MÉTODOS COMPUTACIONAIS E APLICAÇÕES

A presente coleção de apostilas corresponde as primeiras 22 aulas do curso de mesmo nome ministrado durante o XIII e o XIV Programa de Verão do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

Ao escolher os temas quisemos apresentar tópicos que introduzem conceitos importantes da Análise Numérica e que exigissem como pré-requisitos do estudante apenas cursos de Cálculo Diferencial e Integral e de Álgebra Linear. Ao mesmo tempo procuramos limitar a presença de assuntos normalmente abordados num primeiro curso de Cálculo Numérico, como MAP-121, ao mínimo indispensável à continuidade lógica do curso. Assim, o material tratado é acessível e, com exceção das aulas I e V, novo para todos os estudantes que tenha concluido o curso básico de ciências exatas na Universidade de São Paulo.

Na sequência normal as aulas com um asterístico poderiam ser omitidas sem quebra de continuidade .

I - Interpolação de Lagrange,

*II - Interpolação de Hermite,

*III - Splines,

IV - Fórmulas de Newton,

V - Erro para a fórmula do Trapézio,

VI - Erro para a fórmula de Simpson,

VII - Extrapolação de Richardson,

VIII - Integração pelo método de Romberg,

*IX - Numeros de Bernoulli e outras aplicações da fórmula de MacLaurin,

X - Derivação,

XI - Método de Euler,

XII - Equações de Diferenças Finitas,

XIII - Erro para a fórmula de Euler,

XIV - Métodos de Runge-Kutta,

XV - Método de Adams-Bashforth,

XVI - Erro para o método de Adams-Bashforth,

XVII - Método de Adams-Moulton,

XVIII - Sistemas de Equações diferenciais ordinárias,

XIX - Métodos para solução de problemas de valor de contorno,

XX - Integrais Multiplas,

XXI - Equações Elípticas,

XXII - Equações Parabólicas e Hiperbólicas.

As três aulas finais do ano de 84, referentes a geradores de números aleatórios para uso em simulação não puderam, por falta de tempo, ser incluida no curso de 85.

O material apresentado é clássico e o livro de G. Dahlquist e A. Björck "Numerical Methods" (Prentice-Hall, 1974), além de ser ótima referência, lista uma extensa bibliografia.

JULIO MICHAEL STERN

15/02/85

Dada uma função, $f(x)$, conhecida em alguns pontos, x_i $i \in \{o,1,..,n\}$, queremos determinar um polinômio, $P(x)$, tal que:

a) $P(x_i) = f(x_i) = f_i$

b) $gr(P) \leq n$

Escrevendo $P(x)$ como

$P(x) = a_o + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$, a condição a) é expressa por

$$\begin{bmatrix} 1 & x_o & x_o^2 & \dots & x_o^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \cdot & \cdot\cdot & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdot & \cdot\cdot & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_o \\ a_1 \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_o \\ f_1 \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ f_n \end{bmatrix}$$

Exemplo 1:

Determine o polinômio que interpola a função nos pontos tabelados.

i	0	1	2
x_i	0	1	4
f_i	-1	1	7

resolvendo o sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_o \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 7 \end{bmatrix}$$

encontramos

$a_o = -1$, $a_1 = 2$,

$a_2 = 0$, donde

$P(x) = 2x - 1$

Prevemos agora a unicidade do polinômio interpolador:

Sejam $P(x)$ e $Q(x)$ polinômios que **satisfazem** as condições a) e b)

Seja $D(x) = P(x) - Q(x)$

Da condição b) segue que $gr(D) \leq n$

Da condição a) segue que $D(x_i) = 0$

Tem-se assim que D é um polinômio de grau $\leq n$ com $n+1$ raizes, logo

$D(x) = 0$ e $P(x) = Q(x)$ Q.E.D.

Obter o polinômio interpolador pela solução de um sistema linear é bastante inconveniente.

Se tivermos uma família de polinômios $L_i(x)$, $i \in \{0,1,...,n\}$ onde

c) $L_i(x_j) = \delta_{ij}$

d) $gr(L_i) \leq n$

onde

$$\delta_j^i = \begin{cases} 0 \text{ se } i \neq j \\ 1 \text{ se } i = j \end{cases}$$

podemos escrever

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i L_i(x)$$

Notemos que os polinômios

$$L_i(x) = \frac{(x-x_o)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_o)(x_i-x_1)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)}$$

satisfazem as condições c) e d), logo

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i L_i(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$$

Esta forma do polinômio interpolador é a forma de Lagrange

<u>Exemplo 2:</u>

Determine o polinômio interpolador na forma de Lagrange para a função e^x nos pontos tabelados.

i	x	e^x
0	0	1
1	05	1,648721
2	20	2,718282

res:

$$P(x) = 1\frac{(x-0,5)(x-1)}{(0-0,5)(x-1)} + 1,64\ldots\frac{(x-0)(x-1)}{(0,5-0)(0,5-1)} + 2,7\ldots\frac{x(x-0,5)}{1(1-0,5)}$$

Consideremos agora o erro que cometemos ao aproximar a função f(x) por P(x) em um ponto qualquer z.

Seja a função erro $E(z) \equiv f(z)-P(z)$ e I um intervalo $\mid I \supset \{z,x_o,x_1,\ldots,x_n\}$

Suporemos que f é de classe C^{n+1} em I.

Sejam F(x) e g(x) funções definidas em I por:

$$F(x) \equiv \prod (x-x_i)$$

$$g(x) \equiv E(x)-\alpha F(x), \quad \alpha \in R \mid g(z)=0$$

ie: tomamos α tal que g(x) calculado no ponto z se anule

e $z=x_i$, para algum i, $E(z)=0$

Assim a função g(x) tem n+2 raizes em I, a saber, $\{z,x_o,x_1,\ldots,x_n\}$

Entre cada duas raizes de g existe, pelo teorema de Rolle, ao menos uma raiz de g'. Conclui-se portanto que g' tem ao menor n+1 raizes em I, que g" tem ao menor n raizes em I,..., e que $g^{(n+1)}$ tem ao menos uma raiz, ξ, em I.

Assim $\xi \in I|$

$$g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - P^{(n+1)}(\xi) - \alpha F^{(n+1)}(\xi) = 0$$

Notando que P e F são polinômios de grau n e n+1, respectivamente, tem-se que $P^{(n+1)}(x) = 0$ e $F^{(n+1)} = (n+1)!$

Substituindo

$$g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - 0 - \alpha(n+1)! = 0 \quad , \text{ donde } \alpha = f^{(n+1)}(\xi)\ /(n+1)!,$$

$$E(z) = f(z) - P(z) = f^{(n+1)}(\xi)\ F(z)/(n+1)!$$

Como é em geral impossível determinar ξ, que é função de z, utilizamos com maior proveito a desigualdade

$$E(z) \leq \max_{\xi \in I} \left| f^{(n+1)}(\xi) \right| \frac{|F(z)|}{(n+1)!}$$

que nos fornece um limite superior para o erro cometido.

Exemplo 3:

A partir do exemplo 2 encontre um valor aproximado de $e^{0,25}$ e um limite para o erro cometido

res:

Tomemos $e^{0,25} \approx P(0,25) =$

$$= 1\ \frac{(-0,25)(-0,75)}{(-0,5)(-1)} + 1,648721\ \frac{(0,25)(-0,75)}{(0,5)(-0,5)} + 2,718282\ \frac{(0,25)(-0,25)}{(1)\ (0,5)}$$

$= 1,271756$, Para o cálculo da incerteza notemos que $f^{IV}(x) = e^x$, logo

$$E(0,25) \leq \max_{\xi \in [0,1]} \left| e^{\xi} \right| \frac{|(0,25-0)(0,25-0,5)(0,25-1)|}{3!} =$$

$$= \frac{e\ 0,25 \times 0,25 \times 0,75}{6} \cong 0,0212$$

Realmente $E(z) = e^{0,25} - P(0,25) = 1,2840254 - 1,271756 = 0,0123 \leq 0,0212$

II - INTERPOLAÇÃO DE HERMITE

Dada uma função, $f(E)$, da qual conhecemos os valores e os valores da derivada, $f'(x)$, num conjunto de pontos, x_i, $i \in \{0,1,\ldots,n\}$. O polinômio de Hermite é o polinômio $H(x)$ tal que

a) $gr(H) \leq 2n+1$

b) $H(x_i) = f(x_i) = f_i$ $\qquad\qquad i \in \{0,1,\ldots,n\}$

c) $H'(x_i) = f'(x_i) = f_i'$

Se tivermos as famílias de polinômios U_i e V_i, tais que

d) $gr(U_i) \leq 2n+1$ $\qquad$ e) $gr(V_i) \leq 2n+1$

f) $U_i(x_j) = \delta^i$ $\qquad$ g) $U_i'(x_j) = 0$

h) $V_i(x_j) = 0$ $\qquad$ k) $V_i'(x_j) = \delta_j^{\,i}$

Podemos escrever $H(x)$ como

$$H(x) = \sum_{i=0}^{n} \left[f_i U_i(x) + f_i' V_i(x)\right]$$

Provemos que

$$V_i(x) \equiv (x-x_i)\, L_i^2(x), \text{ e}$$

$$U_i(x) \equiv [1-2L_i'(x_i)(x-x_i)]\, L_i^2(x)$$

obedecem as relações d) e) f) g) h) e k)

As condições d) e e) são satisfeitos por sabermos que $gr(L_i) \leq n$

Para as demais notemos que

$$V_i = (x-x_i)\, L_i^2(x) \quad \Rightarrow$$

$$V_i' = L_i^2(x) + 2L_i(x)(x-x_i)\, L_i'(x) \text{ e}$$

$$V_i(x_e) = (x_e-x_i)\, L_i^2(x_e) = (x_e-x_i)\, \delta_i^{\,e} = 0$$

$$V_i'(x_e) = \delta_e^{\,i} + \underbrace{2\delta_e^{\,i}(x_e-x_i)\, L_i'(x_e)}_{=0} = \delta_e^{\,i}$$

vemos também que

$$U_i(x) = [1-2L_i'(x_i)(x-x_i)]\, L_i^2(x) \quad \Rightarrow$$

$$U_i'(x) = -2L_i'(x_i)\, L_i^2(x) + [(1-2L_i'(x_i)(x-x_i)]\, 2L_i(x) \times$$
$$\times L_i'(x)$$

$$U_i(x_e) = [1-2L_i'(x_i)(x_e-x_i)]\, \delta_e^{\,i} = \delta_e^{\,i}$$

$$U_i'(x_e) = -2L_i'(x_i)\,\delta_e^{\,i} + 2L_i'(x_e)\,L_i(x_e) +$$

$$+ 4L_i'(x_i)\,(x-x_i)\,L_i(x_e)\,L_i'(x_e) = -2L_i'(x_i)\,\delta_e^{\,i} + 2L'(x_e)\,\delta_e^{\,i} +$$

$$+ 4L_i'(x_i)\,L_i'(x_e) \times (x_e-x_i)\,\delta_e^{\,i} \quad = 0$$

$$= 0$$

Q.E.D.

À semelhança de como procedemos no caso da interpolação de Lagrange analisemos o erro cometido na aproximação

$f(x) \cong H(x)$, $E(z) \equiv f(z) - H(z)$

Seja $g(x)$ definida em $I \subset \{z, x_o, x_1, \ldots, x_n\}$

$$g(x) = f(x) - H(x) - [f(z)-H(z)] \prod^{n} \left(\frac{x-x_i}{z-x_i}\right)^2$$

para algum $z \neq x_i$, $\forall\, i \quad \{0,1,\ldots,n\}$

Vê-se que

$$g(x_k) = f(x_k) - H(x_k) - [f(z)-H(z)] \prod_{i=0}^{n} \left(\frac{x_k-x_i}{z-x_i}\right)^2$$

$$= 0$$

e

$$g(z) = (f(z)-H(z))\,(-1- \prod_{i=0}^{n} 1) = 0$$

$$= 0$$

Tenho g raizes em z, x_o, x_1, ..., x_n, o teorema de R lle garante a existência de n+1 raizes de $g'(x)$ em I, distintas de z, x_o, $x_1, \ldots, x_n$

Vê-se ainda que

$$g'(x) = f'(x) - H'(x) - [f(z)-H(z)] \times 2 \prod_{i=0}^{n} \frac{(x-x_i)}{(z-x_i)^2} \times \sum_{j=0}^{n} \prod_{\substack{e=0\\ e\neq j}}^{n} (x-x_e)$$

assim

$$g'(x_k) = f'(x_k) - H'(x_k) - \quad f(z)-H(z) \quad 2 \prod_{i=0}^{n} \frac{(x_k-x_i)}{(z-x_i)^2} \times \sum_{j} \prod_{e\neq j} (x_k-x_e) = 0$$

Tem-se assim 2n+2 raizes de g' em I. Por aplicação sucessiva do Teorema de Rolle podemos afirmar que

$$\exists\ \xi \in I \mid g^{(2n+2)}(\xi) = 0 \text{ , mas}$$

$$g^{(2n+2)}(\xi) = f^{(2n+2)}(\xi) - H^{(2n+2)}(\xi) - [f(z)-H(z)]\ \frac{(2n+2)!}{\prod_{i=0}^{n}(z-x_i)^2}$$

donde

$$E(z) = f(z)-H(z) = f^{(2n+2)}(\xi)\ \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)^2 \ /\ (2n+2)!$$

novamente nos será mais util a desigualdade

$$E(z) \leq \max_{\xi \in I}\ f^{(2n+2)}(\xi)\ \frac{\Pi(z-x_i)^2}{(2n+2)!}$$

<u>Exemplo 1</u>:

i	x_i	f(x)	f'(x)
0	0	0	1
1	Π	0	-1

Encontre o polinômio de Hermite que interpola a função f(x)=sen(x) nos pontos tabelados.
Se uma aproximação para $f(\frac{\Pi}{2})$

$$L_o(x) = \frac{x-\Pi}{0-\Pi} = \frac{-x}{\Pi} + 1, L_o'(x) = \frac{-1}{\Pi}$$

$$L_o^2(x) = \frac{x^2}{\Pi 2} - \frac{2x}{\Pi} + 1$$

$$L_1(x) = \frac{x-0}{\Pi-0} = \frac{x}{\Pi}\ ,\ L_i'(x) = \frac{1}{\Pi}$$

$$L_1^2(x) = x^2/\Pi^2$$

$$V_o = (x-0)\ (\frac{x^2}{\Pi 2} - \frac{2x}{\Pi} + 1) = \frac{x^3}{\Pi 2} - \frac{2x^2}{\Pi} + x$$

$$V_1 = (x-\Pi)\ \frac{x^2}{\Pi 2} = \frac{x^3}{\Pi 2} - \frac{x^2}{\Pi}$$

$$V_o = (1-2(-\frac{1}{\Pi})(x-0))\ (\frac{x^2}{\Pi 2} - \frac{2x}{\Pi} + 1) = \frac{x^3}{\Pi 3} + \frac{-3x^2}{\Pi 2} + 1$$

$$H(x) = OU_o(x) + 1V_o + OU_1(x) + (-1)V_1(x) = \frac{-x^2}{\Pi} + x \Rightarrow H'(x) = -\frac{2x}{\Pi} + 1$$

$$H(0) = 0 \quad H(\Pi) = 0 \quad H'(0) = 1 \quad H'(\Pi) = -1$$

$$H(\frac{\Pi}{2}) = \frac{\Pi}{4} \cong 0,7854 \qquad sen(\frac{\Pi}{2}) = 1$$

$$E(\frac{\Pi}{2}) = 0,215 \leq 1\ \frac{(x-0)^2(x-\Pi)^2}{(2\ 1 + 2)\ !} = \frac{\Pi^4}{16.24} = 0,25$$

III - SPLINES

O objetivo desta tecnica é interpolar uma função, $f(x)$, tabelada em um número arbitrariamente grande de pontos, $\{x_o, x_1, \dots, x_n\} \subset I$, por uma função, $P(x)$, que é localmente, em cada intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ um polinômio $P_i(x)$ de grau k

ie: se $x \in [x_i, x_{i+1}[$

$$P(x) \equiv P_i(x) = a_{i,o} + a_{i,1}x + \dots + a_{i,k}x^k$$

As condições mais frequentemente impostas sobre $P(x)$ são a de $P(x)$ ser de classe C^2 em I

ie:

a) $f(x_i) = P(x_i) \equiv P_i(x_i) = P_{i-1}(x_i)$

b) $P_i'(x_i) = P_{i-1}'(x_i)$

c) $P_i''(x_i) = P_{i-1}''(x_i)$

Nestas condições é suficiente tomar k=3, o que implica que $P''(x)$ seja uma função linear em cada intervalo $[x_i, x_{i+1}[$, ou

$$P_i''(x) = P''(x_i)\,\frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} + P''(x_{i+1})\,\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}$$

definindo $\Delta_i = x_{i+1}-x_i$ e integrando vem

$$P_i'(x) = P''(x_i)\,\frac{(x_{i+1}-x)^2}{-2\Delta_i} + P''(x_{i+1})\,\frac{(x-x_i)^2}{2\Delta_i} + A$$

opor nova integração resulta

$$P_i(x) = P''(x_i)\,\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6\Delta_i} + P''(x_{i+1})\,\frac{(x-x_i)^3}{6\Delta_i} + Ax + B$$

usando a condição a) em x_i e x_{i+1} vem que

$$P_i(x) = \frac{P''(x_{i+1})}{6\Delta_i}(x-x_i)^3 + \left[\frac{f_{i+1}}{\Delta_i} - \frac{\Delta i}{6}P''(x_{i+1})\right](x-x_i)$$

$$+\frac{P''(x_i)}{6\Delta_i}(x_{i+1}-x)^3 + \left[\frac{f_i}{\Delta_i} - \frac{\Delta i}{6}P''(x_i)\right](x_{i+1}-x)$$

portanto

$$P_i'(x) = \frac{P''(x_{i+1})}{2\Delta_i}(x-x_i)^2 + \left[\frac{f_{i+1}}{\Delta_i} - \frac{\Delta i}{6}P''(x_{i+1})\right](1) +$$

$$-\frac{P''(x_i)}{2\Delta_i}(x_{i+1}-x)^2 + \left[\frac{f_i}{\Delta_i} - \frac{\Delta i}{6}P''(x_i)\right](-1),\ \text{assim}$$

$$P_i'(x_i) = \frac{f_{i+1}-f_i}{\Delta_i} + \frac{P''(x_i)-P''(x_{i+1})}{6/\Delta_i} - \frac{P''(x_i)\Delta i}{2}$$

analogamente

$$P_{i-1}'(x) = \frac{P''(x_i)}{2\Delta_{i-1}}(x-x_{i-1})^2 + \left[\frac{f_i}{\Delta_{i-1}} - \frac{\Delta i-1}{6}P''(x_i)\right] + \frac{P''(x_{i-1})}{2\Delta_{i-1}}(x_i-x)^2 +$$

$$+\left[\frac{f_{i-1}}{\Delta_{i-1}} - \frac{\Delta_{i-1}}{6}\quad P''(x_{i-1})\right]$$

donde

$$P_{i-1}'(x_i) = \frac{P''(x_i)\ i-1}{2} + \frac{f_i-f_{i-1}}{\Delta_{i-1}} + \frac{P''(x_{i-1})-P''(x_i)}{6/\Delta_{i-1}}$$

usando a condição b) temos que

$$\frac{\Delta_{i-1}}{6}P''(x_{i-1}) + \frac{(\Delta_{i-1}+\Delta_i)}{3}P''(x_i) + \frac{\Delta_{i+1}}{6}P''(x_{i+1})$$

$$= \frac{f_{i+1}-f_i}{\Delta_i} + \frac{f_i-f_{i-1}}{\Delta_{i-1}}$$

se em particular, $\Delta_{i-1}=\Delta_i = \Delta$

$$P''(x_{i-1})+4P''(x_i)+P''(x_{i+1}) = \frac{6}{\Delta 2}(f_{i+1}-2f_i+f_{i-1})$$

escrevendoestas equações para $i \in \{1,\ldots,n-1\}$ temos n-2 equações lineares. Para os pontos extremos devemos impor condições de contorno apropriadas, sendo as mais frequentes:

1) $P''(x_o) = \lambda P''(x_1)$; $P''(x_n) = \lambda P''(x_{n-1})$ $\lambda \in [0,1]$

2) $P''(x_o) = P''(x_{n-1})$; $P''(x_1) = P''(x_n)$

As condições 1 e 2 representam, em teoria das vigas, uma viga engastada e um anel.

<u>Exemplo</u>:

Determine-se os coeficientes de $P_i(x)$ para 4 pontos com as condições de contorno 1

res:

temos que

$P''(x_o) = \lambda P''(x_1)$, $P''(x_3) = \lambda P''(x_2)$

$$(4+\lambda)P''(x_1)+P''(x_2) = \frac{6}{\Delta^2}(f_o-2f_1+f_2)$$

$$(4+\lambda)P''(x_2)+P''(x_1) = \frac{6}{\Delta^2}(f_1-2f_2+f_3)$$

donde

$$P''(x_1) = \frac{\frac{(4+\lambda)6}{\Delta 2}(f_o-2f_1+f_2) - \frac{6}{\Delta 2}(f_1-2f_2+f_3)}{(4+\lambda)^2-1}$$

$$P''(x_2) = \frac{\frac{(4+\lambda)6}{\Delta^2}(f_1-2f_2+f_3) - \frac{6}{\Delta^2}(f_o-2f_1+f_2)}{(4+\lambda)^2-1}$$

fazendo-se $P''(x_1) = \alpha$ e $P''(x_2) = \beta$

tem-se também $P''(x_o) = \lambda\alpha$ e $P''(x_3) = \lambda\beta$

donde

$$P_o(x) = \frac{2}{6\Delta}(x-x_o)^3 + \left[\frac{f(x_1)}{\Delta} - \frac{\Delta}{6}\alpha\right](x-x_o) +$$

$$+ \frac{2}{6\Delta}(x_1-x)^3 + \left[\frac{f(x_o)}{\Delta} - \frac{\Delta}{6}\lambda\alpha\right](x_1-x)$$

$$P_1(x) = \frac{\beta}{6\Delta}(x-x_1)^3 + \left[\frac{f(x2)}{\Delta} - \frac{\Delta}{6}\beta\right](x-x_1) +$$

$$+ \frac{2}{6\Delta}(x_2-x)^3 + \left[\frac{f(x1)}{\Delta} - \frac{\Delta}{6}\alpha\right](x_2-x)$$

$$P_2(x) = \frac{\lambda\beta}{6\Delta}(x-x_2)^3 + \left[\frac{f(x3)}{\Delta} - \frac{\Delta}{6}\lambda\beta\right](x-x_2)$$

$$+ \frac{\beta}{6\Delta}(x_3-x)^3 + \left[\frac{f(x2)}{\Delta} - \frac{\Delta}{6}\beta\right](x_3-x)$$

de usarmos como exemplo a tabela

i	x_i	sen x_i
0	0	0
1	$\Pi/3$	0,866
2	$2\Pi/3$	0,866
3	Π	0

Obtemos

$$P_1(x) = \frac{\beta}{6\Pi/3}(x-\Pi/3)^3 +$$

$$\left[\frac{0,866}{\Pi/3} - \frac{\Pi/3}{6}\beta\right](x-\frac{\Pi}{3}) +$$

$$+ \frac{2}{6\Pi/3}\left(\frac{2\Pi}{3}-x\right)^3 + \left[\frac{0,866}{\Pi/3} - \frac{\Pi/3}{6}\alpha\right](-x+\frac{2\Pi}{3})$$

Para $x = \Pi/2$
temos, em função
do λ escolhido

λ	α	β	$P(x)$
0	0	0	
1			

IV - Integração, Fórmulas de Newton

É um problema frequente o cálculo aproximado de uma integral definida

$$I = \int_a^b f(x)\, dx$$

Um procedimento padrão é estimar I integrando uma função aproximadora, facilmente integravel, i.é:

$$I \cong \int_a^b P(x)\, dX, \quad P(x) \cong f(x)$$

Estudemos, em detalhe, o caso em que $P(x)$ é o polinômio interpolador de Lagrange para $f(x)$ nos pontos $\{x_o, x_1, \ldots, x_n\}$. Da aula I sabemos que

$$f(x) \cong P(x) = \sum_{i=o}^{n} f(x_i)\, L_i\,(x) = \sum_{i=o}^{n} f_i \prod_{\substack{j=o\\ j\neq i}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$$

então

$$I \cong \int_a^b \sum_{i=o}^{n} f_i\, L_i\,(x)\, dx = \sum_{i=o}^{n} f_i \int_a^b L_i\,(x)\, dx =$$

$$= \sum_{i=o}^{n} f_i\, K_i, \quad \text{onde} \quad K_i = \int_a^b L_i\,(x)\, dx$$

exemplo 1

Obter uma aproximação de $\int_o^1 e^x\, Dx$, utilizando os valores de e^x em $x_o = 0$ e $x_1 = 1$ tabelados no exemplo I-2

res:

$$P(x) = \sum_{i=o}^{1} f(x_i)\, L_i\,(x) = f_o \frac{x-x_1}{x_o-x_1} + f_1 \frac{x-x_o}{x_1-x_o}, \quad \text{e}$$

$$I = \int_a^b P(x)\, dx = \sum_{i=o}^{1} f_i\, K_i, \quad \text{onde}$$

$$K_o = \int_a^b L_o(X)\,dX = \int_{X_o}^{X_1} \frac{X-X_1}{X_o-X_1}\,dX = \frac{X_1-X_o}{2}, \quad e$$

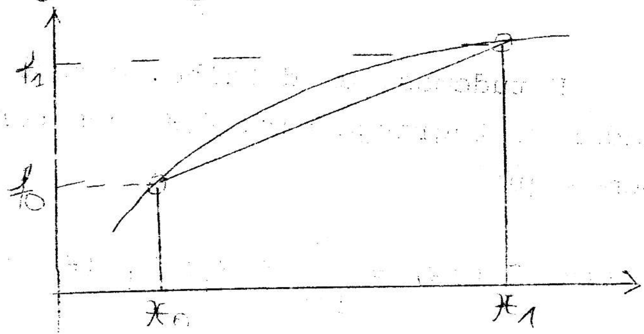
$$K_1 = \int_a^b L_1(X)\,dX = \int_{X_o}^{X_1} \frac{X-X_o}{X_1-X_o}\,dX = \frac{X_1-X_o}{2}, \quad \text{donde}$$

$$I \cong f_o K_o + f_1 K_1 = (X_1-X_o)(f_o+f_1)/2 = (1-0)(2{,}718282-1)/2 = 0{,}859141$$

a equação

$$\int_{X_o}^{X_1} f(X)\,dX \cong (X_1-X_o)(f(X_o) + f(X_1))/2$$

tem uma interpretação geométrica simples e é conhecida como "Regra do trapézio"



Na prática é util termos o estudo do caso de pontos igualmente espaçados se $X_i - X_{i-1} = \Delta_i = \Delta$, $\forall_i \in \{1,\ldots,n\}$ neste caso, através da transformação de variáveis $Y = (X-X_o)/\Delta$, que leva $X_i \to Y_i = i$, temos

Δdy
//

$$I = \int_a^b f(X)\,dX = \int_{(a-X_o)/\Delta}^{(b-X_o)/\Delta} f(\Delta Y+X_o)\,\cancel{dX} = \int_A^B f(\Delta Y+X_o)\,dX$$

Δdy

$$= \Delta \int_A^B \sum_{i=o}^{n} f(\Delta Y_i+X_o)\,L_i(Y)\,dY = \Delta \sum_{i=o}^{n} f(\Delta Y_i+X_o)\,C_i$$

Δi+X₀ (Δ·i+X₀)

onde

$$C_i = \int_A^B L_i(Y)\,dY = \int_A^B \prod_{\substack{j=o\\ j\neq i}}^{n} \frac{Y-j}{i-j} = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_A^B \prod_{\substack{j=o\\ j\neq i}}^{n} (Y-j)\,dY$$

se, em particular, tivermos $a = X_o$ e $b = X_n$

então

$$C_i = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_o^n \prod_{\substack{j=o\\ j\neq i}}^{n} (Y-j)\,dY = n\,C_i^n,$$

donde

$$I \cong \Delta \sum_{i=o}^{n} f(x_i)\ C_i = \Delta \sum_{i=o}^{n} n\ C_i^n\ f(x_i) =$$

$$= \Delta\ n \sum_{i=o}^{n} C_i^n\ f(x_i) = (x_n - x_o) \sum_{i=o} C_i^n\ f(x_i)$$

Estas são as fórmulas de Newton

exemplo 2

Obtenha C_i^2 e calcule $\int_o^1 e^x$ usando todos os pontos tabelados no ex-I-2

res:

$$2\ C_i^2 = \frac{(-1)^{2-i}}{i!(2-i)!} \int_o^2 \prod_{\substack{j=o\\ j\neq i}}^{2} (Y-j)\ dY \quad \text{assim}$$

$$C_o^2 = \frac{1}{2}\ \frac{(-1)^{2-0}}{0!(2-0)!} \int_o^2 (Y-1)(Y-2)\ dY = \frac{1}{4}\int_0^2 (Y^2-3Y+2)\ dY =$$

$$= \frac{1}{4}\left[\frac{Y^3}{3} - \frac{3Y^2}{2} + 2Y\right]_o^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{8}{3} - \frac{12}{2} - 4\right) = 1/6$$

$$C_1^2 = \frac{1}{2}\ \frac{(-1)^{2-1}}{1!(2-1)!} \int_o^2 (Y-0)(Y-2)\ dY = -\frac{1}{2}\left[\frac{Y^3}{3} - Y^2\right]^2 = 4/6$$

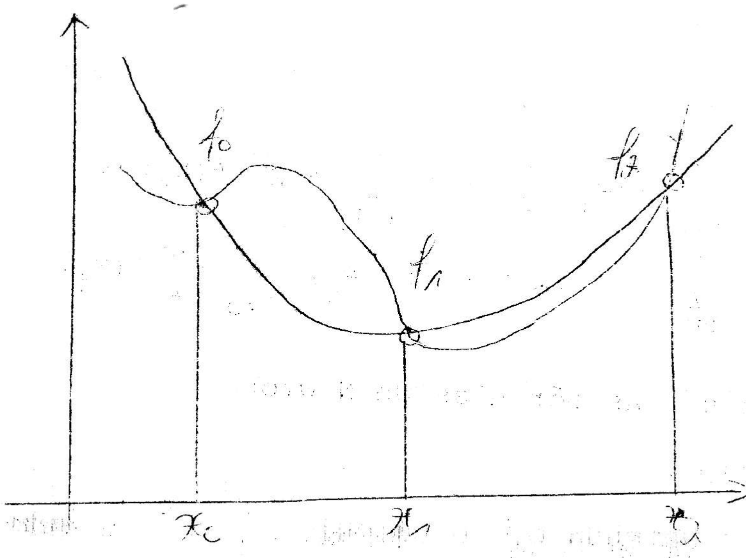
$$C_2^2 = \frac{1}{2}\ \frac{(-1)^o}{2!0!} \int_o^2 (Y-0)(Y-1)\ dY = \frac{1}{4}\left[\frac{Y^3}{3} - \frac{Y^2}{3}\right]_o^2 = 1/6$$

donde

$$I \cong \Delta\ n \sum_{i=o}^{n} C_i^2\ f(x_i) = \Delta\ 2\ \left(\frac{1}{6}\ f(x_o + \frac{4}{6}\ f(x_1) +\right.$$

$$\left. + \frac{1}{6}\ f(x_2)\right) = \Delta(f(x_o) + 4\ f(x_1) + f(x_2))/3 =$$

$0,5\ (1+4\times 1,648721+2,7118282) = 1,718861$



A fórmula

$I \cong \frac{\Delta}{3}\ (f_0+4f_1+f_2)$

é conhecida como

"Regra de Simpson" ou

"da Parábola"

Integrando a função $f(x) = 1$. Concluímos que $\sum_{i=0}^{n} C_i^n = 1$

Invertendo o intervalo de integração.

Concluímos que $C_i^n = C_{n-i}^n$

		$C_i^n \times \alpha$				
n	α	i=0	i=1	i=2	i=3	---
1	2	1	1			
2	6	1	4	1		
3	8	1	3	3	1	
4	90	7	32	12	32	---
5	288	19	75	50	50	---
6	840	41	216	27	272	---

na tabela ao lado temos todos os coeficientes de Newton, até n=6. Note que basta ter

C_i^n, $i \in \{0,1,\ldots[n/2]\}$

exemplo 3

Calcule, usando as fórmulas de Newton, para n=3, $I = \int_{0,5}^{2} x^3\, dx$

$I \sim \frac{\Delta n}{\alpha} \sum_{i=0}^{n} \alpha\ C_i^3\ \ f(x_i) =$

$= \frac{0,5\times 3}{8}\ (1\times(0,5)^3 + 3(1)^3 + 3(1,5)^3 + 1(2)^3) = 3,984375$

V - Integração, Erro para a fórmula do Trapézio

Vamos agora determinar o erro cometido numa integração numérica pelo uso da regra do trapézio.

Seja $f \in C^2$ em $I = [x_0, x_1]$, $\Delta = x_1 - x_0$,

e
$$E(\Delta) = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\, dx - \frac{\Delta}{2}\left(f(x_0) + f(x_1)\right)$$

ou equivalente

$$E(\Delta) = \int_{x_0}^{x_0+\Delta} f\, dx - \frac{\Delta}{2}\left(f(x_0) + f(x_0+\Delta)\right)$$

derivando sucessivamente a última equação temos:

$$E'(\Delta) = f(x_0+\Delta) - \frac{1}{2}\left(f(x_0) + f(x_0+\Delta)\right) +$$

$$- \frac{\Delta}{2} f'(x_0+\Delta) = \frac{1}{2}\left(f(x_0+\Delta) - f(x_0)\right) - \frac{\Delta}{2} f'(x_0+\Delta)$$

e

$$E''(\Delta) = \frac{1}{2} f'(x_0+\Delta) - \frac{1}{2} f'(x_0+\Delta) - \frac{\Delta}{2} f''(x_0+\Delta) = -\frac{\Delta}{2} f''(x_0+\Delta)$$

Integrando a última identidade obtemos:

$$E'(\Delta) = E'(0) + \int_0^{\Delta} E''(h)\, dh = \int_0^{\Delta} -\frac{h}{2} f''(x_0+h)\, dh \overset{*}{\Longrightarrow}$$

---

* "Teorema do valor médio do cálculo integral" (TVMI).
Seja f C^1 em $[a,b]$ e g integrável e de sinal constante em $[a,b]$.
Afirma-se que $\xi \in [a,b]$ |

$$\int_a^b f(x)\, g(x)\, dx = f(\xi) \int_a^b g(x)\, dx$$

Prova: Seja $m = \min\limits_{\alpha \in [a,b]} f(\alpha)$ e $M = \max\limits_{\alpha \in [a,b]} f(\alpha)$

se $g \geq 0$ temos que

$$m \int_a^b g(x)\, dx \leq \int_a^b f(x)\, g(x)\, dx \leq M \int_a^b g(x)\, dx$$

$$\Longrightarrow \int_a^b f(x)\, g(x)\, dx = \beta \int_a^b g(x)\, dx, \quad m \leq \beta \leq M$$

pelo teorema do valor intermediário $\xi \in [a,b] \mid f(\xi) = \beta$, $\forall\, \beta \mid M \leq \beta \leq M$

O que termina a prova

$$E'(\Delta) = -\frac{1}{2} f''(\xi) \int_0^{\Delta} h dh = -\frac{\Delta^2}{4} f''(\xi)$$

para algum $\xi \in [x_0, x_1]$

Após nova integração temos

$$E(\Delta) = \underset{=0}{E(0)} + \int_0^{\Delta} E'(h) dh = \int_0^{\Delta} -\frac{h^2}{4} f''(\xi(h)) dh$$

novamente pelo argumento do TVMI

$$\lambda \in I \mid E(\Delta) = -\frac{1}{4} f''(\xi(\lambda)) \int_0^{\Delta} h^2 \, dh = -\frac{\Delta^3}{12} f''(\mu), \text{ para algum}$$

$\mu \in [x_0, x_1]$

Sendo, em geral, difícil determinar μ será mais util a fórmula

$$E(\Delta) \leq \frac{\Delta^3}{12} \max_{\mu \in I} | f''(\mu) |$$

exemplo 1

Mostre que o resultado obtido no ex IV-1 está dentro da precisão esperada

res:

neste caso $E(1) \leq \frac{1^3}{12} \max_{\mu \in [0,1]} |e^{\mu}| = e/12 \cong 0,23$

Realmente $\int_0^{\Delta} e^x \, dx - 1,859141 \cong -0,14 \leq 0,23$

Como $f''(x) = e^x > 0$

$x \in I$, temos

$(\Delta) < 0$, como ilustra a

figura

Uma maneira prática de reduzir o erro do cálculo de uma integral com a regra do trapézio é sub-dividir o intervalo em n-sub-intervalos

Aplicando a cada sub-intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ a regra do trapézio temos,

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x)\, dx \cong \frac{1}{2}(x_1 - x_0)(f(x_0) + f(x_1)) + ---$$

$$-- + \frac{1}{2}(x_n - x_{n-1})(f(x_{n+1}) + f(x_n)) = \sum_{i=1}^{n} \Delta_i \frac{1}{2}(f(x_i) - f(x_{i-1}))$$

Se tivermos $\Delta_i = \Delta, \quad \forall\, i \in \{1,..n\}$

$$I \cong \frac{\Delta}{2}(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n))$$

exemplo 2

Cálculo $I = \int_0^1 e^x\, dx$ usando todos os pontos tabelados no

ex-I-2

res:

$$I \cong \frac{\Delta}{2}(f(x_0) + 2\, f(x_1) + f(x_2)) =$$

$$= \frac{0,5}{2}(1 + 2\times 1,648721 + 2,718282) = 1,753931$$

Estudemos em detalhe o erro cometido com a aproximação da integral pelo processo de sub-divisão do intervalo e posterior aplicação da regra do trapézio, no caso de pontos igualmente espaçador, $x_i - x_{i-1} = \Delta$

Seja $E_i = \displaystyle\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx - \frac{1}{2}\Delta\,(f(x_1) + f(x_{i+1})$

e $E_+ = \displaystyle\int_{x_o}^{x_n} f(x)\,dx - \frac{\Delta}{2}\,(f(x_o) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n))$

temos que $E_+ = \displaystyle\sum_{i=o}^{n-1} E_i \leq \sum_i |E_i| \leq$

$$\leq \sum_i \frac{\Delta^3}{12} \max_{\mu_i \in [x_i, x_{i+1}]} |f''(\mu)| \leq \sum_i \frac{\Delta^3}{12} \max_{\mu\in I} |f''(\mu)| =$$

$$= \frac{n\Delta^3}{12} \max_I |f''(\mu)| = \frac{(x_n - x_o)^3}{12\,n^2} \max_{\mu\in I} |f''(\mu)|$$

exemplo 3

Compare o erro cometido no ex.2 com o máximo esperado

$$E_+ = \int_0^1 e^x\,dx - 1{,}753931 \cong -0{,}036,$$

que esta dentro do limite

$$|E_+| \leq \frac{(1-0)^3}{12\times 2^2} \max_{\mu\in[0,1]} |e^\mu| = \frac{e}{48} \cong 0{,}057$$

exemplo 4

Calcule em quantos sub-intervalos deveremos dividir [0,1] pa para calcular $\displaystyle\int_0^1 e^x\,dx$ com uma precisão de 10^{-2}.

VI - INTEGRAÇÃO, ERRO NA REGRA DE SIMPSON.

Determinaremos agora o erro cometido ao aproximar uma integral pela regra de Simpson.

Analogamente ao que foi feito para a regra do trapézio, seja $[a,b]= I$, f, C^4 em I, $x_o= a$, $x_2= b$, $x_1= (a+b)/2$.

O erro cometido é

$$E(\Delta)= \int_{x_o}^{x_2} f(x)dt - \frac{\Delta}{3} (f(x_o) + 4f(x_1) + f(x_2))=$$

$$= \int_{x_1-\Delta}^{x_1+\Delta} f(x)dx - \frac{\Delta}{3} (f(x_1-\Delta) + 4f(x_1) + f(x_1+\Delta))$$

Derivando sucessivamente $E(\Delta)$ temos

$$E'(\Delta)= [f(x_1-\Delta) + f(x_1+\Delta)] - \frac{1}{3} [f(x_1-\Delta) + 4f(x_1) + f(x_1+\Delta)] -$$

$$- \frac{\Delta}{3} [- f'(x_1-\Delta) + f'(x +\Delta)]=$$

$$\frac{2}{3} [f(x_1-\Delta) + f(x_1+\Delta)] + \frac{\Delta}{3} [f'(x_1-\Delta) - f'(x_1+\Delta)] + \frac{4}{3} f(x_1)$$

$$E''(\Delta)= \frac{2}{3} [- f'(x_1-\Delta) + f'(x_1+\Delta)] + \frac{1}{3} [f'(x_1-\Delta) - f'(x_1+\Delta)]+$$

$$+ \frac{\Delta}{3} [- f''(x_1-\Delta) - f''(x_1+\Delta)] =$$

$$= \frac{1}{3} [-f'(x_1-\Delta) + f'(x_1+\Delta)] - \frac{\Delta}{3} [f''(x_1-\Delta) + f''(x_1+\Delta)]$$

$$E'''(\Delta)= \frac{1}{3} [f''(x_1-\Delta) + f''(x_1+\Delta)] + \frac{-1}{3} [f''(x_1-\Delta) + f''(x_1+\Delta)] -$$

$$- \frac{\Delta}{3} [-f'''(x_1-\Delta) + f'''(x_1+\Delta)] = - \frac{\Delta}{3} [f'''(x_1+\Delta) - f'''(x_1-\Delta)]$$

Pelo TVM sabemos que $\exists\ \xi\epsilon I\ |$

$$E'''(\Delta)= - \frac{\Delta}{3} f^{IV}(\xi) [(x_1+\Delta)-(x_1-\Delta)] = \frac{-2\Delta^2}{3} f^{IV}(\xi)$$

Integrando a última equação vem que

$$E''(\Delta) = E''(0) + \int_0^\Delta E'''(h)\,dh = \int_0^\Delta \frac{-2}{3} f^{IV}(\xi(h))h^2 dh$$

Pelo TVMI, $\exists\ \lambda \in I |$

$$E''(\Delta) = \frac{-2}{3} f^{IV}(\xi(\lambda)) \int_0^\Delta h^2 dh \Rightarrow \exists \mu \in I | \ E''(\Delta) = \frac{-2}{9} \Delta^3 \ f^{IV}(\mu)$$

Após nova integração temos

$$E'(\Delta) = E'(0) + \int_0^\Delta E''(h)\,dh = \frac{-2}{9} \int_0^\Delta f^{IV}(\mu(h)h^3 dh$$

Pelo TVMI $\exists\ \Omega \in I |$

$$E'(\Delta) = \frac{-2}{9} f^{IV}(\Omega) \int_0^\Delta h^3 dh = \frac{-\Delta^4}{18} f^{IV}(\Omega)$$

Integrando agora $E'(\Delta)$ temos

$$E(\Delta) = E(0) + \int_0^\Delta E'(h)\,dh = \frac{-\Delta}{18} \int_0^\Delta f^{IV}(\Omega)h^4 dh$$

novamente pelo TVMI, $\exists\ \theta \in I \ |$

$$E(\Delta) = \frac{-\Delta^5}{90} f^{IV}(\theta)$$

Como não existe maneira simples de determinar θ, será util a inequação

$$|E(\Delta)| \leq \frac{+\Delta^5}{90} \max_{\theta \in I} \left| f^{IV}(\theta) \right|$$

<u>Exemplo 1</u>:

Mostre que o resultado obtido no ex-IV-2 tem a precisão esperada

res :

$$E = \int_0^1 e^x dx - \frac{0,5}{3} (1+4e^{0,5}+ e^1 \cong -0,00058$$

O erro máximo esperado era

$$\frac{(0,5)^5}{90} \max_{\theta \in [0,1]} \left| e^\theta \right| = \frac{e}{2880} \cong 0,00094$$

Continuando a analogia com o tratamento que damos a regra do Trapézio procuraremos escrever a regra de Simpson para o intervalo $[a,b]$ convenientemente sub-dividido.

Seja $I=[a,b]$,

$x_i = a+i\cdot\Delta,\quad i\in\{0,\dots,2n\}$, onde $\Delta=\frac{b-a}{2n}$

Para cada intervalo $[x_{2i}, x_{2i+2}]$, a regra de Simpson nos dá

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx = \frac{\Delta}{3}\quad f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2}) + E_i \quad \text{onde}$$

$$E_i = \frac{-\Delta^5}{90} f(\theta_i),\quad \theta_i\in[x_{2i}, x_{2x+2}]$$

Somando sobre i temos

$$\sum_{i=0}^{n}\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n}\frac{\Delta}{3}\,[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) +$$

$$+ f(x_{2i+2})] + \sum_{i=0} E_i$$

Vemos porém que o erro total,

$$|E_t| = \left|\sum_{i=0}^{n} E_i\right| \le \sum_{i=0}^{n} |E_i| =$$

$$= \sum_{i=0}^{n}\frac{\Delta^5}{90}\max_{\theta_i\in[x_{2i},x_{2i+2}]}\left|f^{IV}(\theta_i)\right| \le$$

$$\le \sum_{i=0}^{n}\frac{\Delta^5}{90}\max_{\theta\in I}\left|f^{IV}(\theta)\right| = \frac{n\Delta^5}{90}\max_{\theta\in I}\left|f^{IV}(\theta)\right| \le$$

Como $\Delta=(b-a)/2n$, temos também

$$|E_t| \le \frac{n(b-a)^5}{2880\, n^5}\max_{\theta\in I}\left|f^{IV}(\theta)\right| = \frac{(b-a)^5}{2880\, n^4}\max_{\theta\in I}\left|f^{IV}(\theta)\right|$$

<u>ex 2</u>

Dada a tabela ao aldo calcule $\int_0^1 e^x dx$ pela regra de Simpson, subdividindo o intervalo em duas partes.

Calcule o erro máximo cometido

i	x_i	e^{x_i}
0		1
1	0,25	1,2840254
2	0,5	1,6487213
3	0,75	2,117
4	1	2,718282

res:

$$I = \int_{x_o}^{x_{2n}} f(x)dx \cong \frac{\Delta}{3} \; [f(x_o) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_ó) +$$

$$+ \ldots + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})]$$

no caso presente

$$I = \frac{0,25}{3} \; [1+4\times 1,284025 + 2\times 1,648721 + 4\times 2,117 + 2,718282] = 1,7183187$$

O erro máximo esperado é

$$\frac{(1-0)^5}{2880 \; 4} \; e \; \cong \; 6\times 10^{-5}, \; e \quad E \cong 3,6 \times 10^{-5}$$

VII - EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

Frequentemente deparamo-nos com o problema de obter uma aproximação de um limite da forma

$$\lim_{\Delta\to 0} F(\Delta) = \alpha$$

A extrapolação de Richardson é um procedimento genérico para o cálculo aproximado de α quando $F(\Delta)$ puder ser colocado na forma

$$F(\Delta) = \alpha+\alpha_1\Delta+\alpha_2\Delta^2+\ldots+\alpha_n\Delta^n+ O(\Delta^{n+\Omega})$$

Isto é, existe uma constante K tal que, sendo o erro

$$E(\Delta) = F(\Delta) - (\alpha+\alpha_1\Delta+\ldots+\alpha_n\Delta^n),$$

temos

$$\lim_{\Delta\to 0} \left|\frac{E(\Delta)}{\Delta^{n+\Omega}}\right| \leq K$$

Para tanto basta que, por exemplo, $F(\Delta)$, seja C^{n+1} em I, pois existirá então a série de Taylor

$$F(\Delta) = F(0)+ \frac{F'(0)}{1!}\Delta + \ldots + \frac{F^{(n)}(0)}{n!}\Delta^n + R(\Delta^{n+1})$$

onde

$$R(\Delta^{n+1}) = \frac{F^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\Delta^{n+1}, \text{ para algum } \xi \in I$$

Se for possível, para um dado Δ, calcular $F(\Delta)$ e $F(\Delta/\lambda)$, $\lambda>1$, teremos

$$F(\frac{\Delta}{\lambda}) = \alpha+\lambda^{-1}\alpha_1\Delta+\lambda^{-2}\Delta^2\alpha_2+ \ldots +\lambda^{-n}\alpha_n\Delta^n+ O(\Delta^{n+\Omega})$$

e podemos eliminar o termo linear em pela subtração

$$\lambda F(\frac{\Delta}{\lambda}) -F(\Delta) = \alpha+(\lambda^{-1}-1)\alpha_2\Delta^2+ \ldots +(\lambda^{n-1}-1)\alpha_n\Delta^n + O(\Delta^{n+\Omega})$$

definamos pois

$$F_1(\Delta) = \lambda F(\Delta/\lambda) - F(\Delta) = \alpha+\beta_2\Delta^2+\beta_3\Delta^3+\ldots+\beta_n\Delta^n+ O(\Delta^{n+\Omega})$$

visando **eliminar** o termo quadratico em Δ, notamos que

$$F_1(\Delta/\lambda) = \alpha+\lambda^{-2}\beta_2\Delta^2+ \ldots +\lambda^{-n}\beta_n\Delta^n + O(\Delta^{n+\Omega}),$$

de modo que, definindo

$$F_2(\Delta) = [\lambda^2F_1(\Delta/\lambda) - F_1(\Delta)] / (\lambda^2-1)$$

temos que

$$F_2(\Delta) = \alpha + \gamma_3\Delta^3 + \gamma_4\Delta^4 + \dots + \gamma_n\Delta^n + O(\Delta^{n+\Omega})$$

Analogamente, definiremos

$$F_k(\Delta) = \lambda^k F_{k-1}(\Delta/\lambda) - F_{k-1}(\Delta) \quad / \ (\lambda^k - 1)$$

Verifica-se que

$$F_k(\Delta) = \alpha + \zeta_{k+1}\Delta^{k+1} + \zeta_{k+2}\Delta^{k+2} + \dots + \zeta_n\Delta^n + O(\Delta^{n+\Omega})$$

natualmente esperamos que, se $k > j$, $F_k(\Delta)$ converja mais rapidamente para α que $F_j(\Delta)$

exemplo 1

Usemos a ideia da extrapolação de Richardson para calcular e, sabendo que, por definição
$$e = \lim_{\Delta \to o} (1+\Delta)^{\Delta^{-2}}$$

Escolhendo $\lambda = 2$ e tomando inicialmente $\Delta = 1$, construimos a tabela

Δ	$F_o(\Delta)$	$F_1(\Delta)$	$F_2(\Delta)$	$F_3(\Delta)$	$F_4(\Delta)$
1	$2,\tilde{0}$	$2,\tilde{5}0$	$2,\tilde{6}771$	$2,71\tilde{3}7$	$2,7182^{\sim}$
1/2	$2,\tilde{2}5$	$2,\tilde{6}328$	$2,7\tilde{0}91$	$2,71\tilde{7}9$	
1/4	2,4414	$2,\tilde{6}900$	$2,71\tilde{6}8$		
1/8	$2,\tilde{5}657$	$2,71\tilde{0}1$			
1/16	$2,\tilde{6}379$				

onde

$$F_k(\Delta) = \frac{\lambda^{k-1} F_{k-1}(\frac{\Delta}{2}) - F_{k-1}(\Delta)}{\lambda^k - 1} \Longrightarrow \left[\begin{array}{l} F_1(\Delta) = 2F(\frac{\Delta}{2}) - F(\Delta) \\ F_2(\Delta) = \frac{1}{3}\ (4F_1(\frac{\Delta}{2}) - F_1(\Delta)) \\ F_3(\Delta) = \frac{1}{7}\ (8F_2(\frac{\Delta}{2}) - F_2(\Delta)) \\ \text{etc...} \end{array} \right.$$

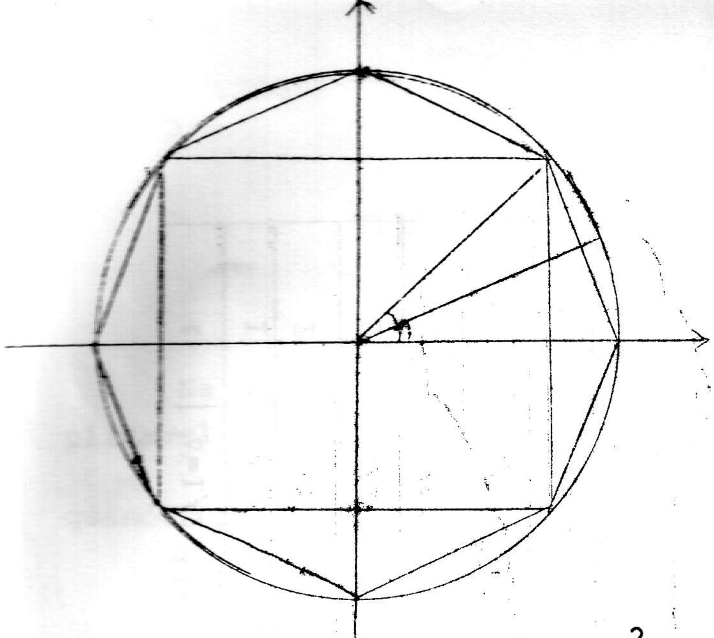
exemplo 2

Calculamos um valor aproximado de 2Π pelo algoritmo de Arquimedes, melhorando os resultados obtidos pela extrapolação de Richardson.

O algoritmo de **Arquimedes** consiste de obter 2Π pelo limite

$$2\Pi = \lim_{n \to \infty} Per(n)$$

onde $Per(n)$ é o **perímetro** do polígono regular de n lados **inscrito** no circulo unitário



Iniciemos com n= 4, o quadrado e a seguir duplicaremos sucessivamente o número de lados do poligono inscrito

Se definirmos $\Delta = 1/n$

e $F(\Delta) = \text{Per}(n)$

teremos $F(\Delta) = 2n\ \text{sen}(\Pi/n) = \frac{2}{\Delta}\ \text{sen}(\Delta\Pi)$

Lembrando a fórmula do arco-metade temos que

$$F\left(\frac{\Delta}{2}\right) = \frac{4}{\Delta}\sqrt{\frac{1}{2} - \sqrt{1-\text{sen}^2(\Delta\Pi)}\ /\ 2}$$

$\cos(\theta+\phi) = \cos\theta\ \cos\phi\ -\ \text{sen}\theta\ \ \text{sen}\phi \quad \Rightarrow$

$\cos(2\theta) = \cos^2\theta - \text{sen}^2\theta = 1-2\text{sen}^2\theta \quad \Rightarrow$

$\text{sen}^2\theta = (1-\cos 2\theta)\ /\ 2 = (1-\sqrt{1-\text{sen}^2 2\theta})\ /\ 2 \quad \Rightarrow$

$$\text{sen}\,\frac{\theta}{2} = \sqrt{(1-\sqrt{1-\text{sen}^2\theta})\ /\ 2} =$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2} - \sqrt{1-\text{sen}^2\theta}\ /2}$$

A tabela II ilustra o processo, que foi interrompido quando o número de algarismos significativos montados assim o exigiu

<u>exemplo 3</u>

Mostre que se $F(\Delta)$ puder ser escrito como uma série de potencias pares de ,

iē, $\quad F(\Delta) = \alpha+\alpha_2\Delta^2+\alpha_4\Delta^4 + \dots + \alpha_{2n}\Delta^{2n} + O(\Delta^{2n+\Omega})$,

e definindo

$$F_k(\Delta) = \frac{\lambda^{2k}F_{k-1}\left(\frac{\Delta}{2}\right) - F_{k-1}(\Delta)}{\lambda^{2k}-1}\ , \text{ temos}$$

$$F_k(\Delta) = \alpha+\zeta_{2(k+1)}\Delta^{2(k+1)}+\zeta_{(k+2)}\Delta^{2(k+2)} + \dots + \zeta_{2n}\Delta^{2n} + O(\Delta^{2n+\Omega})$$

ℓ	$\Delta=1/2^{\ell+2}$	sen $(\Delta\Pi)$	$F_o(\Delta) = Per(n)$	$F_1(\Delta)=2F_o(\frac{\Delta}{2})-F_o(\Delta)$	$F_2(\Delta)=\frac{4}{3}F_1(\frac{\Delta}{2})-\frac{1}{3}F_1(\Delta)$
1	1/4	$\sqrt{2}/2$	$\tilde{5},6568542$	$6,\tilde{5}890156$	$6,28\tilde{7}4555$
2	1/8	3,8268343 EE-1	$6,\tilde{1}229349$	$6,\tilde{3}628455$	$6,283\tilde{4}566$
3	1/16	9,8017140 EE-2	$6,2\tilde{7}30970$	$6,28\tilde{8}2276$	$6,28318\tilde{6}7$
4	1/64	4,9067674 EE-2	$6,28\tilde{0}6623$	$6,28\tilde{4}4469$	
5	1/128	2,4541229 EE-2	$6,28\tilde{2}5546$		
8	1/1024	3,0679472 EE-3	$6,2831\tilde{5}59$		
10	1/4096	7,6700717 EE-4	$6,283\tilde{3}227$		

$2\Pi = 6,2831853$

$F_3(\Delta)=\frac{8}{7}F_2(\frac{\Delta}{2})-\frac{1}{7}F_2(\Delta)$	$F_4(\Delta)=\frac{16}{15}F_3(\frac{1}{2})-\frac{1}{15}F_3(\Delta)$	$F_5(\Delta)=\frac{32}{31}F_4(\frac{\Delta}{2})-\frac{1}{31}F_4(\Delta)$
$6,28\tilde{2}8853$	$6,28318\tilde{4}6$	$6,283185\tilde{7}$
$6,2831\tilde{6}59$	$6,283185\tilde{7}$	
$6,28318\tilde{4}4$		

VIII - INTEGRAÇÃO PELO MÉTODO DE ROMBERG

Na aula VII estudamos a extrapolação de Richardson, processo am plicavel ao cálculo de um número $I= \lim_{\Delta \to 0} T(\Delta)$,

quando $T(\Delta)= I + \sum_{j=1}^{m} \alpha_j \Delta^j + O(\Delta^{m+\Omega})$

Seja agora

$$I= \int_a^b f(x)dx \ , \quad e$$

$$T(\Delta)= \left[\frac{1}{2} f(x_o) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_n)\right] \Delta \ ,$$

o cálculo de I pela regra do trapézio .

Mostraremos que se f é C^{2m} em $[a,b]$, $\Delta=(b-a)/n$, $x_o= a$, $x_i= x_o+ i\Delta$, então

$$T(\Delta)= I + \sum_{j=1}^{m} \alpha_{2j} \Delta^{2j} + O(\Delta^{2m+2})$$

Assim poderemos usar o resultado obtido no ex VII-3 para usar a extrapolação de Richardson com maior eficiência.

A este procedimento denominamos "Integração pelo método de Romberg"

Teorema: (Fórmula de Euler-maclaurin)

Sendo I e $T(\Delta)$ como anteriormente definidos para f(x), C^{2m} em [a,b], temos

$$T(\Delta)= I + \sum_{j=1}^{2m-2} C_{2j} \Delta^{2j} \left[f^{(2j-1)}(x)\right]_a^b + O(\Delta^{2m})$$

onde os coeficientes C_{2j} tem por função geratriz

$$\frac{\Delta}{2} \frac{e^{\Delta}+1}{e^{\Delta}-1} = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} C_{2j}\Delta^{2j}$$

Provemos inicialmente que $T(\Delta)$ admite uma expansão na forma (tomando $k = 2m$)

$$T(\Delta) = I + \sum_{j=0}^{k-2} C_{j+1}\Delta^{j+1}\left[f^{(j)}(x)\right]_a^b + O(\Delta^k)$$

Para tanto usaremos um conjunto de funções auxiliares, ϕ, C^k em $[0,1]$ e $\{g_i\}$, $i \in \mathbb{N}$, uma família definida pelas relações

a) $g_o(\mu) = 1$

b) $g'_{i+1}(\mu) = g_i(\mu)$

c) $\int_o^1 g_i(\mu) = 0$, $i > 0$

de a) temos que

$$\int_o^1 \phi(\mu)d\mu = \int_o^1 \phi(\mu)g_o(\mu)d\mu =$$

integrando por partes

$$= \left[\phi(\mu)g_1(\mu)\right]_0^1 - \int_o^1 \phi'(\mu)g_1(\mu)d\mu =$$

$$= \left[\phi(\mu)g_1(\mu) - \phi'(\mu)g_2(\mu)\right]_o^1 + \int_o^1 \phi''(\mu)g_2(\mu)d\mu = \ldots$$

$$= \left[\sum_{j=0}^{k-1} (-1)^i \phi^{(i)}(\mu)g_{i+1}(\mu)\right]_0^1 + (-1)^k \int_o^1 \phi^{(k)}(\mu)g_k(\mu)d\mu$$

das relações a) b) e c) temos que

$g_1(\mu) = \mu - \frac{1}{2}$ => $\cancel{g_1}(1) = -g_1(0) = \frac{1}{2}$ e, por simetria,

$g_\ell(1) = g_\ell(0)$ p/ $\ell \geq 2$.

Fazendo $C_\ell = (-1)^\ell g_\ell(0)$ temos

$$\int_o^1 \phi(\mu)d\mu = \frac{1}{2}(\phi(0) + \phi(1)) + \sum_{j=1}^{k-1} (-1)^j \Big[\phi^{(j)}(1)\ (-1)^{j+1}C_{j+1} -$$

$$- \phi^{(j)}(0)\ (-1)^{j+1} C_{j+1} \Big]_+ + (-1)^k \int_0^1 \phi^{(k)}(\mu) g_k(\mu)\, d\mu =$$

$$= \frac{1}{2} (\phi(0)+\phi(1)) - \sum_{j=1}^{k-1} C_{j+1} (\phi^{(j)}(1) - \phi^{(j)}(0)) +$$

$$+ (-1)^k \int_0^1 \phi^{(k)}(\mu) g_k(\mu)\, d\mu$$

Façamos agora

$\phi(\mu) = f(x)$, onde $x = x_{i-1} + \Delta\mu$ donde $\phi^{(j)}(u) = \Delta^j f^{(j)}(x)$ e $dx = \Delta d\mu$

e teremos

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx = \Delta \int_0^1 \phi(\mu)\,d\mu = \frac{\Delta}{2} (\phi(0)+\phi(1)) + -\Delta \sum_{j=1}^{k-1} C_{j+1} \Delta^j \Big[f^{(j)}(x) \Big]_{x_{i-1}}^{x_i} +$$

$$+ (-1)^k \Delta \int_{x_{i-1}}^{x_i} \Delta^k f^{(k)}(x) \frac{dx}{\Delta} = \frac{\Delta}{2} (f(x_{i-1}) + f(x_i)) -$$

$$\sum_{j=1}^{k-2} C_{j+1} \Delta^{j+1} \Big[f^{(j)}(x) \Big]_{x_{i-1}}^{x_i} + R_i ,$$

onde

$$R_i = C_k \Delta^k \Big[f^{(k-1)}(x) \Big]_{x_{i-1}}^{x_i} + \Delta^k \int_{x_{i-1}}^{x_i} 1 f^{(k)}(x)\,dx =$$

pelos TVM e TVMI

$$= \Delta^{k+1} \Big[C_k f^k(\xi) + f^k(\zeta) \Big]$$ para algum par $\xi, \zeta \in [x_i - , x_i]$

portanto

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx = \frac{\Delta}{2} (f(x_{i-1}) + f(x_i)) - \sum_{j=1}^{k-2} C_{j+1} \Delta^{j+1} \Big[f^{(j)}(x) \Big]_{x_{i-1}}^{x_i} +$$

$$+ O(\Delta^{k+1})$$

Somando a última igualdade para

$i = 1 \ldots n$ temos finalmente

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

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\Delta}{2} (f(x_{i-1}) + f(x_i)) - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{k=2} C_{j+1}\Delta^{j+1} \left[f^{(j)}(x) \right]_{x_{i-1}}^{x_i} +$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} R_i = T(\Delta) - \sum_{j=1}^{k=2} C_{j+1}\Delta^{j+1} \left[f^j(x) \right]_a^b + \sum_{i=1}^{n} R_i$$

mas $\sum_{i=1}^{n} R_i = n\, O(\Delta^{k+1}) = \frac{(b-a)}{\Delta} O(\Delta^{k+1}) = O(\Delta^k)$

donde

$$T(\Delta) = \int_a^b f(x)dx + \sum_{j=1}^{k-2} C_{j+1}\Delta^{j+1} \left[f^j(x) \right]_a^b + O(\Delta^k)$$

Provemos agora que as constantes C_j, são nulos para j impar, e que tem a função geratriz do enunciado do teorema.

Para tanto basta tomar $f(x) = e^x$, a=0 e b=1. Na última igualdade

$$T(\Delta) = (e-1) + \sum_{j=1}^{k-2} C_{j+1}\Delta^{j+1} (e-1) + O(\Delta^k)$$

por outro lado $T(\Delta)$ é, por definição

$$T(\Delta) = \Delta \left[\frac{1}{2} e^0 + \sum_{i=1}^{n-1} e^{i\Delta} + \frac{1}{2} e^1 \right] = \Delta \left[-\frac{1}{2} + \sum_{i=0}^{n-1} e^{i\Delta} + \frac{1}{2} e \right] =$$

$$= \Delta \left(\frac{e^{n\Delta} - 1}{e^{\Delta} - 1} + \frac{e-1}{2} \right) = \frac{\Delta}{2} \frac{(e-1)(e^{\Delta}+1)}{(e^{\Delta}-1)}$$

igualando as duas expressões de $T(\Delta)$, temos

$$\frac{\Delta}{2} \frac{(e^{\Delta}+1)}{(e^{\Delta}-1)} (e-1) = (e-1) + \sum_{j=1}^{k-2} C_{j+1}\Delta^{j+1} (e-1) + O(\Delta^k)$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta}{2} \frac{e^{\Delta}+1}{e^{\Delta}-1} = 1 + \sum_{j=1}^{k-2} C_{j+1}\Delta^{j+1} + O(\Delta^k)$$

notando que $\frac{\Delta}{2} \frac{e^{\Delta}+1}{e^{\Delta}-1} = \frac{\Delta}{2} \frac{e^{\Delta/2} + e^{-\Delta/2}}{e^{\Delta/2} - e^{-\Delta/2}}$ é

uma função par, concluimos que os coeficientes C_j p/ j impar, que não coeficientes de funções impares, não nulos.

No limite de $k \to \infty$ temos então

$$\frac{\Delta}{2} \frac{e^{\Delta}+1}{e^{\Delta}-1} = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} C_{2j} \Delta^{2j}$$

Q.E.D.

Exemplo 1:

Encontre a espressão analítica da integração de Ramberg de uma função f(x) integrada em x_o, x_2 dada em

$$f(x_o) = f_o, \quad f(x_1) = f_1, \quad f(x_2) = f_2, \quad x_1 = \frac{x_o + x_2}{2}$$

res:

Fazendo $\Delta = [x_2 - x_o]$ conhecemos

$$T(\Delta) = \Delta\left(\frac{1}{2} f_o + \frac{1}{2} f_2\right) = \frac{\Delta}{2} (f_o + f_2)$$

$$T\left(\frac{\Delta}{2}\right) = \frac{\Delta}{2}\left(\frac{1}{2} f_o + f_1 + \frac{1}{2} f_2\right) = \frac{\Delta}{4} (f_o + 2f_1 + f_2)$$

do ex VII-3 sabemos que definindo

$$T_q(\Delta) = \left[\lambda^{2q}\, T_{q-1}\left(\frac{\Delta}{\lambda}\right) - T_{q-1}(\Delta)\right] / (\lambda^{2q} - 1)$$

temos $T_q(\Delta) = I + O(\Delta^{2q+2})$

Fazendo $\lambda = 2$ temos

$$T_q(\Delta) = \left[4^q\, T_{q-1}\left(\frac{\Delta}{2}\right) - T_{q-1}(\Delta)\right] / (4^q - 1)$$

e podemos calcular

$$T_1(\Delta) = \frac{1}{3}\left[4\,\frac{\Delta}{4}(f_o + 2f_1 + f_2) - \frac{\Delta}{2}(f_o + f_2)\right] \Rightarrow$$

$$T_1(\Delta) = \frac{\Delta/2}{3}\left[f_o + 4f_1 + f_2\right] + O(\Delta^4)$$

Reconhecemos $T_1(\Delta)$ como a regra de Simpson!!

Exemplo 2: Calcule $\int_0^1 e^x dx$ pelo método de Romberg, usando inicial$= 1$, $\lambda = 2$ e usando nos cálculos 7 algarismos significativos

res: a tabela abaixo ilustra o método

Δ	$T(\Delta)$	$T_1(\Delta) = \frac{1}{3}\left(4T(\frac{\Delta}{2}) - T(\Delta)\right)$	$T_2(\Delta) = \frac{1}{15}\left(16T_1(\frac{\Delta}{2}) - T_1(\Delta)\right)$	$T_3(\Delta) = \frac{1}{63}\left(64T_2(\frac{\Delta}{2}) - T_2(\Delta)\right)$
1	$1,\tilde{8}591409$	$1,718\tilde{8}612$	$1,71828\tilde{2}6$	$1,718281\tilde{9}$
1/2	$1,7\tilde{5}39311$	$1,718\tilde{3}188$	$1,718281\tilde{9}$	
1/4	$1,7\tilde{2}72219$	$1,71828\tilde{4}2$		
1/8	$1,7\tilde{2}05186$			

IX Os números de Bernoulli e outras aplicações da fórmula de maclsurin.

Definimos os números de Bernoulli, B_n $n \in N$, pela função geratriz

$$\frac{x}{e^x-1} = \sum_{i=o}^{\infty} (B_i\; x^i/i!)$$

Lembrando que

$$e^x = 1 + \sum_{i=1} (x^i/i!), \text{ temos}$$

$$\frac{e^x-1}{x} = \frac{1+\sum_{i=o} (x^i/i!) - 1}{x} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{x^{(i-1)}}{i!}$$

multiplicando a **última** e a penúltima igualdade temos que

$$1 = \sum_{i=o}^{\infty} \frac{B_i x^i}{i!} \sum_{i=o}^{\infty} \frac{x^i}{(i+1)!} = B_o +$$

$$+ x^1 \left(\frac{B_o}{o!}\frac{1}{2!} + \frac{B_1}{1!}\frac{1}{1!}\right) + x^2\left(\frac{B_o}{o!}\frac{1}{3!} + \frac{B_1}{1!}\frac{1}{2!} + \frac{B_2}{2!}\frac{1}{1!}\right) +$$

$$\ldots + x^n \left(\frac{B_0}{0!}\frac{1}{(n+1)!} + \frac{B_1}{1!}\frac{1}{n!} + \ldots + \frac{B_{n-1}}{(n-1)!}\frac{1}{2!} + \frac{B_n}{n!}\frac{1}{1!}\right) + \ldots$$

devemos ter $B_o=1$ e todos os coeficientes das potências não nulos de x iguais a zero.

Assim

$$B_o=1 \quad e \quad \sum_{i=o}^{n} \frac{B_i}{i!}\frac{1}{(n-i+1)!} = 0$$

multiplicando a última igualdade por $(n+1)!$ temos

$$0 = \sum_{i=o}^{n} \frac{(n+1)!}{(n+1-i)!\,i!} B_i = \left[\sum_{i=1}^{n} \binom{n+1}{i} B_i\right] + 1$$

donde podemos determinar os números B_i.

Por exemplo

$B_o=1$

$$1 + \binom{2}{1} B_1 = 1 + 2\,B_1 = 0 \Longrightarrow B_1 = -1/2$$

$$1 + \binom{3}{1} B_1 + \binom{3}{2} B_2 = 1 + 3\,\frac{-1}{2} + 3\,B_2 = 0 \Longrightarrow B_2 = 1/6$$

e assim, sucessivamente obtemos

$B_3=0$, $B_4 = -1/30$, $B_5 = 0$, $B_6 = 1/42$ ...

$B_8 = -1/30$, $B_{10} = 5/66$, $B_{12} = -691/2730, \ldots$

Provemos que de modo geral B_{2i+1}, $i \in N^*$ é igual a zero.

Por expressão da função geratriz

$$\frac{x}{e^x-1} = \sum_{i=o}^{\infty} \frac{x^i}{i!} B_i = 1 + (-\frac{1}{2}) + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{x^i}{i!} B_i, \text{ e}$$

$$\frac{x}{e^x-1} + \frac{x}{2} = \frac{x}{2}\frac{e^x+1}{e^x-1} = 1 + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{B_i}{i!} x^i = 1 + \sum_{i=2}^{\infty} C_i x^i$$

na página VIII-6 provamos que as constantes $C_i = B_i/i!$ se anulam para $i > 1$ e ímpar

Podemos também expressar agora a fórmula de maclaurin em termos dos números de Bernoulli.

$$\int_a^b f(x)\, dx = T(\Delta) - \sum_{i=1}^{k-2} \frac{B_{2i}}{(2i)!} \Delta^{2i} \left[f^{(2i-1)}(x) \right]_a^b + O(\Delta^{2k}).$$

Este resultado pode ser usado para melhorar um cálculo de uma integral se conhecermos o valor das derivadas do integrando nos extremos de integração.

exemplo 1

Se um valor aproximado para $I = \int_0^{\pi} f(x)\, dx$ para $f(x)$ conforme

a tabela do ex.II-1

$$T(\Delta) = \pi(\frac{1}{20} + \frac{1}{20}) = 0$$

$$I \sim T(\Delta) + \frac{B_2}{2!} \pi^2 (1-(-1)) \cong 1,65$$

exemplo 2

Deduza a fórmula de Stirling

$$\ell n\,(M!) \sim \frac{1}{2} \ell n\, 2\pi + (M+\frac{1}{2}) \ell n\, N - M + \sum_{i=1}^{k} \frac{B_{2i}B_{2i}}{2i(2i-1)} M^{-2i+1}$$

Deduziremos a fórmula de Stirling aplicando a fórmula de maclaurin ao cálculo de

$$\int_m^n \ell n\ x\ dx\ ,\quad m,n \in N^*,\ n > m$$

e tomando $\Delta = 1$

$$\int_m^n \ell n\ x\ dx = \Big[x\ell n x - x\Big]_m^n = n\ell n - n + n + -m\ell nm + m \qquad \text{(a)}$$

$$T(1) = 1\ \left(\frac{1}{2}\ \ell nm + \sum_{i=m+1}^{n-1} \ell n\ i + \ell n\ n\right) =$$

$$= \sum_{i=m+1}^{n} \ell n\ i + \frac{1}{2}\ (\ell nm - \ell nn)\ ; \quad \text{mas}$$

$$\sum_{i=m+1}^{n} \ell n\ i = \ell n \prod_{i=m+1}^{n} i = \ell n\ \frac{n!}{m!} = \ell n\ (n!) - \ell n\ (m!)$$

e $T(1) = \ell n\ (n!) - \ell n\ (m!) + \frac{1}{2}\ (\ell n\ m - \ell n\ n)$ (b)

A fórmula de maclaurin nos diz que

$$T(\Delta) = I - \sum_{i=1}^{k} \frac{B_{2i}}{(2i)!}\ \Delta^{2i} \Big[f^{(2i-1)}(x)\Big]_m^n \qquad \text{(c)}$$

mas

$$\ell n^{(j)}(x) = (j-1)!\ x^{-j},\quad j \geq 1$$

ou

$$\ell n^{(2i-1)}(x) = (2i-2)!\ x^{(-2i+1)},\quad \text{donde}$$

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{B_{2i}}{(2i)!} \Big[\ell n^{(2i-1)}(x)\Big]_m^n \quad \sum_{i=1}^{k} \frac{B_{2i}}{2i(2i-1)} \Big[x^{-2i+1}\Big]_m^n \qquad \text{(d)}$$

Substituindo (a), (b) e (d) em (c) vem

$$\ell n\ (m!) = \{\ \ell n(n!) - (n+\frac{1}{2})\ \ell n\ (n) + n + O(n^{-1})\ \} +$$

$$+ \left(\frac{1}{2} + m\right)\ \ell n\ (m) - m + \sum_{i=1}^{k} \frac{B_{2i}}{2i(2i-1)}\ m^{-2i+1} + O(m^{-2k-1})\ .$$

Para chegar a forma final da fórmula de Stirling basta tomar o limite $n \to \infty$ e usar que

$$\lim_{n\to\infty} \{ \ell n(n!) - (n+\tfrac{1}{2}) \ \ell n \ n + n\} = \frac{1}{2} \ \ell n \ 2\pi$$

Assim

$$\ell n \ (m!) \sim \frac{1}{2} \ \ell n \ 2\pi + (m+\tfrac{1}{2}) \ \ell n \ m - m + (1/12) \ m^{-1} +$$

$$- (1/360) \ m^{-3} + (1/1260) \ m^{-5} - (1/1680) \ m^{-7} + \ldots$$

exemplo 3

A tabela ao lado das aproximações de $5! = 120$ a partir da fórmula de Sterling.

k	m ! ~
0	118,01917
1	120,00264
2	119, 99997
3	120,06000

X DERIVAÇÃO

Estudaremos nesta aula como obter numericamente a derivada de uma função, $f(x)$, tabelada por pontos x_i $(i \in \{0,\ldots,n\})$.

Uma abordagem possível para o problema e aproximarmos o valor da derivada de $f(x)$, $f'(x)$, pela derivada de $P(x)$, $P'(x)$, onde $P(K)$ é o polinômio interpolador de Lagrange para os pontos $\{x_k,\ldots x_e\}$.

Da aula I sabemos que, sendo f C^{n+2} em $[x_o,x_n]$

$f(x) = P(x) + E(x)$, onde

$$P(x) = \sum_{i=o}^{n} f_i\, L_i\,(x) \quad \text{e}$$

$$E(x) = \left(\prod_{j=o}^{n} (x-x_j)\right) f^{(n+1)}\,(\xi(x))/(n+1)!$$

$$\xi\colon [x_o,x_n] \to [x_o,x_n]$$

Podemos pois escrever

$f'(x) = P'(x) + \epsilon\,(x)$ onde

$$\epsilon\,(x) = E'(x) = \left[\sum_{\ell=o}^{n} \prod_{\substack{j=o\\ j\neq\ell}}^{n} (x-x_j)\, f^{(n+1)}(\xi(x)) + \right.$$

$$\left. + \prod_{j=o}^{n} (x-x_j)\, f^{(n+2)}(\xi(x))\ \xi'(x)\right] /(n+1)!\ .$$

É especial interesse o cálculo da derivada de f em um dos pontos x_i neste caso, na última igualdade, os termos da somatória se anulam se $\ell\neq j$ e o termo fora da somatória também se anula (desde que existe $\xi'(x)$).

Nestas condições

$$f'(x_i) = P'(x_i) + \left[\prod_{\substack{j=o\\ j\neq i}}^{n} (x_i-x_j)\right] f^{(n+1)}(\ (x_i))/n+1)!$$

Restringindo-nos ao caso de pontos igualmente espaçados, isto é, tais que

$x_j = x_o + jh$, temos

max

$$f'(x_i) = P'(x_i) + h^n (-1)^{n-i} f^{(n+1)}(\xi(x_i)) / \left(\frac{(n+1)}{(n-i)!i!}\right)$$

erro

e

$$P(x) = \sum_{\ell=o}^{n} f_\ell L_\ell(x), \text{ onde}$$

$$L_\ell(x) = \prod_{\substack{j=o\\ j\neq\ell}}^{n} \frac{x-x_j}{x_\ell - x_j} = \frac{1}{h^n} \frac{(-1)^{n-\ell}}{\ell!(n-\ )!} \prod_{\substack{j=o\\ j\neq\ell}}^{n} (x-x_j)$$

exemplo 1

Determine as aproximações $f'(x_i)$ onde x_i é ponto se $[x_o, x_n]$ para $n=1$ e $n=2$.

Considere os pontos igualmente espaçados e a função $f(x)$ suficientemente diferenciável.

Para $n=1$ temos

$$P(x) = \sum_{\ell=o}^{1} f_\ell \frac{1}{h} \frac{(-1)^{1-\ell}}{\ell!(1-\ell)!} \prod_{\substack{j=o\\ j\neq\ell}}^{1} (x-x_j) =$$

$$= \frac{1}{h}(-f_o(x-x_1) + f_1(x-x_o)), \text{ portanto}$$

$$P'(x) = \frac{1}{h}(-f_o+f_1) = (f_1-f_o)/h \quad \text{e}$$

$$P'(x_o) = P'(x_1) = (f_1-f_o)/h \ .$$

Para $n=2$ temos

$$P(x) \sum_{\ell=o}^{2} \frac{1}{h^2} \frac{(-1)^{2-\ell}}{\ell!(2-\ell)!} f_\ell \prod_{\substack{j=o\\ j\neq\ell}}^{n} (x-x_j) =$$

$$= \frac{1}{h^2}\left(\frac{1}{2} f_o(x-x_1)(x-x_2) + - f_1(x-x_o)(x-x_2) + \frac{1}{2}(x-x_o)(x-x_1)\right)$$

donde

$$P'(x) = \frac{1}{2h^2}(f_o((x-x_2)+(x-x_1)) - 2f_1 (x-x_2)+(x-x_o))+f_2(x-x_1) + +(x-x_o))) .$$

Fazendo $x = x_o, x_1, x_2$, temos respectivamente

$$P'(x_o) = \frac{1}{2h^2}(f_o(-2h-h)-2 f_1(-2h+o) + f_2(-h+o)) =$$

$$= \frac{1}{2h^2} (-3f_o+4f_1-f_2)$$

$$P'(x_1) = \frac{1}{2h^2} (f_o(-h+o) - 2f_1(h-h) + f_2(o+h)) = \frac{1}{2h} (f_2-f_o)$$

$$P'(x_2) = \frac{1}{2h^2} (f_o-4f_1+3f_2)$$

exemplo 2

Determine limites de erro para o uso das fórmulas obtidas no exemplo 1 como aproximações das derivadas de f(x)

no caso n=1 temos,

fazendo $K = \max\limits_{\gamma\in[x_o x_2]} \left| f^{(2)}((\gamma)) \right|$

$$\left|\epsilon(x)\right| \leq h^1 K/ \frac{2!}{!1!} = h\ K/2$$

no caso n=2 temos,

fazendo $M = \max\limits_{\gamma\in[x_o x_2]} \left| f'''(\gamma) \right|$

$\epsilon(x) \leq h^n \cdot K / \frac{(n+1)!}{(n-i)!\, i!}$

para i=0 ou 2

$$\left|\epsilon(x)\right| \leq h^2 M/ \frac{3!}{0!2!} = h^2 M/3$$

e para i=1

$$\left|\epsilon(x)\right| \leq h^2 M/ \frac{3!}{1!1!} = h^2 M/6$$

Uma outra abordagem possível para obter fórmulas de derivação é o de combinar expansão em série de Taylor em torno de um ponto x_i.

Assim

a) $f(x_i+h) = f(x_i) + f'(x_i)\ h + \frac{1}{2} f''(x_i)\ h^2 +$

$+ \frac{1}{6} f'''(x_i)\ h^3 + \frac{1}{24} f^{IV}(x_i)\ h^4 + \ldots$

b) $f(x_i-h) = f(x_1) - f'(x_i)\ h + \frac{1}{2} f''(x_i)\ h^2 +$

$- \frac{1}{6} f'''(x_i)\ h^3 + \frac{1}{24} f^{IV}(x_i)\ h^4 + \ldots$

de $(a+-b)/2h$ temos

$$\frac{f(x_i+h)-f(x_i-h)}{2h} = f'(x_i) + \frac{f'''(x_i)}{6} h^3 + \ldots$$

ou

$$f_i' \sim (f_{i+1}-f_{i+1}-f_{i-1})/2h \quad e \quad \epsilon \sim \frac{1}{6} h^3 f'''(\gamma)$$

o que já havíamos obtidos por interpolação de tomarmos agora que

c) $$f_{i+2} = f_i + 2f_i h + 2f_i'' h^2 + \frac{4}{3} f_i''' h^3 + \\ + \frac{2}{3} f_i^{IV} h^4 + \ldots$$

d) $$f_{i+3} = f_i + 3f_i' h + \frac{a}{2} f_i'' h^2 + \frac{a}{2} f_i''' h^3 + \\ + \frac{27}{8} f_i^{IV} h^4 + \ldots$$

obtemos:

de $18a - 9c + 2d - 66 f_i$

$$f_i' = \frac{1}{6h} (-11 f_i + 18 f_{i+1} - 9 f_{i+2} + 2 f_{i+3}) + \\ - h^3 f_i^{IV}/4 + \ldots$$

de $6a + -2b - c - 36 f_i$

$$f_i' = \frac{1}{6h} (-2f_{i-1} - 3f_i + 6f_{i-1} - f_{i+2}) + h^3 f_i^{IV} 6/12 + \ldots$$

A tabela abaixo lista este tipo de fórmula de n=1 ate n=4

n	$f'(x_i) = f_i' \sim$	$E(x_i) \sim$
1	$(f_{i+1}-f_i)/h$ $(f_i - f_{i-1})/h$	$\frac{h}{2} f''(\gamma)$
2	$(-3f_i+4f_{i+1}-f_{i+2})/2h$ $(3f_i-4f_{i-1}+f_{i-2})/2h$ $(f_{i+1}-f_{i-1}/2h$	$\frac{h^2}{3} f'''(\gamma)$ $\frac{h^2}{6} f'''(\gamma)$
3	$(-11f_i+18f_{i+1}-9f_{i+2}+2f_{i+3})/6h$ $(+11f_i-18f_{i-1}+9f_{i-2}-2f_{i-3})/6h$ $(-2f_{i-1}-3f_i+6f_{i+1}-f_{i+2})/6h$ $(2f_{i+1}+3f_i-6f_{i-1}+f_{i-2})/6h$	$\frac{h^3}{4} f^{IV}(\gamma)$ $\frac{h^3}{12} F^{IV}(\gamma)$
4	$(-25f_i+48f_{i+1}-36f_{i+2}+16f_{i+3}-3f_{i+4})/12h$ $(25f_i-48f_{i+1}+36f_{i-2}-16f_{i-3}+3f_{i-4})/12h$ $(-3f_{i-1}-10f_i+18f_{i+1}-6f_{i+2}+f_{i+3})/12h$ $(-3f_{i-1}+10f_i-18f_{i+1}+6f_{i+2}-f_{i+3})/12h$ $(f_{i-2}-8f_{i-1}+8f_{i+1}-f_{i+2})/12h$	$\frac{h^4}{5} f^{V}(\gamma)$ $\frac{h^4}{20} f^{V}(\gamma)$ $\frac{14}{30} f^{V}(\gamma)$

XI - O MÉTODO DE EULER

Uma equação que nos forneça o valor da k-ésima derivada de uma função $y(x)$, $y^{(k)}(x)$, em função do seu argumento, x, e do valor da função e de sua 1ª até (k-1)-ésima derivadas no ponto x será dita uma equação diferencial ordenaria (EDO) de ordem k

$$y^{(k)}_{(x)} = f(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(k-1)}_{(x)})$$

definida num certo intervalo $[a,b]$. Uma função $y(x)$ der-se-á solução da E.D.O. se esta for obedecida para $\forall\, x \in [a,b]$.

A E.D.O. der-se-á linear sse a função f for linear em $y, y', \ldots y^{k-1}$.

Uma E.D.O. da forma

$$y^{(k)} + \alpha_{k-1}\, y^{(k-1)} + \ldots + \alpha_1\, y' + \alpha_0\, y = g(x)$$

é obviamente linear e é denominada equação o coeficientes constantes. Se, em particular $g(x) = 0$ e EDO será dita homogênea e, caso contrário, inhomogenea.

Em geral a solução de uma E.D.O. não é única de modo que para especificar a solução de interesse devemos impor algumas condições adicionais sobre $y(x)$.

Se estas condições forem dadas como o valor de y de suas derivadas no extremo a, i.é.

$$y(a) = \beta_0,\; y'(a) = \beta_1, \ldots\; y^{\ell}(a) = \beta_\ell,$$

a solução da E.D.O. é um "Problema de condições iniciais; caso contrário teremos um "Problema de Condições de Contrário".

Estudemos primeiramente o problema de condições iniciais para uma EDO de 1ª ordem, i.é.

$$y'(x) = f(x, y(x)),\; x \in [a,b],\; y(a) = \zeta$$

Supondo que a solução* é suficientemente derivavel podemos escrever:

---

* Teorema:

Se $f(x,y)$ este definida no dominio $D = [a,b] \times R$ e é contínua e Lipschitziana em y, i.é.

$$\exists\; K \in R \mid |f(x,y) - f(x,z)| \le K|(y-z)|,$$
$$\forall\, x \in [a,b],\; \forall\, y\, y \in R$$

então a E.D.O. $y' = f(x,y)$ e a condição inicial $y(a) = \zeta$ definem uma e uma única solução.

$$y(x+h) = y(x) + h\, y'(x) + \frac{h^2}{2!} y''(x) + \dots$$

$$\dots + \frac{h^k}{k!} y^{(k)}(x) + O(h^{k+1})$$

mas $y'(x) = f(x,y(x))$ e, admitindo ser $f(x,y)$ suficientemente derivavel

$$y''(x) = \frac{d}{dx} f(x,y), \dots\ y^j(x) = \frac{d^{j-1}f}{dx^{j-1}} (x,y)$$

donde

$$y(x+h) = y(x) + hf(x,y(x)) + \frac{1}{2} h^2 \frac{df}{dx} (x,y(x)) +$$

$$\dots + \frac{1}{k!} h^k \frac{d^{k-1}f}{dx^{k-1}} (x,y(x)) + O(h^{k+1}) =$$

$$= y(x) + h \left(\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j!} h^{j-1} \frac{d^{j-1}f}{dx^{j-1}} (x,y(x)) \right) + O(h^{k+1})$$

tomando

$$T_k\ (x,y) = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j!} h^{j-1} \frac{d^{j-1}f}{dx^{j-1}} (x,y)$$

temos

$$y(x+h) = y(x) + h\, T_k\ (x,y(x)) + O(h^{k+1})$$

Definimos pois os métodos de Taylor de ordem k como sendo, fazendo

$$x_i = x_o + i\, k,\ 0 \le i \le n \qquad x_o = a \ \text{ e } \ x_n = b$$

a aproximação

$$y_{i+1} = \left[y_i + h\, T_k\ (x_i,y_i) \right] \sim y(x_{i+1})$$

onde

$$y_o = y(x_o) = \zeta.$$

Se em particular tomamos o método de ordem 1

e

$$y_{i+1} = y_i + h\, f(x_i,y_i),\ y_o = y(x_o)$$

a que damos o nome de método de Euler.

exemplo 1:

Ache a solução analitica e os algoritmos de Taylor de ordem 1 e 2 para a solução da EDO

$$y' = \gamma\, y, \text{ definida em } [0,1]$$

com a condição inicial $y(0) = M$.

Estude numericamente os resultados dos métodos para $M=1$ e $\gamma = 1/2$, 1 e 2 e $h = 1$, 1/2 e 1/4 resolução vê-se que $y = e^{\gamma x + \ell n M}$ é a solução procurada.

Tem-se $f(x,y) = \gamma\ y$ e

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f = 0 + \gamma\gamma\ y = \gamma^2\ y$$

Os algoritmos são pois

$y_o = y(0)$ e

$y_o(1+h\gamma)^i = y_i$

para h=1

$$y_{i+1} = y_i + h\ \gamma\ y_i = (1+h\gamma)\ y_i = (1+h\gamma)^{i+1}\ y_o$$

para k=2

$$y_{i+1} = y_i + h\gamma\ y_i + \frac{1}{2} h^2\ \gamma^2\ y_i = (1+h\gamma + \frac{1}{2} h^2\ \gamma^2)^{i+1}\ y_o$$

a tabela ilustra os resultados numéricos para

γ	h	y_1	y_2	y_3	y_4
$\frac{1}{2}$	1	1,5 (1,625	-	-	$e^{\frac{1}{2}}$ = 1,6487
	$\frac{1}{2}$	1,25 (1,2813)	1,5625 (1,6400)	-	-
	$\frac{1}{4}$	1,125 (1,1328)	1,2656	1,4238	1,6018 (1,6468)
1	1	2,0 (2,5)	-	-	e^1 = 2,7183
	$\frac{1}{2}$	1,5 (1,625)	2,25 (2,6406)	-	-
	$\frac{1}{4}$	1,25 (1,2813)	1,5625	1,9531	2,4414 (2,6949)
2	1	3 (5)	-	-	e^2 = 7,3890
	$\frac{1}{2}$	2 (2,5)	4 (6,25)	-	-
	$\frac{1}{4}$	1,5 (1,625	2,25	3,375	5,0625 (6,9729

XV - EQUAÇÕES DE DIFERÊNÇAS FINITAS

E D F

A teoria de EDF é um largo campo dentro da matemática. Assim como fizemos com as E D O, faremos aqui uma rápida reunião de nomenclatura e de alguns fatos essênciais.

Definimos os seguintes operadores

(1) O operador de translação E, por

$$Ef(x) = f(x+h)$$

(2) O operador de diferença

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x) = [E-1]f(x)$$

a agir sobre uma função f(x) dados um "passo"h.

O operador de diferença está intimamente ligado ao operador de derivação, D, pela relação

$$Df(x) = \lim_{h\to 0} \frac{\Delta f(x)}{h}$$

Definimos recursivamente

$$E^k f(x) = E(E^{k-1} f(x)) = f(x+kh)$$

e $$\Delta^k f(x) = [E-1]^k f(x)$$

assim, por exemplo

$$\Delta^2 f(x) = [E^2 - 2E + 1] f(x) = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)$$

Para a função identidade, f(x) = x, temos

$$Ex = x+h \quad , \qquad E^k x = x+kh$$

$$\Delta x = h \quad , \qquad \Delta^k x = 0 \quad p/ \quad k \geq 2 \quad .$$

Podemos ver que valem as relações

$$D^k f(x) = \lim_{h\to 0} [\Delta^k f(x)]/h^k$$

Definimos ainda o operador **diferênçial**

df(x) = hDf(x), de modo que

$$\frac{df}{dx} = \frac{hDf(x)}{h} = Df(x)$$

analogamente

$$\frac{d^k f}{(dx)^k} = D^k f(x)$$

Valem as seguintes propriedades,

a) $D(\alpha f+\beta g)= \alpha Df+\beta Dg$	a') $\Delta(\alpha f+\beta g)= \alpha\Delta f+\beta\Delta g$
b) $D(f.g)= fDg+gDf$	b') $\Delta(f.g)= f\Delta g+g\Delta f+\Delta f\Delta g$

$\alpha,\ \beta\in R$, $f g C^1$ em R

Seja $y(x_i)$ definida em $x_i= x_o+ih$, i N

Denominamos EDF de ordem k a uma equação da forma

$$\frac{\Delta^k y}{(\Delta x)^k} = G(x, y(x), \frac{\Delta y}{\Delta x}, \ldots, \frac{\Delta^{k-1} y}{(\Delta x)^{k-1}})$$

equação que geralmente é mais conveniente escrever como

$y_{i+k}= F(x_i, y_i, y_{i+1}, \ldots y_{i+k-1})$ ou

$E^k y_i= F(x_i, y_i, Ey_i, \ldots, E^{k-1} y_i)$

Diz-se solução da EDF a uma sequência y_i, $i \in N$, tal que a EDF seja verdadeira $\forall i\in N$

Uma EDF dis-se linear de ordem k se puder ser posta na forma

$$A_k(i)E^k y_i+A_{k-1}(i)E^{k-1} y_i+\ldots+A_o(i)y_i= R(i) \qquad (1)$$

onde $A_k(i) \neq 0$

Esta EDF dir-se-á homogênea se $R(i)= 0$, $\forall\ i \in N$, e caso contrário inhomogênea.

Esta EDF dir-se-á "a coeficientes constantes" se $A_j(i)= A_j$ $\forall i\in N$, $0\leq j\leq k$.

Tratemos de procurar uma forma geral da solução da EDF de ordem k linear a coeficientes constantes

$$A_k y_{i+h}+A_{k-1} y_{i+k-1}+\ldots+A_o y_i= R(i) \qquad (2)$$

Inicialmente, para o caso homogêneo

$$A_k y_{i+h}+A_k y_{i+k-1}+\ldots+A_o y_i= 0, \qquad (3)$$

Podemos reeescrever (3) como

$$[A_k \prod_{\ell=1}^{k} (E-z_\ell)]y_i= 0$$

onde z_ℓ são as raizes do polinômio

$$P(z)=\sum_{j=0}^{k} A_j z^j = A_k \prod_{\ell=1}^{k} (z-z_\ell)$$

Denominamos P(z) o polinômio característico da EDF (3)

Não é difícil ver que, se z_ℓ é uma raiz real

$y_i = z_\ell^{\,i}$ é uma solução

Se z_ℓ tem multiplicidade m são também soluções

$y_i = iz_\ell^{\,i}$, $y_i = i^2 z_\ell^{\,i}$, ... $i^m z_\ell^{\,i}$

Se z_ℓ é uma raiz complexa

$z_\ell = (a+b\ i)$, $\overline{z_\ell} = (a-b\ i)$ é tb raiz de p(z)

Escrevendo $\overline{z_\ell}$ e z_ℓ na forma polar

$$a \pm b\ i = \rho(\cos\theta \pm i\ \mathrm{sen}\theta)$$

e lembrando da fórmula de

$$(a \pm b\ i)^m = \rho(\cos m\ \theta \pm i\ \mathrm{sen}\ m\theta)$$

vemos que

$$y_i = (\cos i\theta)\rho^i \quad \text{e} \quad y_i = (\mathrm{sen}\ i\theta)\rho^i$$

são soluções da E.D.F.

Um conjunto de soluções $y_i^{\,1},\ldots,y_i^{\,k}$ se diz linearmente independente, L I, se

$$\sum_{j=1}^{k} \alpha_j y_i^{\,j} = 0,\ \forall i \in N \rightarrow \alpha_j = 0, \quad 0 \leq j \leq k$$

Caso contrário as soluções se dizem linearmente dependentes L.D.

Teorema 1 Se $y_i^{\,j}$, $1 \leq j \leq k$ são soluções L I de uma EDF linear homogênea de grau k, então qualquer solução y_i da EDF se escreve na forma

$$y_i = \sum_{j=1}^{k} \alpha_j y_i^{\,j} = y_i^{\,G}(\alpha_1,\ldots,\alpha_k),\ \alpha_j \in R$$

Teorema 2 Para uma EDF linear, que tenha por EDF homogênea associada uma EDF nas condições do teorema 1, uma resolução qualquer se escreve como

$y_i = y_i^{\,G} + y_i^{\,P}$ onde $y_i^{\,P}$ é uma solução qq da EDF inhomogênea.

Exemplo 1: Resolva os EDF

a) $3y_{i+2}-12y_{i+1}+9y_i=0$

b) $3y_{i+2}-12y_{i+1}+15y_i=0$

c) $4y_{i+2}-4y_{i+1}+y_i=0$

Os polinômios característicos respectivos são

a) $P(z)=3z^2-12z+9=3(z-3)(z-1)$

b) $P(z)=3z^2-12z+15=3(z-2-i)(z-2+i)$

c) $P(z)=4z^2-4z+1=4(z-\frac{1}{2})(z-\frac{1}{2})$

E as soluções gerais

a) $y_i=\alpha_1 3^i+\alpha_2 1^i=\alpha_1 3^i+\alpha_2$

b) $y_i=(\sqrt{5})^i[\alpha_1 \cos i\theta+\alpha_2 \operatorname{sen} i\theta]$, onde

$\theta = \text{orcsen}(1/\sqrt{5}) = \text{orccos}(2/\sqrt{5})$

c) $y_i=(\alpha_1+i\alpha_2) \quad (1/2)^i$

XII - ANÁLIZE DO ERRO PARA A FÓRUMULA DE EULER

Na última aula vimos que a E.D.O.

$$y' = f(x,y(\varepsilon)), \quad x \in [a,b], \quad y(a) = \zeta$$

podia ser aproximada, fazendo

$$x_i = x_o + ih, \; x_o = a, \quad x_n = b, \text{ por}$$

$$y_{i+1} = \left| y_i + h\, f(x_i, y_i) \right| \quad \sim y(x_i)$$

$$y_o = \zeta$$

Queremos agora encontrar um limite para o i-ésimo passo da resolução,

$$E_i = y(x_i) - y_i$$

Lembrando que

$$y(x_{i+1}) = y(x_i + h) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + h^2 y''(\xi i)/2!$$

para algum $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$, temos

$$E_{i+1} = y(x_{i+1}) - y_i = y(x_i) - y_i + h[f(x_i, y(x_i)) + f(x_i, y_i)] + \frac{1}{2} h^2 y''(\xi_i)$$

usando que $\exists\, \lambda_i \in [y_i, y(x_i)] \,|\, f(x_i, y(x_i)) - f(x_i, y_i) =$

$= \left| \frac{2f}{2y}(x_i, \lambda_i) \right| \quad (y(x_i) - y_i)$, podemos escrever

$$E_{i+1} = E_i + h\, \frac{2f}{2y}(x_i, \lambda_i)\, E_i + \frac{1}{2} h^2 y''(\xi_i)$$

Assumindo a existência de limites

$$|y''(x)| \leq K \quad \text{e} \quad \left| \frac{2f}{2y}(x,y) \right| \leq L, \text{ para } x \in [a,b] \text{ e } y \in [e,d].$$

$$c = \min\{y_i, y(x_i)\} \qquad d = \max\{y_i, y(x_i)\},$$

escrevemos

$$|E_{i+1}| \leq |E_i| + hL|E_i| + \frac{1}{2} h^2 K = (1+hL)\, |E_i| + \frac{1}{2} h^2 K$$

como $E_o = 0$, $M = (1+hL) \geq 1$ e $N = \frac{1}{2} h^2 K \geq 0$,

fazendo $\varepsilon_{i+1} = M\varepsilon_i + N$, (a)

teremos $\varepsilon_i \geq |\varepsilon_i|$ para $\varepsilon_o = 0$

Uma sequência $\{\varepsilon_i\}$, $i \in \mathbb{N}$, diz-se solução de (a) se a equação (a) for satisfeita $\forall i \in \mathbb{N}$

Seja $\bar{\varepsilon}_i$ uma particular solução de

$\varepsilon_{i+1} - M\varepsilon_i = N$ "(a)"

e

$\overline{Di}$ uma solução de

$D_{i+1} - MD_i = 0$ (b)

Provemos que qualquer solução de (a) pode ser escrito como

$\varepsilon_i = \alpha\, D_i + \varepsilon_i$, $\alpha \in R$

Para tanto consideremos $\bar{\bar{\varepsilon}}_i$ uma segunda solução de "(a)" e

$D_i = \bar{\varepsilon}_i - \bar{\bar{\varepsilon}}_i$

De "(a)" temos que

$\tilde{D}_{i+1} = \bar{\varepsilon}_{i+1} - \bar{\bar{\varepsilon}}_{i+1} = M\bar{\varepsilon}_i + N - M\bar{\bar{\varepsilon}}_i - N = M(\bar{\varepsilon}_i - \bar{\bar{\varepsilon}}_i) = M\tilde{D}_i = M^{i+1}\tilde{D}_o$, que é solução de "(b)" com a condição inicial $D_o = \tilde{D}_o$

Podemos pois escrever uma solução qualquer de "(a)" na forma

$\varepsilon_i = \bar{\varepsilon}_i + D_o M^i$, para algum D_o R

Vê-se sem dificuldade que

$\bar{E}_i = (1+hL)^i - \frac{1}{2}\, hK/L$ é uma solução particular de "(a)", pois

$M\varepsilon_{i+1} + N = (1+hL)\bar{\varepsilon}_i + \frac{1}{2}\, h^2 K = (1+hL)\ [(1+hL)^i - \frac{1}{2}\, hK/L] + \frac{1}{2}\, h^2 K =$

$= (1+hL)^{i+1} - \frac{1}{2} hK/L = \bar{\varepsilon}_{i+1}$

Segue portanto que a solução geral de "(a)" é da forma

$\varepsilon_i = \bar{\varepsilon}_i + D_o M^i = \alpha(1+hL)^i - \frac{1}{2}\, hK/L$, para $\alpha = (1+D_o) \in R$

Para a condição inicial $\varepsilon_o = 0$

temos $\alpha = \frac{1}{2}\, hKL$, donde

$\varepsilon_i = (\ \frac{1}{2} hK/L)\ (1+hL)^i - \frac{1}{2}\, hK/L \geq |E_i|$

usando a desigualdade,

$1+hL \leq e^{hL} = 1+hL + \sum_{j=2}^{\infty} (hI)^j/j!$,

podemos finalmente escrever

$|E_i| \leq \varepsilon_i \leq (\frac{1}{2}\, hK/L)\ (e^{ihL} - 1) = h(\ \frac{1}{2}\, K/L)\ (e^{(x_i - x_o)L} - 1)$

Exemplo 1:

Verifique que os erros do exemplo XI-1 em x= 1 estão dentro do do previsto pela fórmula de erro para o método de Euler

Examinando a tabela e a solução analítica

$y(x) = Me^{\gamma x}$ venis que temos as limites

$K = \gamma^2 e^{\gamma}$ $\qquad$ $L = \gamma$,

onde tomamos

$y''(x) = \gamma^2 e^{\gamma x}$ e

$\frac{\partial f}{\partial y} = \gamma$

A tabela abaixo lista os erros previstos e cometidos em cada caso

γ \ h	1	1/2	1/4
$\frac{1}{2}$	0,1487 0,268	0,0862 0,134	0,0469 0,0669
1	0,7183 2,34	0,4583 1,17	0,2769 0,584
2	4,3890 47,3	3,3890 23,6	2,3265 11,8

o $\rightarrow E_n = y(x_n) - y_n = e^{\gamma} - y_n$
o $\rightarrow h(\frac{1}{2}\, K/L)\ (e^{1L}-1) = h\ \frac{1}{2}\ \gamma\ e^{\gamma}(e^{\gamma}-1)$

XIII O método de Runge-Kutta para EDO de primeira ordem

Vimos pelo ex. XII-1 que do método de Euler não podemos esperar grande precisão, a não ser que, tenhamos um passo "h" extremamente pequeno.

Por outro lado o uso de método de Taylor, de ordem maior que um, implicaria no conhecimento das derivadas de ordem pois altas da função incognita y(x), o que geralmente não temos.

O método de Runge-Kutta de ordem k ,RKO(k), será um método pelo qual aproximaremos a solução, y(x), da EDO

$$\begin{cases} y'(x) = f(x,y(x)), \ x \in [a,b] \\ y(a) = \zeta \end{cases}$$

por uma seqüência recursiva

$$y_{i+1} = y_i + h\,\phi(x_i,y_i,h) = y_i + h\,\phi_i$$
$$y_o = \zeta$$

que concorda com o método de Taylor de ordem k,

$$y_{i+1} = y_i + h\,y'(x_i)\ \frac{h^2}{2}\ y''(x_i) + \ldots$$
$$\ldots + (1/k!)\ h^k\ y^{(k)}(x_i)$$
$$y_o = \zeta$$

a menos de termos da ordem $O(h^{k+1})$

Para tanto devemos ter

$$\phi(x_i,y_i,h) = \left[\sum_{j=1}^{k} (1/j!)\ h^{j-1}\ y^{(j)}(x_i)\right] + O(h^k) =$$

$$\phi_i = \left[\sum_{j=1}^{k} (1/j!) h^{j-1} \left[\frac{d^{j-1}}{dx^{j-1}}\right] f\,(x_i,y_i)\right] + O(h^k)$$

Tomemos ϕ_i na forma

$$\phi_i = \Big[\alpha\ f(x_1,y_i) + \alpha_1\ f(x_i+\beta_1 h,y_i+h\gamma_1) + \ldots$$
$$\ldots + \alpha_n\ f(x_i+h\beta_n,y_i+h\gamma_n)\Big]$$

com $0 \le \beta_j \le h$, $1 \le j \le n$

Para o problema assim colocado, mesmo tomando n mínimo haverá geralmente mais de uma solução para as constantes

α, α_j, β_j, γ_j .

Ilustremos o processo para k=2

$$\phi_i = f(x_i,y_i) + \frac{h}{2}\left(f(x_i,y_i) + f_y(x_i,y_i)\ f(x_i,y_i)\right] + O(h^2)$$

tomando n=1 temos por outro lado,

$$\phi_i = \left[\alpha\ f(x_i,y_i) + \alpha_1\ f(x_i+h\beta_1,y_i+h\gamma_1)\right] =$$

$$\alpha\ f(x_i,y_i) + \alpha_1(f(x_i,y_i) + h\beta_1\ f_x(x_i,y_i) +$$

$$+ h\gamma_1\ f_y(x_i,y_i)) + O(h^2)$$

igualando as duas expressões de ϕ_i vem,

$$f(x_i,y_i) + \frac{h}{2}\ f_x(x_i,y_i) + \frac{h}{2}\ f(x_i,y_i)\ f_y(x_i,y_i) =$$

$$= \alpha\ f(x_i,y_i) + \alpha_1\ f(x_i,y_i) + h\alpha_1\rho_1\ f_x(x_i,y_i) +$$

$$+ h\ \alpha_1\gamma_1\ f_y(x_i,y_i) + O(h^2),$$

igualdade que será satisfeito se satisfeito o sistema

$$\alpha + \alpha_1 = 1$$

$$\alpha_1\ \beta_1 = 1/2$$

$$\alpha_1\ \gamma_1 = f(x_i,y_i)/2$$

Dar soluções possíveis são mais comunmente usadas:

a) $\alpha = \alpha_1 = \frac{1}{2},\ \beta_1 = 1,\ \gamma_1 = f(x_i,y_i)$

b) $\alpha = 0,\ \alpha_1 = 1,\ \beta_1 = \frac{1}{2},\ \gamma_1 = \frac{1}{2}\ f(x_i,y_i)$

que nos dão, respectivamente,

a) $\phi_i = \frac{1}{2}\left[f(x_i,y_i) + f(x_i+h,y_i+hf(x_i,y_i)\right]$

b) $\phi_i = (f(x_i + \frac{1}{2}\ h,\ y_i + \frac{1}{2}\ hf(x_i,y_i))$

e as respectivas relações de recorrência

a) $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_i+h, y_i + hf(x_i, y_i))]$

$y_o = \zeta$ (método de Heun)

b) $y_{i+1} = y_i + hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + (h/2) f(x_i, y_i))$

$y_o = \zeta$ (método de Euler-Cauchy modificado)

Listamos a seguir alguns RK O(h) para EDO de 1ª ordem, escrita de uma maneira computacionalmente mais conveniente

O(2)

$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}(K_1+K_2)$

$K_1 = hf(x_i, y_i)$

$K_2 = hf(x_i+h, y_i+K_1)$

(Heun)

$y_i+1 = y_i+K_2$

$K_1 = hf(x_i, y_i)$

$K_2 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}K_1$

(Euler Cauchy mod.)

O(3) $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{4}(K_1+3K_3)$

$K_1 = hf(x_i, y_i)$

$K_2 = hf(x_i + h/3, y_i+K_1/3)$

$K_3 = hf(x_i+2h/3, y_i+2K_2/3$

O(4) $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4)$

$K_1 = hf(x_i, y_i)$

$K_2 = hf(x_i+h/2, y_i+K_1/2)$

$K_3 = hf(x_i+h/2, y_i+K_2/2)$

$K_4 = hf(x_i+h, y_i + K_3)$

O(5)

$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{192} (23K_1+125K_3-81K_5+125K_6)$

$K_1 = hf(x_i, y_i)$

$K_2 = hf(x_i+h/3, y_i+K_1/3)$

$K_3 = hf(x_i+2h/5, y_i+(6K_2+4K_1)/25)$

$K_4 = hf(x_i+h, y_i + (15K_3 + -12K_2+K_1)/4)$

$K_5 = hf(x_i+2h/3, y_i + (8K_4-50K_3+90K_2 - 6K_1)/81$

$K_6 = hf(x_i+4h/5, y_i+(8K_4-10K_3+36K_2-6K_1)/75$

Embora menos frequêntemente usados, estão tabelados na literatura métodos de RK de ordem 6,7,8 e 9.

XIV - O MÉTODO DE ADAMS-BASHFORTH

Estamos interessado em resolver a E D O

$$y' = f(x,y(x)) \qquad x \in [x_o,b]$$
$$y(x_o) = y_o$$

Podemos sempre escrever

$$y(x+h) = y(x) + \int_x^{x+h} y'(\rho)\,d\rho, \text{ ou}$$

tomando $x_i = x_o + ih \mid x_n = b$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i-1}} y'(\rho)\,d\rho$$

Supondo conhecida a função $y(x_j)$ nos pontos x_j, $0 \le j \le k$, usaremos a aproximação

$$\bar{y}_{i+1} = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} P(x)\,dx$$, onde $P(x)$ é o polinômio interpolador de Lagrange de $y'(x)$ nos pontos $x_o \ldots x_k$, ié $gr(P) = k$ e

$$P(x_j) = y'(x_j) = f(x_j, y(x_j)) = f(x_j)$$

Das aulas I e IV sabemos que

$$P(x) = \sum_{j=0}^{k} f(x_j) L_j(x) = \sum_{j=0}^{k} f(x_j) \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k} \frac{x-x_e}{x_j-x_e}$$

tomando $z = (x-x_o)/h$ teremos pois

$$\bar{y}_{k+1} = y(x_k) + \int_k^{k+1} P(z)h\,dz = y(x_k) + h\int_k^{k+1} \sum_{j=0}^{k} f(x_j) \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k} \frac{z-\ell}{j-\ell}\,dz =$$

$$= y(x_k) + h \sum_{j=0}^{k} f(x_j) \left[1 \Big/ \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k} (j-\ell) \right] \int_k^{k+1} \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k} (z-\ell)\,dz =$$

$$= y(x_k) + h \sum_{j=0}^{k} f(x_j) \frac{(-1)^{k-j}}{j!(k-j)!} \int_k^{k+1} \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k} (z-\ell)\,dz =$$

$$= y(x_k) + h \sum_{j=0}^{k} A_j^k f(x_j), \text{ onde } \qquad A_j^k = \frac{(-1)^{k-j}}{j!(k-j)!} \int_k^{k+1} \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k} (z-\ell)\,dz$$

genericamente escrevemos

$$y_{i+1} = y(x_i) + h \sum_{j=0}^{k} A_j^k f(x_{i-h+j})$$

O método de Adams Bashforth de ordem k consiste em tomar recursivamente

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=0}^{k} A_j^{\,k} f_{i-k+j} \quad , \text{ onde } \quad f_m = f(x_m, y_m)$$

Obviamente para iniciar o processo necessitamos de valores para $f_o, f_1, \ldots f_k$ e para tanto teremos de, por meio de algum outro método, obter estimativas para $y_1, y_2, \ldots y_k$

Exemplo 1:

Obtenha as constantes $A_j^{\,k}$ p/ h= 1 e 2

$$A_o^{\,1} = \frac{(-1)^1}{0!1!} \int_1^2 (z-1)dz = -1 \left[\frac{z^2}{2} - z \right]_1^2 = -\frac{1}{2}$$

$$A_1^{\,1} = \frac{(-1)^o}{0!2!} \int_1^2 (z-0)dz = 1 \left[\frac{z^2}{2} \right]_1^2 = \frac{3}{2}$$

$$A_o^{\,2} = \frac{(-1)^2}{0!2!} \int_2^3 (z-1)\ (z-2)dz = \frac{1}{2} \int_2^3 (z^2-3z+2)dz = \frac{5}{12}$$

$$A_1^{\,2} = \frac{(-1)^1}{1!1!} \int_2^3 (z-0)\ (z-2)dz = - \int_2^3 (z^2-2z) = -\frac{4}{3}$$

$$A_2^{\,2} = \frac{(-1)^0}{2!0!} \int_2^3 (z-0)\ (z-1)dz = \frac{1}{2} \int_2^3 (z^2-z)dz = \frac{23}{12}$$

temos assim as fórmulas de recorrência

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{3}{2} f_i + - \frac{1}{2} f_{i-1} \right)$$

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{23}{12} f_i - \frac{4}{3} f_{i-1} + \frac{5}{12} f_{i-2} \right)$$

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{55}{24} f_i - \frac{59}{24} f_{i-1} + \frac{37}{24} f_{i-2} - \frac{3}{8} f_{i-3} \right)$$

Exemplo 2:

Resolva pelo método de Adams-Bashforth a E.D.O

$y' = 2y \qquad x \in [0,1] \qquad$ usando $h = \frac{1}{8}$

$y(0) = 1$

As fórmulas de recorrência para as ordens 1 e 2 são, respectivamente

$$y_{i+1} = y_i + h\ \frac{1}{2}(3(2y_i) - (2y_{i-1})) = \frac{1}{8}\ (3y_i - y_{i-1}) \quad \text{e}$$

$$y_{i+1} = y_i + h\frac{1}{12}\ (23(2y_i) - 16(2y_{i-1}) + 5(2y_{i-2})) = \frac{1}{48}(23y_i - 16y_{i-1} + 5y_{i-2})$$

A tabela abaixo lista os passos intermediários dos processos de $1^{\underline{a}}$ e $2^{\underline{a}}$ ordem. Os valores sublinhados foram tomados como dados

i	Y_i	Y_i
0	1	1
1	1,28403	1,28403
2	1,64054	1,64872
3	2,09524	2,11489
4	2,,67589	2,71245
5	3,41744	3,47895
6	4,36495	4,46210
7	5,57446	5,72308
8	7,11926	7,57284

Resolva analitica e e^{2x} , que daria $y(x_j)=y(1)=$ 7,38906

XVI - ERRO PARA O MÉTODO DE ADAMS BASHFORTH

a) Erro local:

Na aula I sabemos que se $P(x)$ é o polinômio interpolador na forma de Lagrange de $f(x)$ em $x_o, x_1, \ldots, x_k$

$$E(x) = f(x) - P(x) = \left[f^{(k+1)}(\xi) \prod_{j=o}^{k} (x-x_j) \right] / (k+1)!$$

para algum $\xi \in I \supset \{x_o, x_k, x\}$

na aula XIV tomamos a aproximação

$$y(x_k+h) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} y'(x)\, dx \sim \tilde{y}_{k+1} = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} P(x)\, dx,$$

onde $P(x)$ interpola $f(x_j, y(x_j))$ em $0 \leq j \leq k$

Podemos assim escrever

$$y(x_{k+1}) = \tilde{y}_{k+1} + R_k, \quad \text{onde} \quad R_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} (1/k+1)!)^{(k+1)} (\xi(x)) \prod_{j=o}^{k} (x-x_j) dx =$$

pelo TVMI

$$= \frac{y^{(k+2)}(\zeta)}{(k+1)!} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \prod_{j=o}^{k} (x-x_j)\, dx = \qquad \text{tomando } z = (x-x_o)/h$$

$$= \frac{y^{(k+1)}(\zeta)}{(k+1)!} \int_{k}^{k+1} \prod_{j=o}^{k} h(z-j)\, hdz = h^{k+2}\, y^{(k+2)}(\zeta)\, C_{k+1}$$

$$\text{onde} \quad C_{k+1} = \left[\int_{k}^{k+1} \prod_{j=o}^{k} (z-j)\, dz \right] / (k+1)!$$

b) Erro global

O método de AB consistia em tomar interativamente

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=o}^{k} A_j^k f_{i-k+j}$$

Consideremos o erro de $(i+1)$ ésimo passo

$$E_{i+1} = y_{i+1} - y(x_{i+1})$$

Suporemos que os valores usados para iniciar a aplicação do método,

$y(x_o) = y_o$, $y(x_1) \sim y_1, \ldots y(x_k) \sim y_k$, tem a precisão tal que

$|E_j| < \delta$ $\quad 0 \le j \le k$, $\delta \in R_+$

da expressão do erro local

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h \sum_{j=o}^{k} A_j^k\, y'(x_{i-k+j}) + C_{k+1}\, h^{k+2}\, y^{(k+2)}(\zeta_i)$$

Sejam

$$M = \max_{\xi \in I} |\, y^{(k+2)}(\xi)\, | \qquad I = [x_o, b] \quad e$$

$$L = \max_{\substack{\xi \in I\\ \zeta \in J}} \left| \frac{\partial f}{\partial y}(\xi, \zeta) \right| \qquad J \supset \{y(x_i)\} \cup \{y_i\} \quad 0 \le i \le n$$

Temos que $|f_m - y'(x_m)| = |f(x_m, y_m) +$

$- f(x_m, y(x_m)) | \le L\, |y_m - y(x_m)| = L\, |E_m|$

Portanto

$$|E_{i+1}| \le |E_i| + h\, L \sum_{j=o} |A_j^k| |E_{i-k+j}| + |C_{k+1}| h^{k+2}\, M_{k+2}$$

não é difícil ver que

$|E_i| \le \varepsilon_i$, onde ε_i é solução de

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i + h\, L \sum_{j=o} |A_j^k|\, \varepsilon_{i-k+j} + |C_{k+1}| h^{k+2}\, M_{k+2}$$

desde que $\varepsilon_\ell \ge \delta$ p/ $0 \le \ell \le k$

Objetivando encontrar um **limite** para o erro solucionemos a EDF.

Uma solução particular nos é dada por $\varepsilon_i = -Q$ onde

$$Q = + \frac{|C_{k+1}| h^{k+1} M_{k+2}}{L \sum_{j=o}^{k} |A_j^k|} = h^{k+1} \frac{|C_{k+1}| M_{k+2}}{L\, B_k}$$ a EDF homogenea associada,

$\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i - h\, L \sum_{j=o}^{k} |A_j^k|\, \varepsilon_{i-k+j}$, tem por polinômio característica

$$P(z) = z^{k+1} - z^k - h\, L \sum_{j=o}^{k} |A_j^k|\, z^{k-j}$$

Reparando que

$P(1) \le 0$, e

$$P(1+hLB_k) = (1+hLB_k)^{k+1} - (1+hLB_k)^k - h\,L \sum_{j=o}^{k} |A_j^k|(1+hLB_k)^{k-j} =$$

$$= (1+hLB_k)^k \{(1+hLB_k) - 1 - h\,L \sum_{j=o}^{k} |A_j^k|\,(1+hLB_k)^{-j}\}$$

$$\geq (1+hLB_k)^k \{h\,L\,B_k - h\,L \sum_{j=o}^{k} |A_j^k|\} = 0,$$

ou seja

$$P(1) \leq 0 \geq P(1+hLB_k)$$

Concluímos que $P(z)$ tem ao menos uma raiz $z \in [1, 1+hLB_k]$ e, da aula XV, $\varepsilon_i = \alpha\, z^i$ é uma solução da EDF homogenea associada, e

$\varepsilon_i = \alpha\, z^i - Q$ é uma solução da EDF inomogenea, $\forall\, \alpha \in R$

Escolhendo $\alpha = \delta + Q$

$\varepsilon_i = (\delta+Q)\, z^i - Q$ é uma solução da EDF inomogenea que satisfaz a condição $\varepsilon_j \geq \delta$, $0 \leq j \leq k$, de modo que $|E_i| \leq (\partial+Q)\, z^i - Q$

como $z^i \leqslant (1+hLB_k)^i \leq (1 + \sum_{j=1} (hLB_k)^j/j!)^i = e^{hLB_k} = e^{(x_i-x_o)LB_k}$

Podemos escrever

$$|E_i| \leq (\delta+Q)\, e^{(x_i-x_o)LB_k} - Q =$$

$$= \delta\, e^{(x_i-x_o)LB_k} + h^{k+1} \frac{|C_{k+1}|M_{k+2}}{L \quad B_k} (e^{(x_i-x_o)LB_k} - 1)$$

exemplo 1

verifique que os erros do ex. XIII-2 estão dentro do previsto.

Calculemos inicialmente as constantes C_{k+1} e B_k

$$C_{k+1} = \frac{1}{(k+1)!} \int_k^{k+1} \prod_{j=o}^{k} (z-j)\, dz, \quad \text{assim}$$

$$C_{1+1} = \frac{1}{2!} \int_1^2 z(z-1)\, dz = \frac{1}{2} \left[\frac{z^3}{3} - \frac{z^2}{2}\right]_1^2 = \frac{4}{6}$$

$$C_{2+1} = \frac{1}{3!} \int_2^3 z(z-1)(z-2)\, dz = \frac{1}{6} \left(\frac{z^4}{4} - z^3 + z^2\right)_2^3 = -\frac{31}{24}$$

$$C_{3+1} = \frac{1}{4!}\int_3^4 z(z-1)(z-2)(z-3)\,dz =$$

$$= \frac{1}{24}\left[z^5/5 - \frac{3}{2}z^4 + \frac{11}{3}z^3 - 3z^2\right]_3^4 = \frac{251}{720} \quad e \quad B_k = \sum_{j=o}^{k}|A_j^k|$$

da aula XIV obtemos

$$B_1 = 2,\ B_2 = \frac{44}{12} = \frac{11}{3},\ B_3 = \frac{160}{24} = \frac{20}{3}$$

no caso do ex. XIV-2 sabemos que a solução analítica da EDO é $y(x) = e^{2x}$, portanto $M_{k+2} = \max\limits_{\zeta\xi[o,1]} |2^{k+2}\ e^{2x}|$, de modo que $M_{1+2} \sim 59{,}2$ e $M_{2+2} \sim 119$.

Já $\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} 2y = 2$ de modo que $L = \max\limits_{\substack{\zeta\varepsilon[o,1] \\ \zeta\varepsilon[1,e^2]\cup[1,7,6]}} |\frac{2f}{2y}| = 2$

Tomando os dados iniciais por exatos, isto é $\partial = 0$, temos o procedimento de O(1),

$$|E_n| \le h^{1+1}\ \frac{\frac{4}{6}\ 59{,}2}{2.\ 2}\ (e^{(1-o)\,22}-1) \sim h^2 \times 5{,}3\times 10^2$$

e para o procedimento de ordem 2

$$|E_n| \le h^{2+1}\ \frac{\frac{31}{24}\ 119}{2\ \times 11/3}\ (e^{(1-0)2}\times\frac{11}{3} - 1) \sim h^3 \times 3{,}2\times 10^4$$

Substituindo h pelo valor utilizado no exemplo XIII-2 (1/8) verificamos o pedido.

XVII - O MÉTODO DE ADAMS MOULTON

Dada a EDO

$$y' = f(x,y(x)) \qquad x \in [x_o,b]$$

$$y(x_o) = y_o \qquad x_i = x_o + ih \quad h|x_n = b$$

viramos na aula XIV que podemos escrever

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} y'(x)\,dx$$

supondo conhecidas $y(x_j)$ $0 \le j \le k+1$ e $f(x_j) = f(x_j, y(x_j))$

Tomemos $P(x)$, o polinômio interpolador de ~~Lagrnage~~ de $f(x)$ em x_j, $0 \le j \le k+1$, e a aproximação

$$\tilde{y}_{k+1} = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} P(x)\,dx$$

mas

$$P(x) = \sum_{j=0}^{k+1} f(x_j) L_j(x) = \sum_{j=0}^{k+1} f(x_j) \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k+1} \frac{x - x_e}{x_j - x_e}$$

tomando $z = (x - x_o)/h$

$$\tilde{y}_{k+1} = y(x_k) + \int_k^{k+1} \sum_{j=0}^{k+1} f(x_j) \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k+1} \frac{z-\ell}{j-\ell}\, h\,dz =$$

$$= y(x_k) + h \sum_{j=0}^{k+1} f(x_j) \left[1[/ \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k+1} (j-\ell)\right] \int_k^{k+1} \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k+1} (z-\ell)\,dz$$

ou

$$\tilde{y}_{k+1} = y(x_k) + h \sum_{j=0}^{k+1} \hat{A}_j^{\,k} f(x_j),$$

onde

$$\hat{A}_j^{\,k} = \frac{(-1)^{k-j+1}}{j!\,(k-j+1)!} \int_k^{k+1} \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq j}}^{k+1} (z-\ell)\,dz$$

genericamente temos

$$\tilde{y}_{i+1} = y(x_i) + h \sum_{j=0}^{k+1} \hat{A}_j^{\,k} f(x_{i-k+j})$$

O método de AM consiste em tomar recursivamente, sobre $0 \leq \ell \leq m$ e sobre $k+1 \leq i \leq n$

$$y_{i+1}^{[\ell]} = y_i^{[m]} + h \sum_{j=0}^{k} \hat{A}_j^k f_{i-k+j}^{[m]} + h \hat{A}_{k+1}^k f_{i+1}^{[\ell-1]},$$

onde

$$f_j^{[\ell]} = f(x_j, y_j^{[\ell]})$$

Para iniciar o processo recursivo necessitamos de aproximações para $y_0^m, y_1^m, \ldots, y_k^m$ e y_{k+1}^o, e de uma aproximação y_{i+1}^o para cada novo índice i+1.

Uma maneira eficiente de obter estas aproximações seria, por exemplo, a de obter $y_0^m, \ldots, y_k^m$ por Runge Kutta e y_{i+1}^o por Adorns Bashforth de ordem k.

Definimos y_{i+1}^{∞} como o ponto fixo

$$y_{i+1}^{\infty} = y_i^{\infty} + h \sum_{j=0}^{k} \hat{A}_j^k f_{i-k+j}^{\infty} + h\hat{A}_{k+1}^k f_{i+1}^{\infty} = \beta_i + h \hat{A}_{k+1}^k f(x_{i+1}, y_{i+1}^{\infty})$$

Sabe-se que se uma função F(y) tem um ponto fixo $\hat{y}$ e é Lipchitgrano com constante L < 1, ie

$$\exists\ L < 1 \mid \quad |F(y)-F(z)| \leq L\ |y-z|$$

então o processo $y^{\ell+1} = F(y)$ converge p/ $y^{\infty} = \hat{y}$

no método de AM temos

$$y_{i+1}^{\ell+1} = h \hat{A}_{k+1}^k f(x_{i+1}, y_{i+1}^{\ell})$$

Tornando $L = \max |\partial f/\partial y|$, basta tornar h|

$h \hat{A}_{k+1}^k L < 1$ para assegurar a convergência

Ex.: 1 Calcule $\hat{A}_j^k$ p/ k= 1,2

$$\hat{A}_0^1 = \frac{(-1)^{1-0+1}}{0!(1-0+1)!} \int_1^2 (z-1)(z-2)dz = \frac{1}{2} \left| \frac{z^3}{3} - \frac{3z^2}{2} + 2z \right|_1^2 = -\frac{1}{12}$$

$$\hat{A}_1^1 = \frac{(-1)^{1-1+1}}{1!(1-1+1)!} \int_1^2 (z-0)(z-2)dz = \frac{2}{3}$$

$$\hat{A}_2^1 = \frac{(-1)^{1-2+1}}{2!(1-2+1)!} \int_1^2 (z-0)(z-1)dz = \frac{5}{12}$$

$$\hat{A}_0^{\,2} = \frac{(-1)^{2-0+1}}{0!\;3!}\int_2^3 (z-1)(z-2)(z-3)\,dz = \frac{1}{24}$$

$$\hat{A}_1^{\,2} = \frac{(-1)^{2}}{1!\;2!}\int_2^3 (z-0)(z-2)(z-3)\,dz = \frac{1}{24}$$

$$\hat{A}_2^{\,2} = 19/24\ ,\qquad \hat{A}_3^{\,2} = 3/8$$

temos assim as relações de recorrência do método de AM

$$y_{i+1} = y_i^{\,m} + \frac{h}{12}\left(5f_{i+1}^{\,-1} + 8f_i^{\,m} - f_{i-1}^{\,m}\right)$$

$$y_{i+1} = y_i^{\,m} + \frac{h}{24}\left(9f_{i+1}^{\,-1} + 19f_i^{\,m} - 5f_{i-1}^{\,m} + f_{i-2}^{\,m}\right)$$

Ex.: 2 Resolva numéricamente a EDO

$y' = 2y$, x 0,1 , $y(0) = 1$ pelo método de AM de ordem 2 e passo $h = 1/8$

Para iniciar o processo use a condição inicial e $y(1/8) = 1,284025417$. Tome y^{o}_{i+1} o valor obtido pelo método de AB de ordem 1. Tome $m = 2$

res.:

AB $\quad y^{o}_{i+1} = y_i^{m} + \frac{h}{2}\left(3f_{i-1}^{\,m}\right) = y_i^{m} + \frac{1}{8}\left(3y_i^{\,m} - y_{i-1}^{\,m}\right)$

AM $\quad y_{i+1} = y_i^{m} + \frac{h}{12}\left(5f_{i+1}^{\,-1} + 8f_i^{\,m} - f_{i-1}^{\,m}\right) = y_i^{\,m} +$

$$+\ \frac{1}{48}\left(5y_{i+1}^{\,-1} + 8y_i^{\,m} - y_{i-1}^{\,m}\right)$$

i	y_i^{o}	y_i^{1}	y_i^{2}
0	———	———	1
1	———	———	1,2840025417
2	1,640534948	1,648085377	1,648871880
3	2,106695658	2,116380795	2,117389663
4	2,705301802	2,717738714	2,719034225
5	3,473998352	3,489969140	3,491632763
6	4,461115771	4,481624571	4,483760904
7	5,728717148	5,755053406	5,757796767
8	7,356500443	7,390320006	7,393842877

O erro cometido em $x = 1 (i=8)$ e $<0,06\%$

XVIII - SISTEMAS DE E.D.O. E O "METODO DA CHUTE" para problemas de volume de contorno

Ocupamo-nos até o momento apenas de E.D.O de $1^{\underline{a}}$ ordem. Ocorre que uma E.D.O de ordem arbitrária, k,

$$y^{(k)}(t) = f(t, y(t), y'(t), \ldots, y^{(k-1)}(t)),$$

pode ser escrito como o sistema de k EDO de $1^{\underline{a}}$ ordem. Tomando $y(t) = {}^1y$

$${}^jy' = {}^{j+1}y \qquad , 1 \leq j \leq k-1$$

$${}^ky' = f(t, {}^1y, {}^2y, \ldots, {}^{k-1}y)$$

Os métodos já estudados, (EU,RK,AB,AM) podem ser facilmente adpatados à solução de sistemas de EDO de $1^{\underline{a}}$ Ordem

$${}^jy' = f_j(t, {}^1y, \ldots, {}^ky) \qquad 1 \leq j \leq k$$

ou equivalentemente, em notação vetorial,

$$Y' = F(t, Y)$$

Ex.: 1

Escreva as formas de aplicação dos métodos de RK e AB de ordem 2 para o sistema

$${}^1y' = {}^1f(t, {}^1y, {}^2y)$$

$${}^2y' = f_2(t, {}^1y, {}^2y)$$

O método de RK se escreve

$${}^1y_{i+1} = {}^1y_i + \frac{1}{2}({}^1K_1 + {}^1K_2)$$

$${}^2y_{i+1} = {}^2y_i + \frac{1}{2}({}^2K_1 + {}^2K_2)$$

$${}^1K_1 = h\,{}^1f(t_i, {}^1y_i, {}^2y_i)$$

$${}^2K_1 = h\,{}^2f(t_i, {}^1y_i, {}^2y_i)$$

$${}^1K_2 = h\,{}^1f(t_{i+1}, {}^1y_i + {}^1K_1, {}^2y_i + {}^2K_1)$$

$${}^2K_2 = h\,{}^2f(t_{i+1}, {}^1y_i + {}^1K_1, {}^2y_i + {}^2K_1)$$

O método de AB se escreve

$$^1y_{i+1} = {}^1y_i + h\left(\frac{3}{2}\ {}^1f(t_i, {}^1y_i, {}^2y_i) - \frac{1}{2}\ {}^1f(t_{i-1}, {}^1y_{i-1}, {}^2y_{i-1})\right)$$

$$^2y_{i+1} = {}^2y_i + h\left(\frac{3}{2}\ {}^2f(t_i, {}^1y_i, {}^2y_i) - \frac{1}{2}\ {}^2f(t_{i-1}, {}^1y_{i-1}, {}^2y_{i-1})\right)$$

No caso de uma E.D.O de $1^{\underline{a}}$ ordem havia apenas uma "condição auxiliar" e, portanto estavamos sempre num problema de valor inicial.

Para um sistema de E.D.O. temos tanto problema de valores iniciais como problemas de valores de contorno.

Casos típicos seriam, respectivamente,

$$\begin{array}{l|l} {}^1y' = {}^2y & t \in [0,T] \\ {}^2y' 2\ g(t, {}^1y\,{}^2y & {}^1y(0) = \alpha, \quad {}^2y(0) = \beta \end{array}$$

$$\begin{array}{l|l} {}^1y' = {}^2y & t \in [0,T] \\ {}^2y' = f(t, {}^1y, {}^2y & {}^1y(0) = \alpha, \quad {}^1y(t) = j \end{array}$$

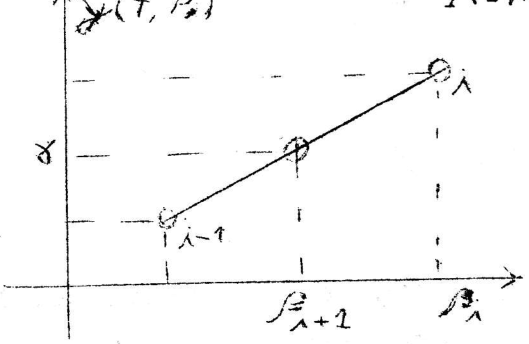
No primeiro caso, tomando α fixo, a cada escolha de β corresponderá um valor de ^1y em T, $^1y(T,\beta)$

Procuremos uma sequência $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m$ tal que

$$\lim_{m\to\infty} \beta_m = \beta \quad \text{e } \beta \text{ tal que } \quad {}^1y(T,\beta) = \gamma$$

A partir de duas tentativas iniciais, β_0 e β_1, tornaremos os termos seguintes por interpolação linear

$$\beta_{i+1} = \beta_{i-1} + (\beta_i - \beta_{i-1})\ \frac{\gamma - {}^1y(T,\beta_{i-1})}{{}^1y(T,\beta_i) - {}^1y(T,\beta_{i-1})}$$



É dificil conseguir a priori garantia para a convergência do processo, que pode muito bem não ocorrer!

Para sistemas maiores a mesma idéia pode ser aplicada. Considere o problema

$$\begin{array}{ll|l} {}^1y' = {}^1f(t, {}^1y, {}^2y, {}^3y, {}^4y) & & t \in [0,T] \\ {}^2y' = {}^2f(t, {}^1y, {}^2y, {}^3y, {}^4y) & & {}^1y(0) = {}^1\alpha, \quad {}^2y(0) = \alpha^2 \\ {}^3y' = {}^3f(t, {}^1y, {}^2y, {}^3y, {}^4y) & & {}^3y(T) = {}^3\beta, \quad {}^4y(T) = {}^4\beta \\ {}^4y' = {}^4f(t, {}^1y, {}^2y, {}^3y, {}^4y) & & \end{array}$$

Para o mesmo sistema tomemos as condições iniciais

$${}^jy(0) = {}^j\alpha, \qquad 1 \le j \le 4$$

Considerando ${}^1\alpha$ e ${}^2\alpha$ fixos e ${}^3y(t, {}^3\alpha, {}^4\alpha)$, ${}^4y(t, {}^3\alpha, {}^4\alpha)$, os valores de ${}^3y$ e ${}^4y$ em T para dados ${}^3\alpha$ e ${}^4\alpha$

Aproximando ${}^jy(t, {}^3\alpha, {}^4\alpha)$ pela série de Taylor de ${}^jy$ em torno do ponto $(t, {}^3\hat{\alpha}, {}^4\hat{\alpha})$ temos

$${}^jy(t, {}^3\alpha, {}^4\alpha) = {}^jy(t, {}^3\hat{\alpha}, {}^4\hat{\alpha}) +$$

$$+ \left| \frac{\partial^2 y}{\partial^3}(t, {}^3\hat{\alpha}, {}^4\hat{\ }) \right| ({}^3\alpha - {}^3\hat{\alpha}) + \left| \frac{\partial^2 y}{\partial^4}(t, {}^3\hat{\alpha}, {}^4\hat{\alpha}) \right| ({}^4\alpha - {}^4\hat{\alpha})$$

Tomaremos iterativamente

${}^j\alpha_{i+1} = {}^j\alpha_i + {}^j\delta_i$, sendo a ${}^j\delta$ a solução do sistema linear

$${}^j\beta = {}^jy(t, {}^3\alpha_i, {}^4\alpha_i) + \left| \frac{\partial^j y}{\partial^3\alpha} \right|_i {}^3\delta_i + \left| \frac{\partial^j y}{\partial^4} \right|_i {}^4\delta_i$$

p/ $3 \le j \le 4$

em que aproximaremos

$$\left| \frac{\partial^j y}{\partial^3\alpha} \right|_i \quad \text{por} \quad \frac{{}^jy(t, {}^3\alpha_i + {}^3h_i, {}^4\alpha_i) - {}^jy(t, {}^3\alpha_i, {}^4\alpha_i)}{{}^3h_i}$$

$$\left| \frac{\partial^j y}{\partial^4\alpha} \right|_i \sim \frac{{}^jy(t, {}^3\alpha_i, {}^4\alpha_i + {}^4h_i) - {}^jy(t, {}^3\alpha_i, {}^4\alpha_i)}{{}^4h_i}$$

Novamente é difícil assegurar a convergência do processo. Notamos também que o trabalho computacional cresce rapidamente com a ordem do sistema.

XIX - Alguns Métodos para Soluções Numéricas de Problemas de Valor de Contorno em EDO Lineares

Uma EDO de ordem k

$$y^k = f(t, y, y', \ldots y^{k-1}), \quad T \in [o, b]$$

tem condição de contorno

$$\Gamma\gamma \left| \overline{[y(x_1),\ y(x_2), \ldots, y(x_e),\ y'\ (x_1) \ldots y'(x_e),} \right.$$

$$\ldots\ y^k(k_1), \ldots y^k(x_e)] = 0, \quad 1 \leq \gamma \leq k \quad x_r \in [a,b]$$

A EDO dir-se-a linear se for de forma

$$L[y] = g(x), \qquad \text{onde}$$

$$L[y] = \sum_{j=o}^{k} f_j\ y^{(k-j)}(x)$$

para função f_j em $[a,b]$

As condições de contorno der-se-ão lineares de dois pontos se forem da forma

$$\Gamma\gamma[y] = j_\gamma \qquad \ldots \qquad \gamma = 1 \ldots k, \text{ onde}$$

$$\Gamma\gamma[y] = \sum_{j=o}^{k-1} \alpha_j^\gamma\ y^j(a) + \beta_j^\gamma\ y^j(b)$$

Iniciemos o estudo pelas equações de 2ª ordem, k=2, que será facilmente generalizado

$$\begin{cases} y''(x) + P(x)\ y'(x) + Q(x)\ y(x) = g(x) \\ \\ \alpha_o y(a) + \alpha_1\ y'(a) = A \\ \\ \beta_o y(b) + \beta_1\ y'(b) = B \end{cases} \qquad \begin{array}{|l} \hline K \in [a,b] \\ x_i = x_o + ih \\ x_o = a,\ x_n = b \end{array}$$

1) método das diferenças finitas (D F)

Vimos na aula X como aproximar o valor da derivada de uma função $y(x)$ tabelada em pontos, igualmente espaçados, $x_i = k_o + ih$. Por exemplo

$$y'(x_i) \sim (y_{i+1} - y_{i-1})/2h = y'(x_i) + O(h^2)$$

$$y''(x_i) \sim (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2 = y''(x_i) + O(h^2)$$

Podemos pois aproximar o EDO pelo sistemas

$$\frac{1}{h^2}(y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}) + \frac{1}{2h} P(x_i)(y_{i+1}-y_{i-1}) +$$

$$+ Q(x_i)\, y_i = g(x_i), \quad \text{em} \quad 1\le i\le h-1,$$ sistema tridiogonal

que nos fornece n-1 equações à n+1 incognitas y_i, i=1...n

Podemos usar as duas condições de contorno na forma

$$\begin{cases} \alpha_0\, y_0 + \alpha_1 \frac{1}{h}(y_1-y_0) = A \\ \alpha_0^{\beta}\, y_n + \beta_1 \frac{1}{+h}(y_n-y_{n-1}) = B \end{cases}$$

neste caso usamos a aproximação

$$y_i' = y_i-y_{i-1}/h = y(x_i) + O(h)$$

Poderiamos também ter usado a aproximação de 2ª ordem

$$\begin{cases} \alpha_0\, y_0 + \alpha_1 \frac{1}{2h}(-3y_0+4y_1-y_2) = A \\ \beta_0\, y_n + \beta_1 \frac{1}{2h}(\,3y_n-4y_{n-1}-y_{n-2}) = B \end{cases}$$

Uma terceira opção, talvez a melhor, é usar apenas as aproximações por diferenças centrais. Para tanto introduzamos os pontos $x_{-1} = x_0 - h$, $x_{n+1} = x_n + h$,
escrevamos a EDO como

$$\begin{cases} g(x_i) = \frac{1}{h^2}(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \frac{1}{2h} P(x_i)(y_{i+1}-y_{i-1}) + \\ + Q(x_i)\, y_i \quad \text{em} \quad 0\le i\le n \end{cases}$$

e as condições de contorno como

$$\begin{cases} \alpha_0 y_0 + \alpha_1 \frac{1}{2h}(y_1-y_{-1}) = A \\ \beta_0\, y_n + \beta_1 \frac{1}{2h}(y_{n+1}-y_{n-1}) = B \end{cases}$$

É frequente o uso da estropolação de Richardson para melhorar uma série de resultados obtidos pela aplicação do método para diferentes passos $H_i = h/\lambda^i$.

Algoritmos especialmente desenvolvidos para a redução de sistema tri-(penta,hepta....) diagonais aumentam sobremaneira a eficiência do método.

2) método dos mínimos quadrados

Procuraremos aproximar a solução da EDO, y(x), por

$$y(x) - u_o(x) + \sum_{j=1}^{S} C_j u_j(x), \quad \text{onde}$$

$C_j \in R$ são coeficientes a determinar e u_o e u_j são funções que obedecem, respectivamente, as condições de contorno inhomogeneos e homogeneos, isto é,

$$\Gamma\gamma\ [u_o] = j_\gamma \quad e \quad \Gamma\gamma\ [u_j] = 0$$

ou no caso especifico estudado

$$\begin{cases} \alpha_o u_o(a) + \alpha_1 u'_o(a) = A \\ \beta_o u_o(b) + \beta_1 u_o(b) = B \\ \alpha_o u_j(a) + \alpha_1 u_j(a) = 0 \\ \beta_o u_j(b) + \beta_1 u_j(b) = 0 \end{cases}$$

Por linearidade das condições de contorno segue que a aproximação $(x) = u_o + \sum C_j u_j$ obedece a condição de contorno do problema dado, qualquer que

Se u for efetivamente a solução da EDO, temos que

$$L[u] - g(x) = 0$$

Seja $R(x, C_1, \ldots, C_S) = L[u] - g$

O método dos mínimos quadrados (MQ) consiste em tomar por aproximação de y a função que minimiza a integral

$$J = \int_a^b R^2(x, C_1, \ldots, C_j)\, dx$$

A condição de mínimo se expressa no sistema

$$\frac{2J}{2C_j} = 2 \int_a^b R \frac{2R}{2C_j}\, dx = 0$$

p/ $j=1,\ldots,S$

mas

$$R = L[u_o] + \sum_{j=1}^{S} C_j \, L[u_j] - g$$

e

$$\frac{\partial R}{\partial C_j} = L[u_j]$$

assim

$$\frac{\partial J}{\partial C_j} = 2 \int_a^b L[u_j] \left(L[u_o] + \sum_{r=1}^{S} C_r \, L[u_r] - g \right) dx =$$

$$= 2 \left[\int_a^b L[u_j] \, L[u_o] \, dx + \sum_{r=1}^{S} C_r \int_a^b L[u_j] \, L[u_r] \, dx + \right.$$

$$\left. - \int_a^b L[u_j] \, g \, dx \right] = 2 \left(R_j^o + \sum_{r=1}^{S} C_r \, R_j^r - \rho_j \right), \text{ onde}$$

$$R_j^r = \int_a^b L[u_r] \, L[u_j] \, dx \quad \text{e} \quad \rho_j = \int_a^b L[u_j] \, g \, dx$$

a solução do sistema linear

$$\left\{ R_j^o + \sum_{r=1}^{S} C_r \, R_j^r - \rho_j = 0 \right.$$

nos fornecerá as constantes C_j a serem utilizados.

XX INTEGRAIS MULTIPLAS

Analisaremos agora procedimentos para o cálculo de integrais multiplas. Embora as idéias apresentadas sejam generalizaveis, ao cálculo em qualquer dimensão, restringir-nos-emos às integrais duplas, i.é,

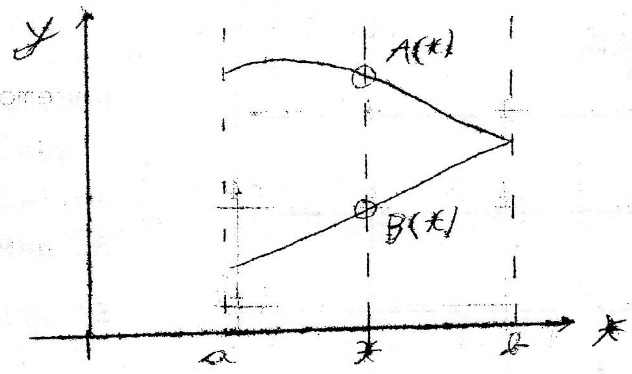
$$J = \iint_\sigma f(x,y)\, dx\, dy$$

Uma primeira idéia é usarmos a já conhecida fórmula de Newton do caso unidimensional. Tomemos a região σ delimitada por

$a \le x \le b$

e

$A(x) \le y \le B(x)$



teremos então

$$J = \int_a^b dx \int_{A(x)}^{B(x)} f(x,y)\, dy$$

Para uma função $\phi(z)$, $z \in [\alpha\ \beta]$ tinhamos as fórmulas de Newton de ordem n na forma

$$\int_\alpha^\beta \phi(z)\, dz \simeq nh \sum_{\ell=0}^{n} C_\ell^n\ \phi_\ell$$

onde $z_\ell = \alpha + \ell h$, $z_n = \beta$ e $\phi_\ell = \phi(z_\ell)$

tomando $x_i = a+ih$, $h = (b-a)/n$, $y_{ij} = A(x_i) + jh_i$, $h_i = \dfrac{B(x_i)-A(x_i)}{m}$

$$F(x_i) = m\, h_i \sum_{j=0}^{m} C_j^m\ f(x_i,y_{ij}) \sim \int_{A(x_i)}^{B(x_i)} f(x_i,y)\, dy$$

teremos

$$J \sim \int_a^b F(x)\, dx \sim nh \sum_{i=0}^{n} C_i^n\ F_i = nh \sum_{i=0}^{n} C_i^n\ nh_i \sum_{j=0}^{m} C_j^m\ f(x_i,y_{ij})$$

ex. 1

Ilustre o processo descrito no caso $n = m=2$, i.é, a generalização da fórmula de Simpson, na região $a\le x\le b$, $A\le y\le B$

$$\int_\alpha^\beta \phi(z)\, dz \sim \frac{h}{3}(\phi_0 + 4\,\phi_1 + \phi_2) \text{ onde } z_\ell = \alpha + \ell\, h, \quad h = (\beta-\alpha)/2$$

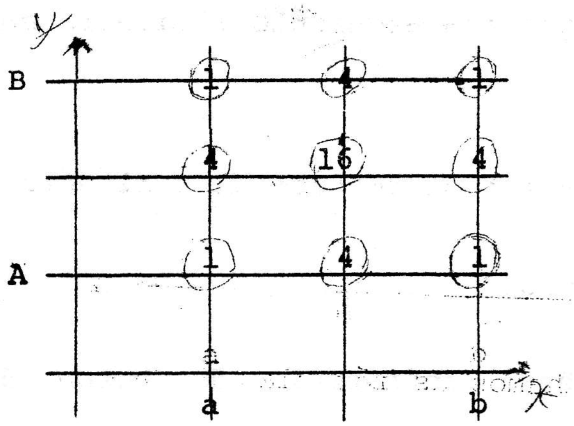
neste caso teremos

$$J \sim 2h \sum_{i=o}^{2} 2h_i \sum_{j=o}^{2} C_i^n C_j^m f_{ij}, \quad \text{onde} \quad C_o^n = C_2^n = 1/6, \ C_1^n = 2/3,$$

$$h = \frac{b-a}{2}, \quad h_i = \frac{A(x_i)-A(x_i)}{2} = \frac{B-A}{2}$$

donde

$$J \sim \frac{h\,h_i}{9} \left[(f_{oo}+f_{2o}+f_{o2}+f_{22}) + 4(f_{1o}+f_{o1} + f_{21}+f_{12}) + 16\, f_{11} \right]$$



Podemos sempre cobrir uma região σ qualquer, com células como o ao lado indicada, extendido quando necessário o domínio de $f(x,y)$ por $f(x,y) = 0, \ \forall \ (x,y) \notin \sigma$

Uma segunda idéia é, dada uma região σ determinada, espalhar em σ N pontos $P_i = (x_i,y_i)$, $1 \le i \le N$ e tomar

$$J \sim \sum_{i=1}^{\tilde{\tilde{N}}} K_i f_i = \sum_i K_i f(x_i,y_i)$$ onde os coeficientes K_i serão determinados exigindo-se que a aproximação resulta exata se f é da forma

$$f(x,y) = \sum_{\substack{m+n\le k \\ m,n\in N}} \alpha_{m,n} x^m y^n .$$ Seja $J_{m,n} = \iint_\sigma x^m y^n \, dx\, dy$ a condição pode ser expressa pelo sistema

$$\left\{ J_{m,n} = \sum_{i=1}^{N} K_i (x_i)^m (y_i)^n \right.$$

sendo $m,n \in N \mid m+n \le k$, há $(k+1) + k + (k-1)+\ldots+1 = (k+1)(k+2)/2$ escolhaspossíveis de duplas (m,n). Logo basta tomar $N = (k+1)(k+2)/2$ pontos e o sistema resulta, em geral, determinado.

Este método é bastante útil quando podemos escolher o nº por não a localização exata dos pontos P_i.

ex. 2

De uma sugestão de como espalhar os N pontos P_i em uma dada região σ de modo que a fórmula de aproximação optada seja a "melhor possível".

Como terceiro método exporemos o uso que se pode fazer de um gerador de números aleatórios, i.é, uma função RAND: N → [0,1[que nos fornece uma sequência de "n$^{\underline{os}}$ aleatórios".

Se $\sigma = Q = [0,1] \times [0,1]$ tomaremos $J \sim \frac{1}{n} \sum_{i=1} f_i$, onde

$f_i = f(x_i^1, x_i^2)$ é, para cada i, a função num argumento aleatório em Q.

Se σ é limitada, i.é,

$\sigma \subset [a^1, b^1] \times [a^2, b^2]$ basta tomar a transformação de variáveis

$x^\ell = a^\ell + (b^\ell - a^\ell)\, z^\ell$, $\ell = 1,2$ e teremos

$$J = \int_a F(z^1, z^2) \left| \frac{\partial(x^1, x^2)}{\partial(z^1, z^2)} \right| dy^1\, dz^2$$

onde

$$F(z^1, z^2) = \begin{cases} f(x^1(z^1),\ x^2(z^2)) & \text{se} \\ (x^1(z^1), x^2(z^2)) \in \sigma & \\ 0 & \text{se} \\ (x^1(z^1), x^2(z^2)) \notin \sigma & \end{cases}$$

$$\left| \frac{\partial(x^1, z^2)}{\partial(z^1, z^2)} \right| = \begin{vmatrix} b^1 - a^1 & 0 \\ 0 & b^2 - a^2 \end{vmatrix} = \prod_{j=1}^{2} (b^j - a^j) = D$$

e podemos tomar a aproximação

$$J \sim \frac{D}{n} \sum_{i=1}^{n} F_i.$$

XXI - EQUAÇÕES ELIPTICAS

A forma geral de uma equação a derivadas parciais linear em duas dimensões é

$$A\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2\theta}{\partial x\partial y} + C\frac{\partial^2\theta}{\partial y^2} + D\frac{\partial\theta}{\partial x} + E\frac{\partial\theta}{\partial y} + F\theta = f$$

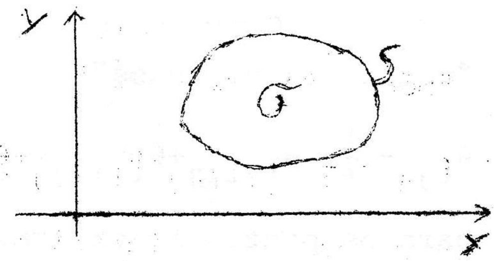
que conforme o sinal de seu determinante

$$\Delta = B^2 - 4AC$$

é dita eliptica ($\Delta<0$), parabolica ($\Delta=0$), hiperbolica ($\Delta>0$) ou mixta se $\Delta(x,y)$ mudar de sinal na região de definição da equação.

Estudemos a equação eliptica de Laplace(equação do calor)

$$\begin{cases} \nabla^2\theta = 0 & \text{em } \sigma \\ \theta(P) = \phi(P) & \text{para } P\in S \end{cases}$$



a condição de contorno é conhecida como condição de Dirichlet.

Uma função harmonica (para a qual $\nabla^2\theta = 0$) satisfazendo o problema de Dirichlet numa região compacta existe e é única dependendo continuamente da condição de contorno.

Verifica-se além disto que

$$\min_{P\in S}\theta(P) \le \theta(x,y)_{(x,y)\in\sigma} \le \max_{P\in S}\theta(P)$$

Recordados estes poucos fatos estudemos algum método numerico de solução.

Instruamos primeiramente uma malha

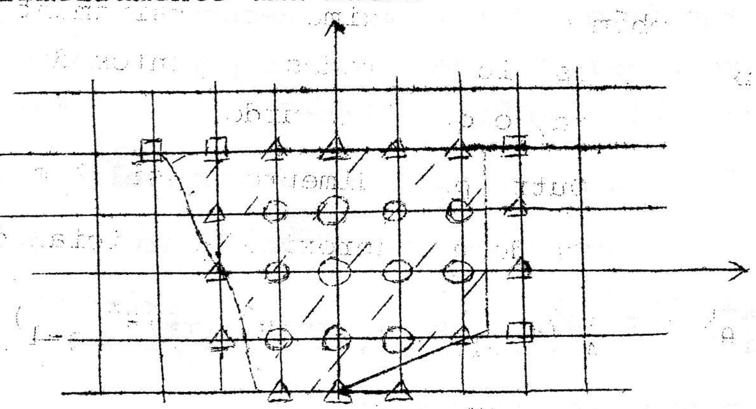
$M_{ij} = (x_i, y_i)$,

$x_i = x_o + ih$

$y_j = y_o + jh$

onde $M_{ij} \in \sigma$

ou $\min_{P\in S} d(M_{ij}, P) < h$



Um ponto M_{ij} da malha dar-se-á

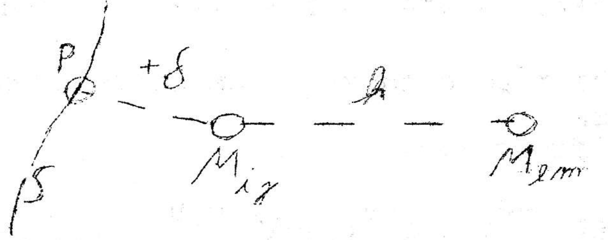
- Interior (0) sse ele e seus quatro vizinhos pertencerem a malha
- Se fronteira de $1^{\underline{a}}$ espécie (Δ) sse ao menor um de seus vizinhos for interior
- De fronteira de $2^{\underline{a}}$ espécie ($\square$) sse não for interior nem de $1^{\underline{a}}$ espécie.

As equações acima tem por pontos fixo a aproximação do primeiro método e para ele convergem.

Uma sofistificação deste método e o algoritmo de Liebmann no qual a relação de recorrência para os pontos de $1^{\underline{a}}$ espécie é substituida por

$$\theta_{ij}^{k+1} = \phi(P) + (\theta_{\ell m}^{k} - \phi(P))\delta/(k+\delta)$$

onde δ é a distância $d(M_{ij},P)$ tomada com sinal positivo se $M_{ij} \in \sigma$ e com sinal negativo se $M_{ij} \notin \sigma$ e $M_{\ell m}$ é um (0) ponto interior vizinho de M_{ij}



Apresentemos agora um método estocástico.

Denomina-se caminho com fronteira aderente a uma sequência M_{i_p,j_p}, $0 \le p \le n$ tal que

1) M_{i_p,j_p} é ponto interior para $p < n$

2) M_{i_n,j_n} é ponto de fronteira de $1^{\underline{a}}$ espécie

3) $M_{i_{p+1},j_{p+1}}$ é vizinho de M_{i_p,j_p}

Ao ponto M_{i_o,j_o} denomina-se início do caminho e a M_{i_n,j_n} seu término.

O caminho dir-se-a aleatória se dado de a p-ésima posição do caminho e M_{i_p,j_p} a (p+1) -ésima posição por escolhida aleatóriamente, com probabilidade 1/4 para cada vizinho.

Seja $P(i,j,m,n)$ a probabilidade de que um caminho com início em $M_{i,j}$ termine em $M_{m,n}$. Nota-se que:

a) $\sum_{(m,n)} P(i,j,m,n) = 1$

b) $P(m',n',m,n) = \delta_m^{m'} \delta_n^{n'}$

Dada uma função $\phi_{m,n}$, definida por pontos de fronteira, definimos VE_{ij}, o valor esperado de ϕ no ponto terminal de um caminho aleatório com início em M_{ij} à função

$$VE_{ij} = \sum_{(m,n)} P(i,j,m,n)\ \phi_{m,n}$$

vê-se que

$$\begin{cases} VE_{ij} = \frac{1}{4}\left(VE_{i-1,j} + VE_{i+1,j} + VE_{i,j-1} + VE_{i,j+1}\right), \text{ se } \\ M_{ij} \text{ e ponto interior} \\ \\ VE_{ij} = \phi_{ij}, \quad \text{se} \\ M_{ij} \text{ é ponto de fronteira.} \end{cases}$$

Tomando θ_{ij} como definido no primeiro método exposto vemos a perfeita analogia da dois problemas:

Determinar θ_{ij}, o valor da função harmonica solução do problema de Dirichlet, e VE_{ij} o valor esperado de ϕ no ponto terminal.

Assim concluimos que a média dos valores de ϕ nos pontos terminais de uma série de caminhos aleatórios com início em M_{ij} converge para θ_{ij}.

XXII - EQUAÇÕES PARABOLICAS E HIPERBOLICAS

A semelhança do que fizemos com as equações elipticas procuremos métodos numéricos de solução de equação parabólicas e hiperbólicas.

Como exemplo de equação parabólica tomemos a equação de difusões

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}, \quad (x,t) \in [0,L] \times [0,\infty[$$

sujeita a condição de contorno

$$\theta(x,0) = f(x), \ \theta(0,t) = \phi(t), \ \theta(L,t) = \psi(x)$$

Com o intuito de encontrar uma equação de diferenças, que aproxime a equação diferencial, tomamos uma malha

$$M_{ij} = (x_i, t_j), \quad x_i = ih, \quad h = L/N$$

$$t_i = jh'$$

e as aproximações

$$\left.\frac{\partial\theta}{\partial t}\right|_{iju} = (\theta_{i,j+1} - \theta_{ij})/h'$$

$$\left.\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right|_{ij} = (\theta_{i+1,j} - \partial\theta_{ij} + \theta_{i-1,j})/h^2$$

onde $\theta_{ij} = \theta(M_{ij}) = \theta(x_i, t_j)$

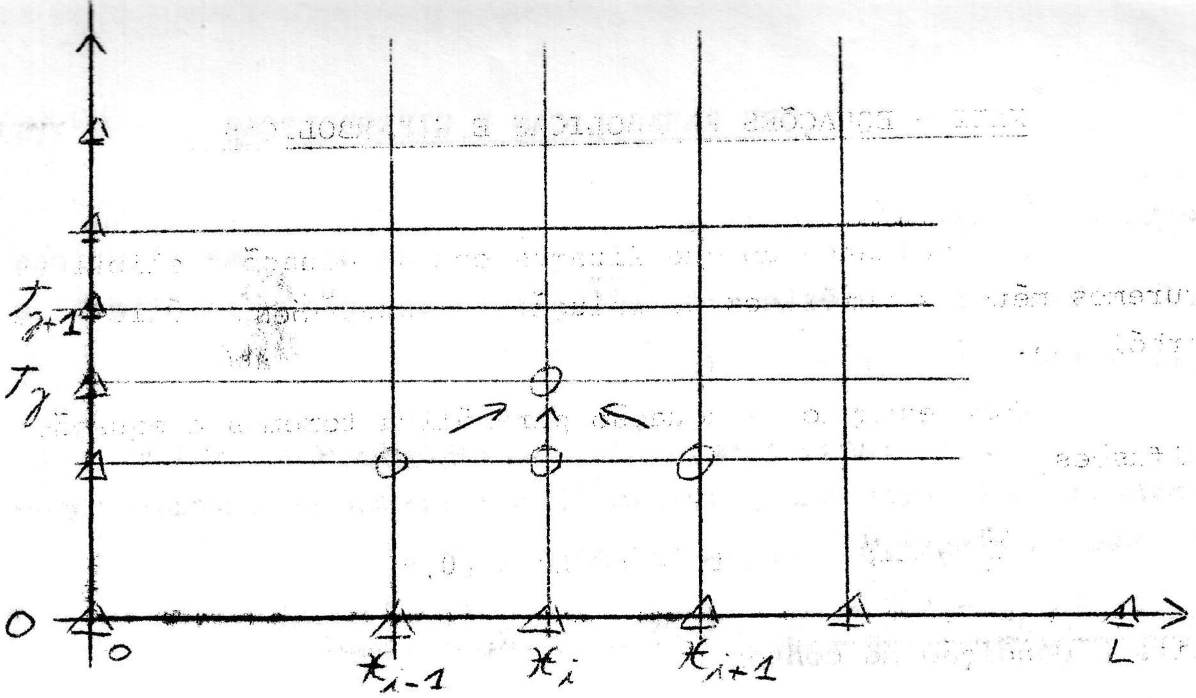
teremos a equação

$$\frac{\theta_{i,j+1} - \theta_{ij}}{h'} = \frac{\theta_{i+1,j} - \partial\,\theta_{ij} + \theta_{i-1,j}}{h^2}$$

ou, tomando $\alpha = h/h'2$

$$\theta_{i,j+1} = \alpha\theta_{i+1,j} + (1-2\alpha)\,\theta_{ij} + \alpha\theta_{i-1,j}$$

equação esta que nos permite calcular θ_{ij} para todos os pontos interiores da malha



Analisemos agora quaõ bem a equação de diferenças aproxima a equação diferencial sejam os operadores

$$L\,[\theta] = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} - \frac{\partial\theta}{\partial t} \quad , \quad \text{e}$$

$$L_h[\theta] = \frac{1}{h^2}\{\theta_{i-1,j} - \alpha\theta_{ij} + \theta_{i+1,j} + \frac{1}{\alpha}(\theta_{i,j+1} - \theta_{ij})\}$$

$$R_h[\theta] = L_h\,[\theta] - L\,[\theta]$$

Usando a série de Taylor de $\theta(x,y)$ em torno do ponto M_{ij}, até $5^{\underline{a}}$ ordem, temos

$$L_h[\theta] = \{ \left(\left.\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}\right|_{ij} - \left.\frac{\partial\theta}{\partial t}\right|_{ij}\right) + h^2 \left(\frac{1}{12}\left.\frac{\partial^4\theta}{\partial x^4}\right|_{ij} + \right.$$

$$\left. + \frac{\alpha}{2}\left.\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2}\right|_{ij}\right) + h^4 \left(\frac{1}{360}\left.\frac{\partial^6\theta}{\partial x^6}\right|_{ij} - \frac{\alpha^2}{6}\left.\frac{\partial^3\theta}{\partial t^3}\right|_{ij}\right) + O(h^6)\},$$

$$L\,[\theta] = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} - \frac{\partial\theta}{\partial t} = 0, \quad \text{bem como} \quad L^2\,[\theta] = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^4} - \frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} = 0$$

Se escolhermos $\alpha = 1/6$ teremos

$$R_h\,[\theta]_{ij} = O(h^4)$$

e a equação de diferenças toma a forma

$$\theta_{i,j+1} = \frac{1}{6}(\theta_{i-1,j} + 4\,\theta_{ij} + \theta_{i+1,j})$$

Como exemplo de equação hiperbólica estudemos a equação de onda

$$\frac{\partial^2\lambda}{\partial t^2} = \frac{\partial^2\lambda}{\partial x^2} \quad , \quad (x,t) \in [0,L] \times [0,\infty[$$

sujeita a condição de contorno

$$\lambda(x,0) = F(x) \quad \vdots \quad \lambda(0,t) = \phi(t)$$

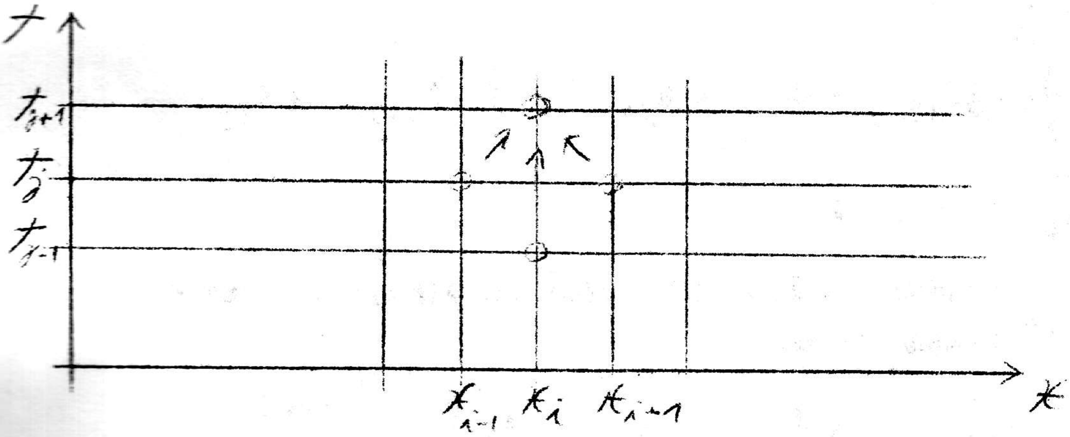
$$\lambda'(x,0) = f(x) \quad \vdots \quad \lambda(L,t) = \psi(t)$$

Considerando a malha M_{ij} de espaçamento $h = L/n$ e a aproximação das derivadas parciais já utilizadas no exemplo anterior resulta a equação de diferenças

$$\frac{\lambda_{i,j-1} - \partial\,\lambda_{ij} + \lambda_{i,j+1}}{h^2} = \frac{\lambda_{i-1,j} = \partial\,\lambda_{ij} + \lambda_{i+1,j}}{h^2}$$

ou

$$\lambda_{i,j+1} = \lambda_{i+1,j} + \lambda_{i-1,j} - \lambda_{i,j-1}$$



Equação que pode ser utilizada, juntamente com as condições de contorno que nos fornecem $\lambda_{0,j}$, $\lambda_{n,j}$ e $\lambda_{i,0}$, para calcular λ nos pontos interiores da malha com escerção dos pontos $M_{i,1}$ que devem ser previamente calculados

Para tanto tomaremos a aproximação

$$\lambda_{i,j} \sim \lambda_{i,0} + h \left.\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right|_{i0} + \frac{h^2}{2} \left.\frac{\partial^2\lambda}{\partial t^2}\right|_{i,0}$$

$$= F_i + h\,f_i + \frac{h^2}{2} \left.\frac{\partial^2\lambda}{\partial x^2}\right|_{i,0}$$

$$= F_i + h\,f_i + \frac{h^2}{2}\,F''_i$$

$$\sim F_i + h\,f_i + \frac{h^2}{2}\,\frac{F_{i-1} - 2F_i + F_{i+1}}{h^2}$$

$$= \frac{1}{2}\,(F_{i-1} + F_{i+1}) + h\,f_i$$