemos

$$\alpha(x_i) \left( \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} \right) + \beta(x_i) \left( \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \right) + \gamma(x_i)u_i + O(h^2) = f(x_i), \quad (5.12)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n-1$ . Rearranjando os termos e desconsiderando o termo do erro de truncamento, obtemos o seguinte sistema discreto de equações lineares

$$\left( \frac{\alpha(x_i)}{h^2} - \frac{\beta(x_i)}{2h} \right) u_{i-1} + \left( \gamma(x_i) - \frac{2\alpha(x_i)}{h^2} \right) u_i + \left( \frac{\alpha(x_i)}{h^2} + \frac{\beta(x_i)}{2h} \right) u_{i+1} = f(x_i), \quad (5.13)$$

para  $i = 2, 3, \dots, n-1$ . Observe que este sistema consiste em  $n-2$  equações envolvendo as  $n$  incógnitas  $u_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Para fechá-lo, usamos as condições de contorno.

Usando a fórmula de diferenças finitas progressiva de ordem  $h^2$  para a derivada  $u'(c_1)$  temos

$$u'(c_1) = \frac{-3u(c_1) + 4u(c_1 + h) - u(c_1 + 2h)}{2h} + O(h^2). \quad (5.14)$$

Então, observando que  $c_1$  corresponde ao ponto  $x_1$  na partição do domínio, temos  $u_1 \approx u(c_1)$ ,  $u_2 = u(c_1 + h)$  e  $u_3 = u(c_1 + 2h)$  e, portanto de (5.5) temos

$$\eta_1 \left( \frac{-3u_1 + 4u_2 - u_3}{2h} \right) + \theta_1 u_1 + O(h^2) = g_1. \quad (5.15)$$

Então, desconsiderando o termo do erro de truncamento, obtemos a seguinte equação discreta

$$\left( \theta_1 - \frac{3\eta_1}{2h} \right) u_1 + \frac{2\eta_1}{h} u_2 - \frac{\eta_1}{2h} u_3 = g_1. \quad (5.16)$$

Procedendo de forma análoga para a condição de contorno (5.6), usamos a fórmula de diferenças finitas regressiva de ordem  $h^2$  para a derivada  $u'(c_2)$ ,

i.e.

$$u'(c_2) = \frac{3u(c_2) - 4u(c_2 - h) + u(c_2 - 2h)}{2h} + O(h^2). \quad (5.17)$$

Aqui, temos  $u_n \approx u(c_2)$ ,  $u_{n-1} \approx u(c_2 - h)$  e  $u_{n-2} \approx u(c_2 - 2h)$ , e de (5.6) obtemos

$$\eta_2 \left( \frac{3u_n - 4u_{n-1} + u_{n-2}}{2h} \right) + \theta_2 u_n + O(h^2) = g_2. \quad (5.18)$$

Então, desconsiderando o termo do erro de truncamento, obtemos

$$\frac{\eta_2}{2h} u_{n-2} - \frac{2\eta_2}{h} u_{n-1} + \left( \theta_2 + \frac{3\eta_2}{2h} \right) u_n = g_2. \quad (5.19)$$

Por fim, as equações (5.16)-(5.19) formam o seguinte problema discretizado pelo método de diferenças finitas

$$\left( \theta_1 - \frac{3\eta_1}{2h} \right) u_1 + \frac{2\eta_1}{h} u_2 - \frac{\eta_1}{2h} u_3 = g_1. \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\alpha(x_i)}{h^2} - \frac{\beta(x_i)}{2h} \right) u_{i-1} + \left( \gamma(x_i) - \frac{2\alpha(x_i)}{h^2} \right) u_i \\ & + \left( \frac{\alpha(x_i)}{h^2} + \frac{\beta(x_i)}{2h} \right) u_{i+1} = f(x_i), \quad i = 2, \dots, n-1, \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\frac{\eta_2}{2h} u_{n-2} - \frac{2\eta_2}{h} u_{n-1} + \left( \theta_2 + \frac{3\eta_2}{2h} \right) u_n = g_2. \quad (5.22)$$

### 3. Resolução do problema discreto

O problema discreto (5.20)-(5.22) consiste em um sistema linear de  $n$  equações com  $n$  incógnitas. Na forma matricial temos

$$A\tilde{u} = b \quad (5.23)$$

onde  $\tilde{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$  é o vetor das incógnitas,  $b$  é o vetor dos termos constantes  $b = (g_1, f(x_2), f(x_3), \dots, f(x_{n-1}), g_2)$  e  $A$  é a matriz dos coeficientes. Observamos que os coeficientes não nulos da matriz  $A$  são:

$$a_{11} = \left( \theta_1 - \frac{3\eta_1}{2h} \right), \quad (5.24)$$

$$a_{12} = \frac{2\eta_1}{h}, \quad (5.25)$$

$$a_{13} = -\frac{\eta_1}{2h}, \quad (5.26)$$

$$a_{i,i-1} = \left( \frac{\alpha(x_i)}{h^2} - \frac{\beta(x_i)}{2h} \right), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.27)$$

$$a_{i,i} = \left( \gamma(x_i) - \frac{2\alpha(x_i)}{h^2} \right), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.28)$$

$$a_{i,i+1} = \left( \frac{\alpha(x_i)}{h^2} + \frac{\beta(x_i)}{2h} \right), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.29)$$

$$a_{n,n-2} = \frac{\eta_2}{2h}, \quad (5.30)$$

$$a_{n,n-1} = -\frac{2\eta_2}{h}, \quad (5.31)$$

$$a_{n,n} = \left( \theta_2 + \frac{3\eta_2}{2h} \right). \quad (5.32)$$

Com isso em mente, a matriz  $A$  tem a seguinte estrutura

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_{i,i-1} & a_{i,i} & a_{i,i+1} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} & \\ & & & a_{n,n-2} & a_{n,n-1} & a_{n,n} & \end{bmatrix}. \quad (5.33)$$

A resolução do sistema discreto se resume, então, a resolver o sistema  $A\tilde{u} = b$ , o que pode ser feito por qualquer método numérica apropriada.

**Exemplo 5.1.1.** Consideremos o seguinte problema de valor de contorno

$$-u'' = \text{sen}(x), \quad 0 \leq x \leq 2, \quad (5.34)$$

$$u(0) = 0, \quad (5.35)$$

$$u(2) = \text{sen}(2). \quad (5.36)$$

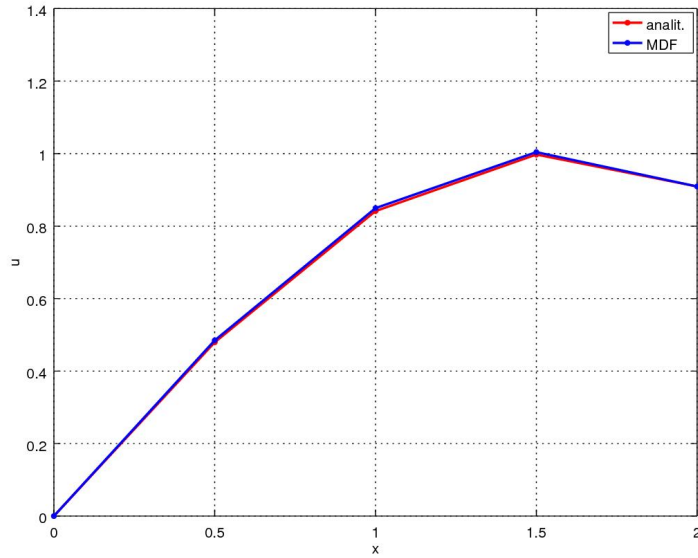


Figura 5.1: Resultado referente ao Exemplo 5.1.1.

A solução analítica deste problema é  $u(x) = \sin(x)$ . Agora, usando a abordagem pelo método de diferenças finitas abordado nesta seção, obtemos o seguinte problema discreto

$$u_1 = 0, \quad (5.37)$$

$$-\frac{1}{h^2}u_{i-1} + \frac{2}{h^2}u_i - \frac{1}{h^2}u_{i+1} = \sin(x_i), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad (5.38)$$

$$u_n = \sin(2), \quad (5.39)$$

onde  $h = \pi/(n-1)$  e  $x_i = (i-1)h$ .

$h$	$n$	$\ \tilde{u} - u\ _{L^2}$
$10^{-1}$	21	1,0E-03
$10^{-2}$	201	3,3E-05
$10^{-3}$	2001	1,0E-06

Tabela 5.1: Resultados referentes ao Exemplo 5.1.1.

Resolvendo este sistema com  $h = 0,5$  obtemos a solução numérica apresentada na Figura 5.1. Ainda, na Tabela 5.1 temos a comparação na norma  $L^2$  da



solução numérica  $\tilde{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$  com a solução analítica  $u(x) = \sin(x)$  para diferentes escolhas de  $h$ .

## Exercícios

[[tag:revisar]]

**Exercício 5.1.1.** Considere o seguinte problema de valor inicial

$$-u'' + u' = f(x), \quad -1 < x < 1, \quad (5.40)$$

$$u(-1) = 0, \quad (5.41)$$

$$u'(1) = 0, \quad (5.42)$$

onde

$$f(x) = \begin{cases} 1 & , x \leq 0 \\ 0 & , x > 0 \end{cases} \quad (5.43)$$

Use uma aproximação adequada pelo método de diferenças finitas para obter o valor aproximado de  $u(0)$  com precisão de 2 dígitos significativos.

## 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

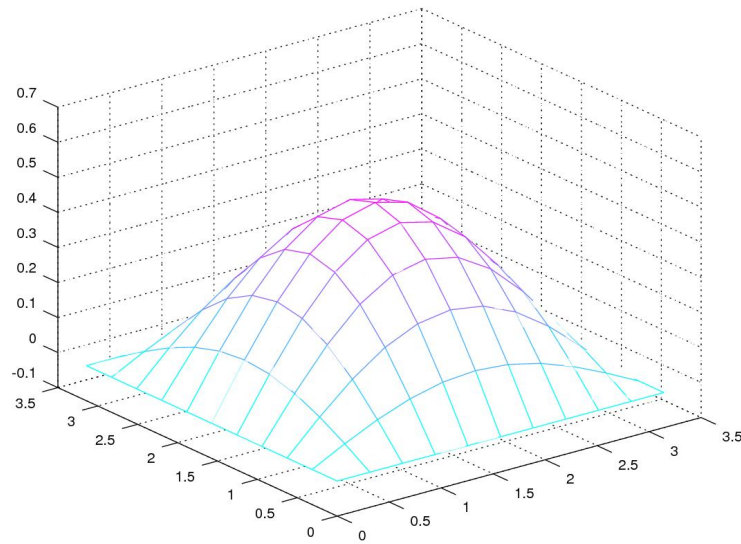


Figura 6.1: Resultado referente ao Exemplo 6.1.1.

```

#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

$$u_t - u_{xx} = \sin(x), \quad t > 0, \quad 0 \leq x \leq \pi, \quad (6.56)$$

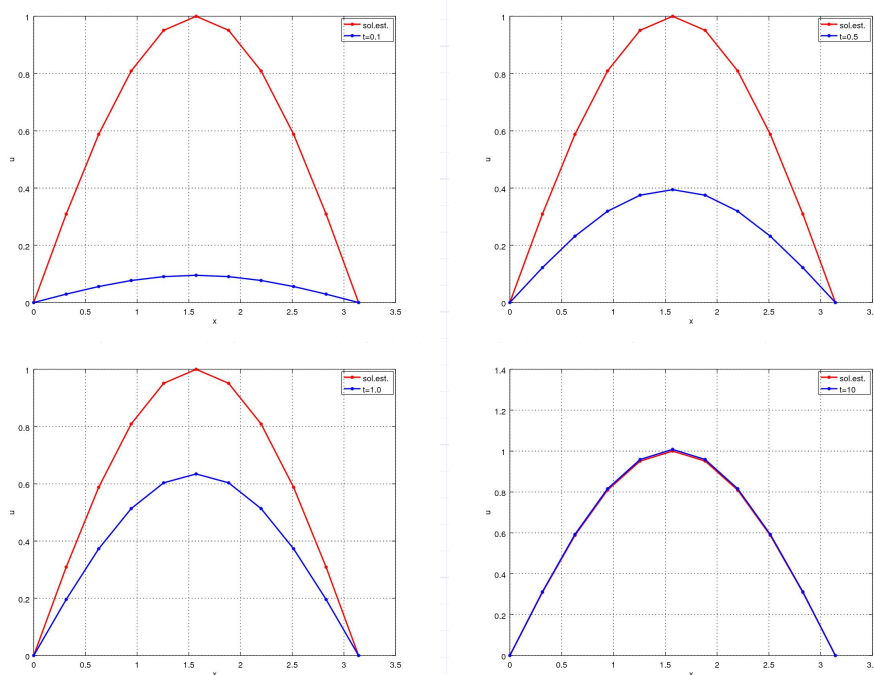


Figura 6.2: Resultados referentes ao Exemplo 6.2.1.

$$u(0,x) = 0, \quad 0 < x < \pi, \quad (6.57)$$

$$u(t,0) = 0, \quad t > 0 \quad (6.58)$$

$$u(t,\pi) = 0, \quad t > 0. \quad (6.59)$$

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;
```

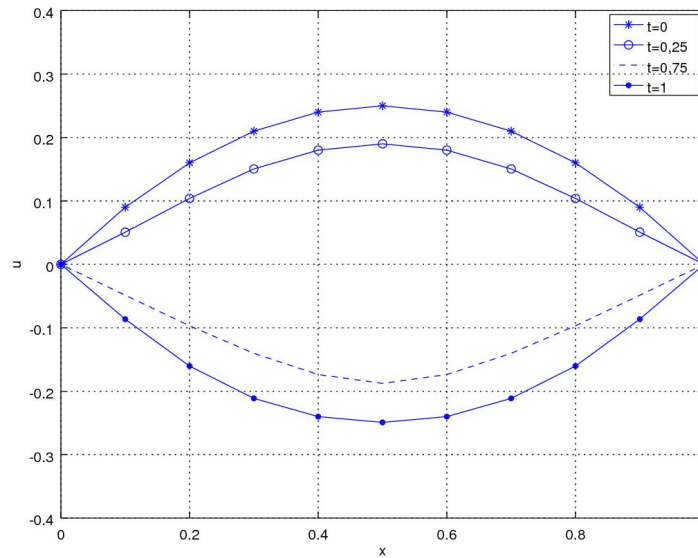


Figura 6.3: Resultados referentes ao Exemplo 6.3.1.

```

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

$$u_{tt} - u_{xx} = 0, t > 0, 0 < x < 1, \quad (6.85)$$

$$u(0, x) = x(1 - x), 0 < x < 1, \quad (6.86)$$

$$u_t(0, x) = 1, 0 < x < 1, \quad (6.87)$$

$$u(t, 0) = 0, t > 0 \quad (6.88)$$

$$u(t, \pi) = 0, t > 0. \quad (6.89)$$

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.** 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 1.1.2.**

$i$	1	2	3	4	5	6
$dy/dx$	4,0E-1	7,5E-1	1,3E+0	1,1E+0	7,5E-1	8,0E-1

**Exercício 1.2.1.** a)  $7,25162\text{E-}2$ ; b)  $7.24701\text{E-}2$ ; c)  $7,24696\text{E-}2$ ; d)  $7,24696\text{E-}2$ ;  
 $h = 10^{-2}$ ;

**Exercício 1.2.2.**  $4,0$ ;

**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)  $\frac{1}{12h} [-3f(x-h) - 10f(x) + 18f(x+h) - 6f(x+2h) + f(x+3h)]$
- d)  $\frac{1}{12h} [-25f(x) + 48f(x+h) - 36f(x+2h) + 16f(x+3h) - 3f(x+4h)]$

**Exercício 1.3.3.**

$i$	1	2	3	4	5	6
$\frac{dy}{dx}$	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.** a)  $3,33647E-1$ ; b)  $1,71368E-1$ ; c)  $2,79554E-1$

**Exercício 3.1.2.** a)  $4,02000E-1$ ; b)  $1,04250E+0$ ; c)  $8,08667E-1$

**Exercício 3.1.3.** Use um procedimento semelhante aquele usado para determinar a ordem do erro de truncamento da regra de Simpson.

**Exercício 3.1.4.**

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{3h}{2} \left[ f\left(a + \frac{1}{3}(b-a)\right) \right. \quad (3.44)$$

$$\left. + f\left(a + \frac{2}{3}(b-a)\right) \right] + O(h^3), \quad h = \frac{(b-a)}{3} \quad (3.45)$$

**Exercício 3.2.1.** a)  $2,69264E-1$ ; b)  $2,68282E-1$ ; c)  $2,68937E-1$

**Exercício 3.2.2.** 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.**  $x_1 = 0$ ,  $w_1 = 2$

**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 3.6.1.** 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.

**Exercício 4.1.5.** Dica: use o polinômio de Taylor de grau 2 de  $e^\delta$ .

**Exercício 4.1.6.** Dica: estude a demonstração do Teorema 4.1.1.

**Exercício 4.1.7.**  $h = \sqrt{2\delta/M}$ . Dica: Encontre o mínimo de  $E(h) := M/2 + \delta/h^2$ .

**Exercício 4.2.1.** a)  $-6,00654E-1$ ; b)  $-6,00703E-1$ ; c)  $-5,99608E-1$

**Exercício 4.3.1.**  $-5.99240E-1$

**Exercício 4.4.1.** a)  $-6,00696E-1$ ; b)  $-5,96694E-1$ ; c)  $-5,96161E-1$

**Exercício 5.1.1.**  $7,2E-1$

**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.