4- Método de Diferenças Finitas Aplicado às Equações Diferenciais Parciais.

4.1- Aproximação de Funções.

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

4.2- Derivadas e Integrais Numéricas.

4.3- Solução de Equações Diferenciais Ordinárias.

4.3- Solução de Equações Diferenciais Parciais.

4.1- Aproximação de Funções

Muitos vezes é útil aproximar funções desconhecidas por outras funções conhecidas (em geral, simples). Isto permite:

1- aproximar os dados de uma tabela à uma função desconhecida. Ou seja, fazer corresponder a estes dados uma função desconhecida representada por funções conhecidas simples (Ajuste de Dados).

2- ter uma aproximação relativamente simples das derivadas e integrais das funções desconhecidas e portanto resolver equações que envolvem a função desconhecida, suas derivadas e integrais (Equações Integro-Diferenciais).

Entre as funções conhecidas simples destacamos os polinômios e as funções trigonométricas.

4.1- Aproximação de Funções

Para iniciar estudaremos o problema de aproximar funções desconhecidas por polinômios.

1- aproximar os dados de uma tabela à uma função desconhecida. Ou seja, fazer corresponder a estes dados uma função desconhecida representada (aproximada) por polinômios (Ajuste de Dados).

Por que polinômios?

Pela simplicidade e pela quantidade de resultados teóricos disponíveis (álgebra) sobre polinômios. Podemos dizer que os polinômios são amplamente usados em todas as áreas da análise numérica.

Entre as varias técnicas de aproximação que existem destacamos a interpolação por polinômios.

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

Algumas formas de representar um polinômio de grau *n*:

1- forma tradicional: $p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x^1 + a_0$

Esta forma é muito útil para a análise matemática, mas para a análise numérica pode não ser muito conveniente quando comparada com outras formas.

2- expansão de Taylor:

$$p_n(x) = p_n(x_0) + \frac{dp_n(x_0)}{dx}(x - x_0) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 p_n(x_0)}{dx^2}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\frac{d^n p_n(x_0)}{dx^n}(x - x_0)^n$$

Muito útil para encontrar formulas que aproximem as derivadas das funções (derivadas numéricas)

3- forma de Newton:

$$p_n(x) = b_0 + b_1(x - x_1) + b_2(x - x_1)(x - x_2) + \cdots + b_n(x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_n)$$

Muito útil no problema da interpolação.

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

4- forma de Lagrange: $p_n(x) = c_1 l_1(x) + c_2 l_2(x) + \cdots + c_n l_n(x)$

com $l_k(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$ e $k = 1, \cdots, n.$ Note que $l_k(x_i) = \delta_{ik}.$ Muito usada em elementos finitos.

Dois resultados importantes:

Lema: Sejam $x_1, x_2, \cdots, x_k$ diferentes zeros de um polinômio $p_n(x)$ com $(k \leq n)$, então $p_n(x) = (x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_k)\, r_{n-k}(x)$ para algum polinômio $r_{n-k}(x)$.

Corolário: Se $p_n(x)$ e $q_n(x)$ são dois polinômios de graus $n \leq k$ que coincidem em (*k+1*) pontos diferentes $x_1, x_2, \cdots, x_k, x_{k+1}$ (ou seja $p_n(x_i) = q_n(x_i) \;\; \forall i = 1, \cdots, k+1$), então estes polinômios são idênticos $p_n(x) = q_n(x) \;\; \forall x$.

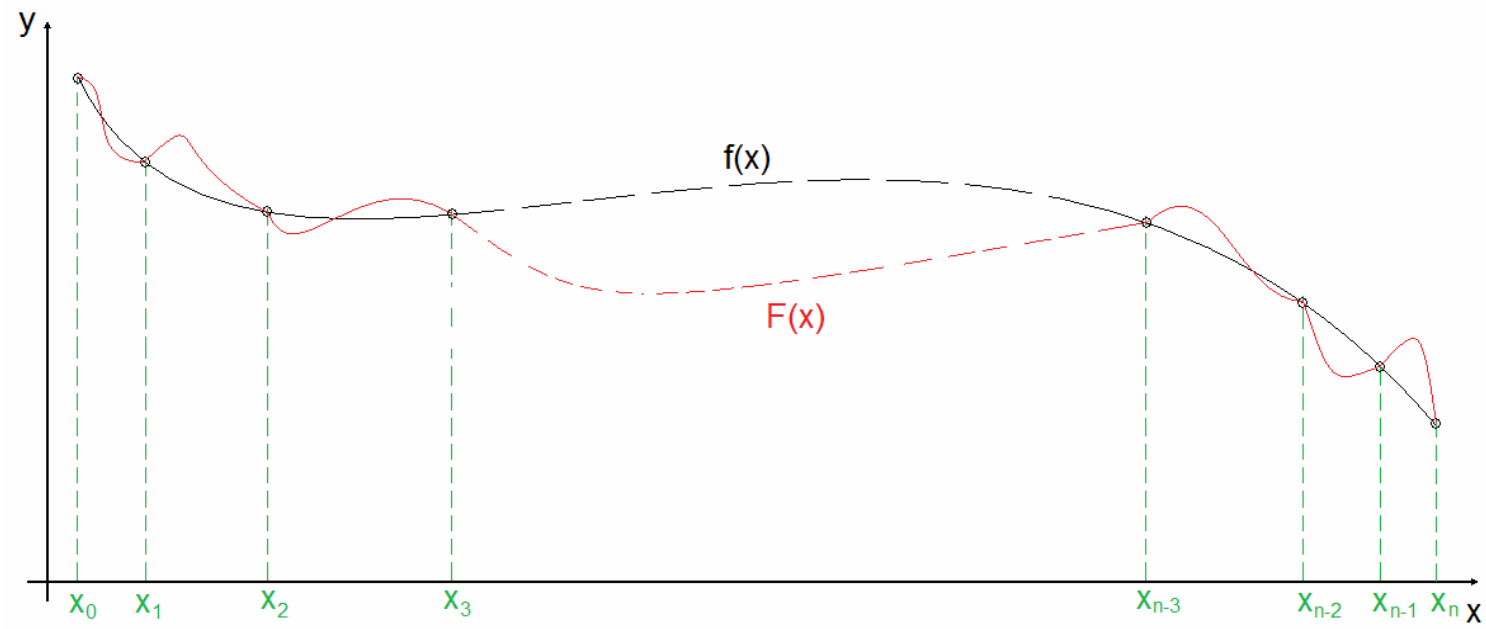
Note que este corolário garante a unicidade do polinômio de grau menor ou igual a *k* que assume (*k+1*) valores específicos.

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

Em que consiste o problema da Interpolação?

Num intervalo [a,b] são especificados (*n+1*) pontos diferentes (pontos de interpolação $x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n$) e os valores da função $f(x)$ (desconhecida) nestes pontos $f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n)$.

Se pede construir uma função $F(x)$ que pertença a uma classe de funções conhecidas e que assume os mesmos valores de $f(x)$ nos pontos de interpolação. Ou seja, $F(x_i) = f(x_i) \;\; \forall i = 0, \cdots, n$.



4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

Note que existem infinitas funções $F(x)$ que passam pelos pontos de interpolação. Entretanto, se escolhemos como função $F(x) = p_n(x)$ um polinômio de grau *n*, então apenas existe um polinômio que passa pelos pontos de interpolação.

Esta função de interpolação $p_n(x)$ permite estimar o valor da função $f(x)$ para valores de *x* diferentes dos pontos de interpolação.

Teorema: Dada uma função real $f(x)$ em (*n*+*1*) pontos de interpolação, existe apenas um único polinômio de grau $\leq n$ que interpola esta função.

Formula de Interpolação de Lagrange:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k l_k(x) \Rightarrow p_n(x_i) = \sum_{k=0}^{n} c_k l_k(x_i) = \sum_{k=0}^{n} c_k \delta_{ik} = c_i \quad \text{e se} \quad c_i = f(x_i)$$

o polinômio de interpolação de Lagrange é $p_n(x) = L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)$

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

Erro absoluto para a interpolação de Lagrange:

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x)$$

$$|R_n(x)| = |f(x) - L_n(x)| \leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{x \in [a,b]} \left| \frac{d^{n+1} f(x)}{dx^{n+1}} \right| \left| \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right|$$

Formula de Interpolação de Newton:

$$p_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + b_n(x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_{n-1})$$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} b_i \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \text{ onde } b_i \text{ são os cocientes das diferenças em } x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n$$

$$b_0 = f(x_0),\; b_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0},\; b_2 = \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{2!(x_2 - x_1)(x_1 - x_0)},$$

$$b_3 = \frac{f(x_3) - 3f(x_2) + 3f(x_1) - f(x_0)}{3!(x_3 - x_2)(x_2 - x_1)(x_1 - x_0)} \text{ e assim sucessivamente.}$$

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

Exemplo: Encontre o polinômio de interpolação de Lagrange para a função $f(x) = \sqrt{x}$ nos pontos de interpolação abaixo. Estime o erro no calculo de $\sqrt{115}$.

$$(x_0 = 100, y_0 = 10), (x_1 = 121, y_1 = 11), (x_2 = 144, y_2 = 12).$$

$$\left.\begin{array}{l}\text{Polinômio de interpolação de Lagrange} \\ \text{para n} + 1 \text{ pontos de interpolação}\end{array}\right\} p_n(x) = L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)$$

$$\text{com } l_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}, \quad (k = 0, \cdots, n) \text{ e } l_k(x_i) = \delta_{ik}.$$

Temos 3 pontos de interpolação $\text{n} + 1 = 3 \Rightarrow \text{n} = 2$. Logo $L_2(x) = \sum_{k=0}^{2} f(x_k) l_k(x)$

Sabemos que $f(x_0) = y_0$, $f(x_1) = y_1$ e $f(x_2) = y_2$.

$$l_0(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq 0}}^{2} \frac{(x - x_i)}{(x_0 - x_i)} = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} \frac{(x - x_2)}{(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 121)}{(100 - 121)} \frac{(x - 144)}{(100 - 144)} = \frac{(x - 121)}{21} \frac{(x - 144)}{44}$$

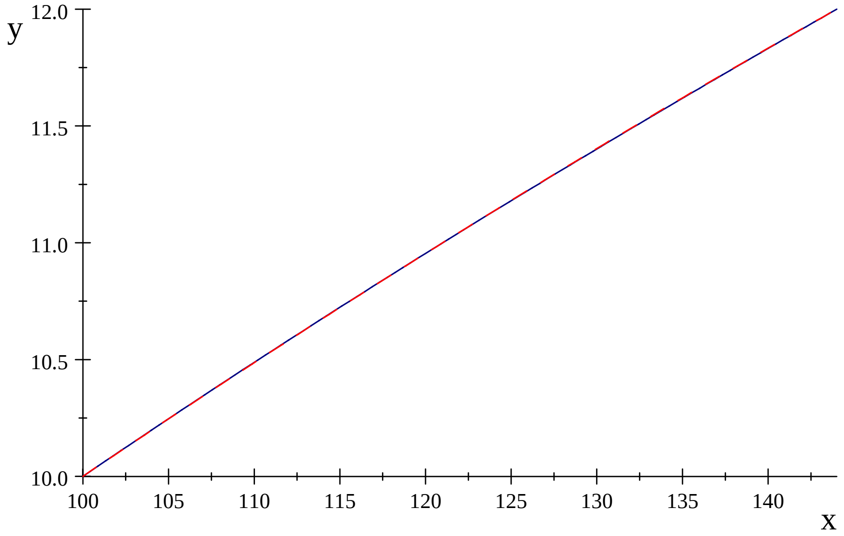
4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

$$l_1(x)=\prod_{\substack{i=0\\i\neq 1}}^{2}\frac{(x-x_i)}{(x_1-x_i)}=\frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}\frac{(x-x_2)}{(x_1-x_2)}=\frac{(x-100)}{(121-100)}\frac{(x-144)}{(121-144)}=\frac{(x-100)}{21}\frac{(x-144)}{(-23)}$$

$$l_2(x)=\prod_{\substack{i=0\\i\neq 2}}^{2}\frac{(x-x_i)}{(x_2-x_i)}=\frac{(x-x_0)}{(x_2-x_0)}\frac{(x-x_1)}{(x_2-x_1)}=\frac{(x-100)}{(144-100)}\frac{(x-121)}{(144-121)}=\frac{(x-100)}{44}\frac{(x-121)}{23}$$

$$\text{Logo } L_2(x)=\sum_{k=0}^{2}f(x_k)l_k(x)=10l_0(x)+11l_1(x)+12l_2(x)$$

$$L_2(x)=10\frac{(x-121)}{21}\frac{(x-144)}{44}+11\frac{(x-100)}{21}\frac{(x-144)}{(-23)}+12\frac{(x-100)}{44}\frac{(x-121)}{23}$$



Vermelho função

Azul polinômio de interpolação

4.1.1- Aproximação por Polinômios: Interpolação.

Estimação do erro no ponto $x = 115$.

$$f(x) = \sqrt{x}, \quad \frac{df}{dx} = \frac{1}{2}(x)^{-\frac{1}{2}}, \quad \frac{d^2 f}{dx^2} = -\frac{1}{4}(x)^{-\frac{3}{2}} \text{ e } \frac{d^3 f}{dx^3} = \frac{3}{8}(x)^{-\frac{5}{2}}$$

Como $R_n(x) = f(x) - L_n(x)$ segue $R_2(x) = f(x) - L_2(x)$

$$\left|R_n(x)\right| = \left|f(x) - L_n(x)\right| \leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{x\in[a,b]} \left|\frac{d^{n+1} f(x)}{dx^{n+1}}\right| \left|\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right| \text{ e para } n = 2 \text{ segue}$$

$$\left|R_2(x)\right| = \left|f(x) - L_2(x)\right| \leq \frac{1}{(2+1)!} \max_{x\in[a,b]} \left|\frac{d^3 f(x)}{dx^3}\right| \left|\prod_{i=0}^{2}(x - x_i)\right|$$

Como $\max_{x\in[a,b]} \left|\frac{d^3 f(x)}{dx^3}\right| = \max_{x\in[100,144]} \left|\frac{3}{8}\frac{1}{\sqrt{x^5}}\right| = \frac{3}{8}\frac{1}{\sqrt{100^5}} = \frac{3}{8}10^{-5}$

$$\left|\prod_{i=0}^{2}(x - x_i)\right| = \left|(115-100)(115-121)(115-144)\right| = \left|15*6*29\right| = 2610$$

$$\left|R_2(115)\right| \leq \frac{1}{6}\frac{3}{8}10^{-5}\ 2610 = 1{,}6 10^{-3} \quad \text{e} \quad \frac{\left|R_2(115)\right|}{\left|f(115)\right|} \leq 1{,}5 10^{-4}$$

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

Em que consiste o ajuste de dados?

Dado um conjunto de *n* pontos ($(x_i, f(x_i))$ com $i = 1, \cdots, n$). Aproximar estes dados por uma função $F(x)$ tal que o erro entre os dados e esta função seja o menor possível (erro minimizado).

Para isto se assume que a função $F(x)$ depende de um número de parâmetros livres $F(x, \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k)$ com $k < n$. Em geral, a dependência da função $F(x)$ com os parâmetros livres é escolhida linear: $F(x) = \lambda_1 \phi_1(x) + \lambda_2 \phi_2(x) + \cdots + \lambda_k \phi_k(x)$. O conjunto de funções $\{\phi_i\}$ são escolhidas a priori (conhecidas) e os parâmetros livres devem ser determinados.

O problema consiste em determinar os parâmetros livres de forma que a distancia entre os dados e a função $F(x)$ seja a menor possível.

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

Entre as varias normas que induzem as métricas (distancias) destacamos a norma euclidiana num espaço de dimensão *n*.

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} (x_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Para esta norma o problema de encontrar os parâmetros livres é conhecido como aproximação por Mínimos Quadrados.

$$\left(\|\mathbf{e}\|_2\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(f(x_i) - F(x_i, \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k) \right)^2, \text{ onde}$$

$$\mathbf{e} = [e_1, e_2, \cdots, e_n]^{\mathrm{T}} \quad \text{e} \quad e_i = f(x_i) - F(x_i, \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k)$$

Para que exista um mínimo desta função é necessário que:

$$\frac{\partial \left(\|\mathbf{e}\|_2\right)^2}{\partial \lambda_j} = 0 \qquad \forall\, j = 1, \cdots, k$$

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

Ou seja,

$$0=\frac{\partial\left(\left\|\mathbf{e}\right\|_2\right)^2}{\partial\lambda_j}=\frac{\partial\left(\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i)-F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)\right)^2\right)}{\partial\lambda_j}=$$

$$2\left(\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i)-F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)\right)\right)\frac{\partial\left(F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)\right)}{\partial\lambda_j}\quad\forall\, j=1,\cdots,k$$

Como $\frac{\partial\left(F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)\right)}{\partial\lambda_j}=\frac{\partial\left(\lambda_1\phi_1(x_i)+\lambda_2\phi_2(x_i)+\cdots+\lambda_k\phi_k(x_i)\right)}{\partial\lambda_j}=\phi_j(x_i)$

Logo $\left(\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i)-F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)\right)\right)\phi_j(x_i)=0\quad\forall\, j=1,\cdots,k\quad$ ou

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i)-\underbrace{\sum_{m=1}^{k}\lambda_m\phi_m(x_i)}_{F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)}\right)\right)\phi_j(x_i)=0\quad\forall\, j=1,\cdots,k$$

E chegamos a um Sistema Linear de Equações Algébricas.

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

O sistema linear de equações algébricas de ordem *kxk* é

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i)-\underbrace{\sum_{m=1}^{k}\lambda_m\phi_m(x_i)}_{F(x_i,\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k)}\right)\right)\phi_j(x_i)=0 \quad \forall\, j=1,\cdots,k \quad \text{ou}$$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{m=1}^{k}\lambda_m\phi_m(x_i)\phi_j(x_i)=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)\phi_j(x_i) \quad \forall\, j=1,\cdots,k \quad \text{ou}$$

$$\sum_{m=1}^{k}\lambda_m\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\phi_m(x_i)\phi_j(x_i)}_{a_{jm}}=\underbrace{\sum_{i=1}^{n}f(x_i)\phi_j(x_i)}_{b_j} \quad \forall\, j=1,\cdots,k \quad \text{ou}$$

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{b} \quad \text{onde } \mathbf{A}_{k\times k}=\left[a_{jm}\right],\ \boldsymbol{\lambda}=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k]^{\mathbf{T}},\ \ \mathbf{b}=[b_1,b_2,\cdots,b_k]^{\mathbf{T}}$$

$$a_{jm}=\sum_{i=1}^{n}\phi_m(x_i)\phi_j(x_i),\ \ b_j=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)\phi_j(x_i)$$

Note que a matriz $\mathbf{A}$ é simétrica.

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

Exemplo: Dado o conjunto de dados abaixo encontrar o polinômio $F(x)$ que aproxima estes dados por mínimos quadrados com o conjunto de funções $\{\phi_j(x)\} = \{1, x, x^2\}$.

xi	0	1/2	1	3/2	2
f(xi)	0	$\sqrt{1/2}$	1	$\sqrt{3/2}$	$\sqrt{2}$

Neste caso *k=3* e $F(x) = \lambda_1\phi_1(x) + \lambda_2\phi_2(x) + \lambda_3\phi_3(x) = \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 x^2$

$$\mathbf{A\lambda} = \mathbf{b} \quad \text{onde } \mathbf{A}_{k\times k} = \left[a_{jm}\right], \boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k]^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{b} = [b_1, b_2, \cdots, b_k]^{\mathrm{T}}$$

$$a_{jm} = \sum_{i=1}^{n} \phi_m(x_i)\phi_j(x_i), \quad b_j = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\phi_j(x_i)$$

$$a_{11} = \sum_{i=1}^{5} \phi_1(x_i)\phi_1(x_i) = \sum_{i=1}^{5} 1 = 5 \quad a_{12} = a_{21} = \sum_{i=1}^{5} 1 x_i = 5 \quad a_{13} = a_{31} = \sum_{i=1}^{5} 1(x_i)^2 = 7,5$$

$$a_{22} = \sum_{i=1}^{5} \phi_2(x_i)\phi_2(x_i) = \sum_{i=1}^{5} (x_i)^2 = a_{31} \quad a_{23} = \sum_{i=1}^{5} \phi_2(x_i)\phi_3(x_i) = \sum_{i=1}^{5} (x_i)^3 = \frac{100}{8} = 12,5$$

$$a_{33} = \sum_{i=1}^{5} \phi_3(x_i)\phi_3(x_i) = \sum_{i=1}^{5} (x_i)^4 = 22,125$$

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

Exemplo: Dado o conjunto de dados abaixo encontrar o polinômio $F(x)$ que aproxima estes dados por mínimos quadrados com o conjunto de funções $\{\phi_j(x)\} = \{1, x, x^2\}$.

xi	0	1/2	1	3/2	2
f(xi)	0	$\sqrt{1/2}$	1	$\sqrt{3/2}$	$\sqrt{2}$

Neste caso *k=3* e $F(x) = \lambda_1\phi_1(x) + \lambda_2\phi_2(x) + \lambda_3\phi_3(x) = \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 x^2$

$$\mathbf{A\lambda} = \mathbf{b} \quad \text{onde } \mathbf{A}_{k\times k} = \left[a_{jm}\right], \boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k]^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{b} = [b_1, b_2, \cdots, b_k]^{\mathrm{T}}$$

$$a_{jm} = \sum_{i=1}^{n} \phi_m(x_i)\phi_j(x_i), \quad b_j = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\phi_j(x_i)$$

$$b_1 = \sum_{i=1}^{5} f(x_i)\phi_1(x_i) = \sum_{i=1}^{5} f(x_i) \approx 4{,}34606521$$

$$b_2 = \sum_{i=1}^{5} f(x_i)\phi_2(x_i) = \sum_{i=1}^{5} f(x_i)x_i \approx 6{,}019098$$

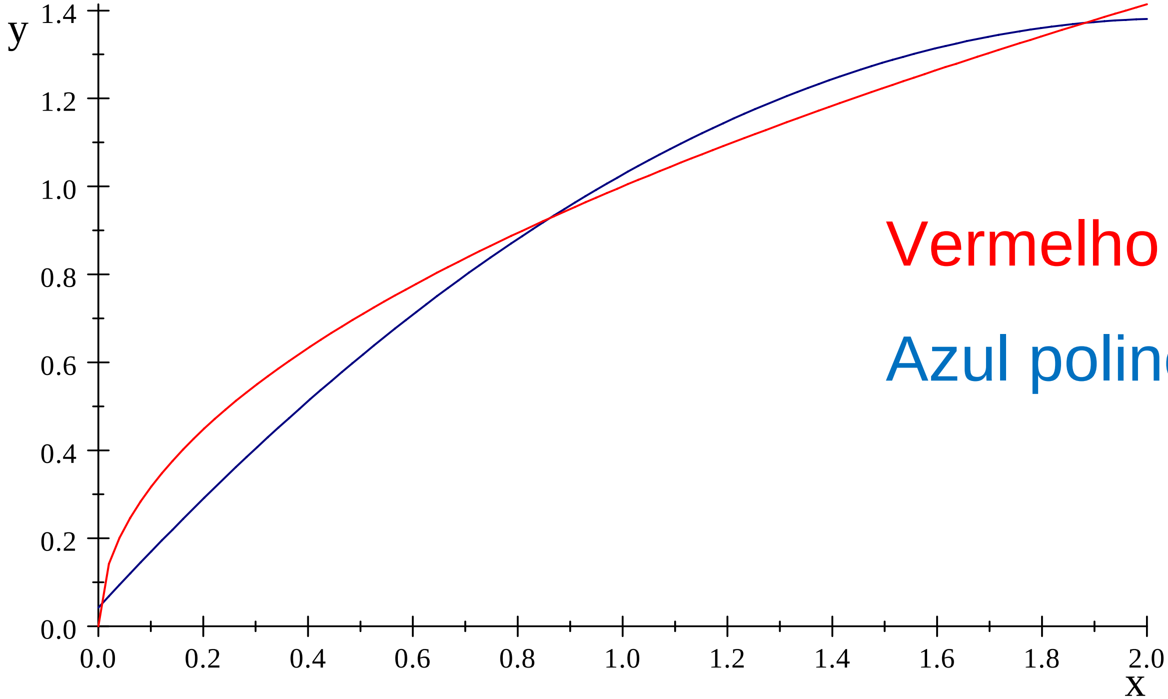
$$b_3 = \sum_{i=1}^{5} f(x_i)\phi_3(x_i) = \sum_{i=1}^{5} f(x_i)(x_i)^2 \approx 9{,}589307$$

4.1.2- Ajuste de Dados: Mínimos Quadrados.

Logo

$$\mathbf{A\lambda = b} \quad \Rightarrow \begin{bmatrix} 5 & 5 & 7,5 \\ 5 & 7,5 & 12,5 \\ 7,5 & 12,5 & 22,125 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4,346065 \\ 6,019098 \\ 9,589307 \end{bmatrix} \qquad \begin{cases} \lambda_1 = 0.0423677, \\ \lambda_2 = 1.29974, \\ \lambda_3 = -0.315264 \end{cases}$$

$$F(x) = 0.0423677 + 1.29974\,x - 0.315264\,x^2$$



Vermelho função raiz quadrada

Azul polinômio de Aproximação

Frase do Dia

"As the construction of the universe is the most perfect possible, being the handiwork of an all-wise Maker, nothing can be met with in the world in which some maximal and minimal property is not displayed. There is, consequently, no doubt but that all the effects of the world can be derived by the method of maxima and minima from their final causes as well as from their efficient ones."

Leonhard Euler