

CCI-22



## Matemática Computacional

CCI-22

## 8) Equações Diferenciais

Métodos de Euler, Séries de Taylor, Runge-Kutta, Adams-Bashforth, Adams-Moulton, Diferenças Finitas

CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Definições

- Grande parte dos fenômenos físicos é modelada com equações diferenciais, isto é, envolvem uma função desconhecida e algumas de suas derivadas
- Forma geral de uma equação diferencial com derivadas até a ordem n:  
$$y^{(n)}(x) = f(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n-1)}(x)), \text{ onde } a \leq x \leq b$$
- A solução desta equação diferencial é qualquer função  $y(x)$  que a satisfaça, definida em  $[a,b]$  e com n derivadas nesse intervalo
- Quando  $y$  é função de uma única variável  $x$ , é chamada de *Equação Diferencial Ordinária*
- Uma equação que envolve mais de uma variável independente, junto com suas derivadas parciais, chama-se *Equação Diferencial Parcial*

## Condições iniciais e linearidade

- A resolução de uma equação diferencial geralmente tem como resposta uma família de curvas
- Exemplo:
  - $y' = 2x + 3$
  - $\int y'dx = \int (2x+3)dx \Rightarrow y = x^2 + 3x + c$
- Para especificar uma dessas curvas, é preciso impor condições iniciais à função  $y$ :
  - $y(t_1) = k_1; y'(t_2) = k_2; \dots; y^{(n-1)}(t_{n-1}) = k_{n-1}$
- Exemplo:
  - $y'' = -(1-y^2)y' - y; y(0) = 1; y'(0) = 2$
- Uma equação diferencial ordinária é linear se a função  $y$  e suas derivadas possuem uma relação linear entre si
- Exemplo:
  - $xy' = x - y$  É linear
  - $y'' + (1 - y^2)y' + y = 0$  Não é linear

## PVI e PVC

- A ordem de uma equação diferencial é a mais alta ordem de derivação que aparece nela
- De modo geral, para individualizar a solução de uma equação diferencial de ordem  $m$ , são necessárias  $m$  condições adicionais
- Dada uma equação diferencial de ordem  $m > 1$ , se a função e suas derivadas até a ordem  $m-1$  são especificadas em um mesmo ponto, então temos um *Problema de Valor Inicial (PVI)*
- Exemplo onde  $m=3$ :
  - $y''' + (x+1)y'' + \cos(xy') - (x^2-1)y = x^2 + y^2 \sin(x+y)$
  - $y(0)=1,1; y'(0)=2,2; y''(0)=3,3$
- Se as  $m$  condições adicionais não são dadas em um mesmo ponto, então temos um *Problema de Valor de Contorno (PVC)*
- Exemplo (barra de comprimento  $L$  sujeita a uma carga uniforme  $q$ ):
  - $y^{(4)}(x) + ky(x) = q$  k é uma constante que depende do material da barra
  - $y(0) = y'(0) = 0; y(L) = y''(L) = 0$
- Ao contrário de um PVI, é comum que um PVC não tenha unicidade de solução

## CCI-22

- Definições
- **Problemas de Valor Inicial (PVI)**
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Problemas de Valor Inicial

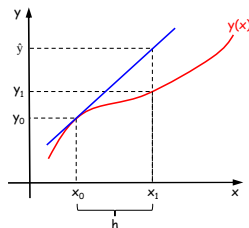
- Embora haja garantia teórica da resolução analítica de um PVI, essa solução costuma ser de difícil obtenção: por isso, utilizam-se métodos numéricos
- Dado o PVI  $y' = f(x,y)$ , onde  $y(x_0) = y_0$ , construímos  $x_1, x_2, \dots, x_n$  igualmente espaçados (embora não seja uma condição necessária), e calculamos as aproximações  $y_i \approx y(x_i)$  nesses pontos
- Se no cálculo de  $y_{i+1}$  usarmos apenas  $y_i$ , teremos então um *método de passo simples* (ou passo um); se usarmos outros valores  $y_j, j \leq i$ , teremos um *método de passo múltiplo*
- Características dos métodos de passo simples:
  - Geralmente, é preciso calcular  $f(x,y)$  e suas derivadas em muitos pontos
  - Temos dificuldades em estimar o erro do resultado

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - **Métodos de passo simples**
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - **Métodos de passo múltiplo**
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Método de Euler

- Vamos resolver a equação diferencial ordinária de primeira ordem  $y' = f(x,y)$ , sujeita à condição inicial  $y(x_0) = y_0$ :



$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{(x_0, y_0)} = f(x_0, y_0) \Rightarrow \frac{y - y_0}{x - x_0} = f(x_0, y_0)$$

- Equação da reta, onde  $h = x_1 - x_0$ :
  - $\hat{y} = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$
- Quando  $h$  tende a zero,  $\hat{y}$  tende a  $y_1$ :
  - $y_1 \approx y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$

- Generalizando, temos a expressão do Método de Euler:

$$y_{i+1} \approx y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$$

## Método de Euler

- A expressão do Método de Euler pode ser deduzida de um outro modo
- Sabemos que  $y'(x) \approx [y(x+h) - y(x)]/h$ , onde  $h$  é algum valor pequeno, mas não fixo
- Dividamos  $[a,b]$ , onde  $a=x_0$  e  $b=x_n$ , em subintervalos de tamanho  $h$ :
  - $x_i = x_0 + h \cdot i$ , com  $0 \leq i \leq n$
- Seja  $y_i, 0 \leq i \leq n$ , uma aproximação para  $y(x_i)$ , onde  $y(x)$  é uma solução de  $y'(x) = f(x,y)$
- Portanto:
  - $y'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_i)/h$
  - $y_{i+1} \approx y_i + h \cdot y'(x_i)$
  - $y_{i+1} \approx y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$

## Exemplo

- Considerando  $y$  como função de  $x$ , resolver  $y' = 2x + 3$  no intervalo  $1 \leq x \leq 1,5$ , quando  $y(1) = 1$

- Pelo Método de Euler, temos:

- $y_{i+1} \approx y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$
- $y_{i+1} \approx y_i + h \cdot (2x_i + 3)$

- Considerando  $h = 0,1$ :

$x_0 = 1,0$	$x_1 = 1,1$	$x_2 = 1,2$	$x_3 = 1,3$	$x_4 = 1,4$	$x_5 = 1,5$
$y_0 = 1,0$	$y_1 = 1,5$	$y_2 = 2,02$	$y_3 = 2,56$	$y_4 = 3,12$	$y_5 = 3,70$

- Considerando  $h = 0,01$ :

$x_0 = 1,00$	$x_{10} = 1,10$	$x_{20} = 1,20$	$x_{30} = 1,30$	$x_{40} = 1,40$	$x_{50} = 1,50$
$y_0 = 1,0$	$y_{10} = 1,509$	$y_{20} = 2,038$	$y_{30} = 2,587$	$y_{40} = 3,156$	$y_{50} = 3,747$

- As mudanças não foram muito grandes. Veremos depois uma estimativa para os erros cometidos

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Métodos de série de Taylor

- Suponhamos que, de alguma maneira, estejam disponíveis as aproximações  $y_1, y_2, \dots, y_n$  para  $y(x)$  em  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , respectivamente

- A série de Taylor de  $k$ -ésima ordem de  $y(x)$  em torno de  $x = x_i$  é

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2!}(x - x_i)^2 + \dots + \frac{y^{(k)}(x_i)}{k!}(x - x_i)^k + E_T$$

onde  $E_T = \frac{y^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}(x - x_i)^{k+1}$

- Sendo  $x_{i+1} = x_i + h$ , podemos obter a seguinte aproximação para  $y_{i+1} = y(x_{i+1})$ :

$$y_{i+1} \approx y_i + y'_i h + y''_i \frac{h^2}{2} + \dots + y^{(k)}_i \frac{h^k}{k!}$$

- É fácil verificar que a série de Taylor de 1ª ordem é equivalente ao Método de Euler:  $y_{i+1} \approx y_i + y'_i h$

## Métodos de série de Taylor

- Para se encontrar as séries de Taylor de ordens mais altas, será preciso calcular os valores de  $y''(x), y'''(x), \dots, y^{(k)}(x)$
- Considerando  $y'(x) = f(x, y(x))$ , vamos calcular  $y''(x)$ :
  - $y'(x) = f(x, y(x))$
  - $y''(x) = f_{xx}(x, y(x)) + f_{xy}(x, y(x)) \cdot y'(x)$ , onde  $f_x$  e  $f_y$  são as derivadas parciais de  $f$  em relação a  $x$  e a  $y$ , respectivamente
  - $y' = f_x + f_y \cdot f$
- Desse modo, a série de Taylor de 2ª ordem é
 
$$y_{i+1} \approx y_i + h \cdot f(x_i, y_i) + h^2 [f_{xx}(x_i, y_i) + f_{yy}(x_i, y_i) \cdot f(x_i, y_i)] / 2$$
- Vamos calcular agora  $y'''(x)$ :
  - $y''(x) = f_{xx}(x, y(x)) + f_{xy}(x, y(x)) \cdot y'(x) + [f_{yx}(x, y(x)) + f_{yy}(x, y(x)) \cdot y'(x)] \cdot y'(x) + f_{yy}(x, y(x)) \cdot y''(x)$
  - $y''' = f_{xxx} + f_{xyy} \cdot f + f_{yxx} \cdot f + f_{yyx} \cdot f^2 + f_{yy}(f_x + f_y \cdot f)$
  - $y''' = f_{xxx} + 2f_{xyy} \cdot f + f_{yyx} \cdot f^2 + f_{yy} \cdot f_x + f_y^2 \cdot f$
- É possível perceber como se torna difícil o cálculo de derivadas mais altas. Isso é feito somente quando  $y'(x)$  tem uma expressão simples...

## Exemplo

- Usando a série de Taylor de 2ª ordem, calcular  $y(2,1)$ , onde  $xy' = x-y$  e  $y(2)=2$ 
  - $xy' = x-y \Leftrightarrow y' = (x-y)/x \Leftrightarrow y' = 1 - y/x$
  - $y'(2) = 1 - 2/2 = 0$
  - $y'' = -y'/x + y/x^2$
  - $y''(2) = 0/2 + 2/2^2 = 1/2$
  - Série de Taylor de 2ª ordem:
    - $y(x) \approx y(2) + (x-2)y'(2) + (x-2)^2y''(2)/2$
    - $y(x) \approx 2 + (x-2)^2/4$
  - $y(2,1) \approx 2 + (0,1)^2/4 = 2,0025$

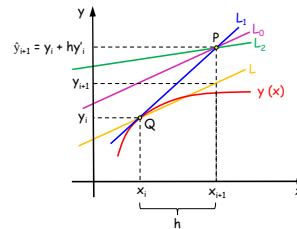
## Exemplo

- Dado que  $y' = x-y$  e  $y(0)=2$ , determinar  $y(0,2)$  e  $y(0,4)$  utilizando série de Taylor de 4ª ordem
  - Vamos considerar  $h = 0,2$
  - $y'(0) = 0 - 2 = -2$
  - $y'' = 1 - y' \Rightarrow y''(0) = 1 - (-2) = 3$
  - $y''' = -y'' \Rightarrow y'''(0) = -3$
  - $y^{(4)} = -y''' \Rightarrow y^{(4)}(0) = 3$
  - Série de Taylor de 4ª ordem:
    - $y_1 = y(0,2) \approx y(0) + h.y'(0) + h^2y''(0)/2 + h^3y'''(0)/6 + h^4y^{(4)}(0)/24$
    - $y_1 \approx 1,6552$
    - $y_2 = y(0,4) \approx y_1 + h.y_1' + h^2y_1''/2 + h^3y_1'''/6 + h^4y_1^{(4)}/24$
    - $y_1' = 0,2 - 1,6552 = -1,4562$
    - $y_1'' = 1 - y_1' = 1 - (-1,4562) = 2,4562$
    - $y_1''' = -y_1'' = -2,4562$
    - $y_1^{(4)} = -y_1''' = 2,4562$
    - Portanto,  $y_2 \approx 1,40995$

## Método de Euler Aperfeiçoado

- Vejamos agora o Método de Euler Aperfeiçoado (também chamado de Método de Heun):

- A reta  $L_1$ , com coeficiente angular  $y'_i = f(x_i, y_i)$ , une os pontos  $Q = (x_i, y_i)$  e  $P = (x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})$ :
  - $L_1: y = y_i + (x-x_i).f(x_i, y_i)$
- Por P, traça-se a reta  $L_2$  com coeficiente angular  $f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})$ :
  - $L_2: y = \hat{y}_{i+1} + (x-x_{i+1}).f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})$
- Por P, traça-se a bissetriz  $L_0$ , isto é, com inclinação média entre  $L_1$  e  $L_2$ :
  - $[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})]/2$
- Por Q, traça-se a reta  $L$  paralela a  $L_0$ :
  - $L: y = y_i + (x-x_i).[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})]/2$
- A partir de  $L$  e de  $x_{i+1}$ , obtém-se o valor de  $y_{i+1}$ :
  - $y_{i+1} = y_i + (x_{i+1}-x_i).[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})]/2$
  - $y_{i+1} = y_i + h[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_i + h.y_i')]/2$
  - $y_{i+1} = y_i + h[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + h.f(x_i, y_i))]/2$



É passo simples

Só calcula  $f(x, y)$

Coincide com um Método de Runge-Kutta de 2ª ordem

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Métodos de Runge-Kutta

- A ideia básica destes métodos é aproveitar as qualidades dos métodos de série de Taylor e, ao mesmo tempo, eliminar sua maior dificuldade de implementação: o cálculo das derivadas de  $f(x,y)$
- Características dos Métodos de Runge-Kutta de ordem  $n$  :
  - 1) São métodos de passo simples
  - 2) Não exigem o cálculo de qualquer derivada de  $f(x,y)$ ; por esse motivo, calculam  $f(x,y)$  em vários pontos
  - 3) Após expandir  $f(x,y)$  por Taylor para função de duas variáveis em torno de  $(x_i, y_i)$  e agrupar os termos semelhantes, sua expressão coincide com a do método de série de Taylor de ordem  $n$
- O Método de Euler (equivalente ao método de série de Taylor de 1ª ordem) é um Método de Runge-Kutta de 1ª ordem, e o Método de Euler Aperfeiçoado é um Método de Runge-Kutta de 2ª ordem

## Runge-Kutta de ordem $n$

- Fórmula geral dos Métodos de Runge-Kutta:
  - $y_{i+1} = y_i + \Phi(x_i, y_i, h)$
- $\Phi(x_i, y_i, h)$  é chamada *função incremento*, e pode ser interpretada como a inclinação no intervalo considerado
- Fórmula geral da função incremento de ordem  $n$  :
  - $\Phi(x_i, y_i, h) = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$
  - $k_3 = f(x_i + p_2 h, y_i + q_{21} k_1 h + q_{22} k_2 h)$
  - ...
  - $k_n = f(x_i + p_{n-1} h, y_i + q_{(n-1)1} k_1 h + \dots + q_{(n-1)(n-1)} k_{n-1} h)$
- $a_i, p_{ij}$  e  $q_{ij}$ : constantes obtidas igualando-se a fórmula geral de Runge-Kutta com os termos da expansão em série de Taylor
- $k_i$ : relações de recorrência (cálculo computacional eficiente)
- Os termos desprezados são de ordem  $O(h^{n+1})$ , o que acarreta um erro global de ordem  $O(h^n)$ , pois  $h < 1$

## Runge-Kutta de 2ª ordem

- A partir dessa definição, o Método de Runge-Kutta de 2ª ordem é  $y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)h$ , onde  $k_1 = f(x_i, y_i)$  e  $k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$
- Expandindo  $k_2$  por Taylor em torno de  $(x_i, y_i)$ :
  - $f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h) = f(x_i, y_i) + p_1 h f_x(x_i, y_i) + q_{11} k_1 h f_y(x_i, y_i) + O(h^2)$
- Substituindo na fórmula de Runge-Kutta:
  - $y_{i+1} = y_i + a_1 k_1 h + a_2 [f(x_i, y_i) + p_1 h f_x(x_i, y_i) + q_{11} k_1 h f_y(x_i, y_i) + O(h^2)]h$
  - $y_{i+1} = y_i + a_1 h f(x_i, y_i) + a_2 h f(x_i, y_i) + a_2 p_1 h^2 f_x(x_i, y_i) + a_2 q_{11} h^2 f_y(x_i, y_i) + O(h^3)$
- Por outro lado, a série de Taylor de 2ª ordem para  $y_{i+1}$  é:
  - $y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + \frac{1}{2} f''(x_i, y_i)h^2 + O(h^3)$
  - $y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + [f_x(x_i, y_i) + f_y(x_i, y_i) f(x_i, y_i)]h^2/2$
  - $y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i) + h^2 f_x(x_i, y_i)/2 + h^2 f_y(x_i, y_i) f(x_i, y_i)/2$
- Desprezando os termos de  $O(h^3)$ , para que ambas expressões sejam iguais, é preciso que:
  - $a_1 + a_2 = 1$
  - $a_2 p_1 = \frac{1}{2}$
  - $a_2 q_{11} = \frac{1}{2}$
- 3 equações e 4 incógnitas: há infinitas soluções

## Runge-Kutta de 2ª ordem

- Há três versões mais utilizadas:  $a_2 = \frac{1}{2}$ ,  $a_2 = 1$  ou  $a_2 = 2/3$
- Método de Heun ( $a_2 = \frac{1}{2}$ ,  $a_1 = \frac{1}{2}$ ,  $p_1 = q_{11} = 1$ ):
  - $y_{i+1} = y_i + (\frac{1}{2} k_1 + \frac{1}{2} k_2)h$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1 h)$
- Método do Ponto Médio ( $a_2 = 1$ ,  $a_1 = 0$ ,  $p_1 = q_{11} = \frac{1}{2}$ ):
  - $y_{i+1} = y_i + k_2 h$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + \frac{1}{2} h, y_i + \frac{1}{2} k_1 h)$
- Método de Ralston ( $a_2 = 2/3$ ,  $a_1 = 1/3$ ,  $p_1 = q_{11} = 3/4$ ):
  - $y_{i+1} = y_i + (k_1/3 + 2k_2/3)h$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + 3h/4, y_i + 3k_1 h/4)$
- Este método fornece um limitante mínimo para o erro de aproximação nos Métodos de Runge-Kutta de 2ª ordem

## Runge-Kutta de 3ª e 4ª ordens

- De modo semelhante, podem ser deduzidas as fórmulas de Runge-Kutta de ordens superiores
- Em cada ordem, também haverá infinitas versões
- Métodos de Runge-Kutta mais conhecidos:
  - 3ª ordem:
    - $y_{i+1} = y_i + (k_1 + 4k_2 + k_3)h/6$
    - $k_1 = f(x_i, y_i)$
    - $k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h)$
    - $k_3 = f(x_i + h, y_i - k_1h + 2k_2h)$
  - 4ª ordem:
    - $y_{i+1} = y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6$
    - $k_1 = f(x_i, y_i)$
    - $k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h)$
    - $k_3 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h)$
    - $k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3h)$

## Exemplo

- Usando o Método de Runge-Kutta de 2ª ordem (Método de Heun), resolva  $y' = x - y$ , tal que  $y(0) = 2$ 
  - Consideraremos  $h = 0,2$
  - $f(x,y) = x - y$
  - $x_0 = 0, x_i = x_0 + 0,2i$
  - $y_0 = 2$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1h)$
  - $y_{i+1} = y_i + (\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2)h$

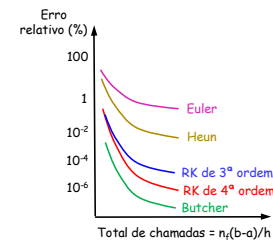
i	$x_i$	$y_i$	$k_1$	$k_2$
0	0,0	2,0	-2,0	-1,4
1	0,2	1,66	-1,46	-0,968
2	0,4	1,4172	-1,0172	-0,61376
3	0,6	1,254104	-0,654104	-0,323283
4	0,8	1,1563652	-0,356369	-0,0850914
5	1,0	1,1122192		

## Runge-Kutta de ordens superiores

- Há um conhecido Método de Runge-Kutta de 5ª ordem, chamado Método de Butcher:
  - $y_{i+1} = y_i + (7k_1 + 32k_2 + 12k_4 + 32k_5 + 7k_6)h/90$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + h/4, y_i + k_1h/4)$
  - $k_3 = f(x_i + h/4, y_i + k_1h/8 + k_2h/8)$
  - $k_4 = f(x_i + h/2, y_i - k_2h/2 + k_3h)$
  - $k_5 = f(x_i + 3h/4, y_i + 3k_1h/16 + 9k_4h/16)$
  - $k_6 = f(x_i + h, y_i - 3k_1h/7 + 2k_2h/7 + 12k_3h/7 - 12k_4h/7 + 8k_5h/7)$
- Evidentemente, é possível obter fórmulas de Runge-Kutta de ordens superiores, mas, de modo geral, o ganho em precisão acaba sendo contrabalanceado pelo esforço computacional exigido no seu cálculo

## Comparação

- Dado um PVI com solução analítica conhecida, podemos resolvê-lo com métodos de Runge-Kutta de 1ª a 5ª ordens, com diversos tamanhos do passo  $h$
- Se compararmos os resultados obtidos com a solução exata, teremos um gráfico semelhante ao abaixo:



- $n_f$  é o número de chamadas da função  $f(x,y)$  em cada iteração do método
- O total de chamadas reflete o tempo gasto na execução do método
- Conclusões:
  - Métodos de ordem superior alcançam uma precisão maior com o mesmo esforço computacional
  - Depois de um certo passo  $h$ , sua diminuição representará um ganho muito pequeno na precisão

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Métodos de passo múltiplo

- Vimos que, para encontrar uma aproximação de  $y(x_{i+1})$ , os métodos de passo simples precisam apenas de  $y(x_i)$ , além de cálculos de  $y' = f(x,y)$  e de outras derivadas em vários pontos
- Por outro lado, suponhamos que, além de  $y(x_0)$ , também são conhecidas aproximações  $y(x_1), \dots, y(x_k)$  em pontos equidistantes, isto é,  $x_{i+1} - x_i = h, 0 \leq i < k$
- Os métodos que utilizam o valor de  $y$  em mais de um ponto são chamados métodos de passo múltiplo
- Esses métodos baseiam-se na percepção de que, uma vez que o cálculo tenha começado, informação valiosa já está à disposição: a curvatura formada pelos valores anteriores permite uma melhor aproximação da trajetória da solução

## Métodos de Adams

- Entre os métodos de passo múltiplo, há uma classe conhecida como *Métodos de Adams*, que se baseiam na integração numérica de  $y' = f(x,y)$  de  $x_i$  até  $x_{i+1}$ :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx \Leftrightarrow y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx$$

- Por sua vez, isso pode ser feito através de dois tipos de métodos:
  - *Adams-Bashforth* (métodos explícitos ou fórmulas abertas): sem usar o ponto  $x_{i+1}$
  - *Adams-Moulton* (métodos implícitos ou fórmulas fechadas): usando o ponto  $x_{i+1}$

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)



## Métodos explícitos

- Na aproximação dessa integral, os *Métodos de Adams-Bashfort* utilizam  $m+1$  pontos  $x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-m}$
- Por isso, são chamados métodos de ordem  $m+1$
- Isso é feito através da integração do polinômio interpolador  $p_m(x)$ :

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_m(x) dx$$

- A função  $f(x, y(x))$  é aproximada pelo polinômio  $p_m(x)$ , que interpola os pontos  $(x_i, y'_i), (x_{i-1}, y'_{i-1}), \dots, (x_{i-m}, y'_{i-m})$ . Basta escolher o valor de  $m$
- Chamando  $f_{i-j} = f(x_{i-j}, y_{i-j}), 0 \leq j \leq m$ , podemos expressar  $p_m(x)$  através da forma de Lagrange:
  - $p_m(x) = L_{-m}(x)f_{i-m} + \dots + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i$

## Ordem 4: caso com $p_3(x)$

- Pontos de interpolação:  $(x_i, y_i), (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_{i-2}, y_{i-2}), (x_{i-3}, y_{i-3})$
- $f(x, y(x)) = y'(x) \approx p_3(x) = L_{-3}(x)f_{i-3} + L_{-2}(x)f_{i-2} + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i$
- $L_{-3}(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)]/(-h)(-2h)(-3h)$
- $L_{-2}(x) = [(x-x_{i-3})(x-x_{i-1})(x-x_i)]/(h)(-h)(-2h)$
- $L_{-1}(x) = [(x-x_{i-3})(x-x_{i-2})(x-x_i)]/(2h)(h)(-2h)$
- $L_0(x) = [(x-x_{i-3})(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})]/(3h)(2h)(h)$
- Sejam  $s = (x-x_i)/h, dx = h ds$  e  $x = hs + x_i$ . Então:
  - $L_{-3}(s) = -(s+2)(s+1)s/6 = -(s^3 + 3s^2 + 2s)/6$
  - $L_{-2}(s) = (s+3)(s+1)s/2 = (s^3 + 4s^2 + 3s)/2$
  - $L_{-1}(s) = -(s+3)(s+2)s/2 = -(s^3 + 5s^2 + 6s)/2$
  - $L_0(s) = (s+3)(s+2)(s+1)/6 = (s^3 + 6s^2 + 11s + 6)/6$
- Substituindo na integral:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_3(x) dx = -\frac{h}{6} f_{i-3} \int_0^1 L_{-3}(s) ds + \frac{h}{2} f_{i-2} \int_0^1 L_{-2}(s) ds - \frac{h}{2} f_{i-1} \int_0^1 L_{-1}(s) ds + \frac{h}{6} f_i \int_0^1 L_0(s) ds$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} p_3(x) dx = -\frac{9h}{24} f_{i-3} + \frac{37h}{24} f_{i-2} - \frac{59h}{24} f_{i-1} + \frac{55h}{24} f_i$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$$

## Ordem 4: estimativa de erro

- Pontos de interpolação:  $(x_i, y_i), (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_{i-2}, y_{i-2}), (x_{i-3}, y_{i-3})$
- Vimos anteriormente que o erro na interpolação com  $p_3(x)$  é  $E_3(x) = (x - x_{i-3})(x - x_{i-2})(x - x_{i-1})(x - x_i)f^{(4)}(\xi)/4!$ , onde  $\xi \in (x_i, x_{i-3})$
- Portanto, o erro cometido é:

$$e(x_{i+1}) = \frac{1}{4!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_{i-3})(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)f^{(4)}(\xi, y(\xi)) dx$$

- Com  $s = (x-x_i)/h, dx = h ds$  e  $x = hs + x_i$ :

$$e(x_{i+1}) = \frac{h^5}{4!} \int_0^1 (s+3)(s+2)(s+1)s f^{(4)}(\xi, y(\xi)) ds$$

- Como  $g(s) = s(s+1)(s+2)(s+3)$  não muda de sinal em  $[0;1]$ , o Teorema do Valor Médio para integrais garante que existe  $\eta \in (0;1)$  tal que:

$$\frac{h^5}{4!} \int_0^1 (s+3)(s+2)(s+1)s f^{(4)}(\xi, y(\xi)) ds = \frac{h^5}{4!} f^{(4)}(\eta, y(\eta)) \int_0^1 g(s) ds = \frac{h^5}{24} f^{(4)}(\eta, y(\eta)) \frac{251}{30}$$

- Portanto:  $e(x_{i+1}) = h^5 f^{(4)}(\eta, y(\eta)) \frac{251}{720} = h^5 y^{(5)}(\eta) \frac{251}{720}$

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Métodos implícitos

- Na aproximação da integral, os *Métodos de Adams-Moulton* utilizam os pontos  $x_{i+1}, x_i, \dots, x_{i-m}$
- Neste caso, o método tem ordem  $m+2$ , e a integração é feita através de  $p_{m+1}(x)$ :

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_{m+1}(x) dx$$

- O polinômio  $p_{m+1}(x)$  interpola os pontos  $(x_{i+1}, y'_{i+1}), (x_i, y'_i), \dots, (x_{i-m}, y'_{i-m})$
- De modo análogo aos métodos explícitos, basta escolher o valor de  $m$  e calcular a integração da forma de Lagrange:
  - $p_{m+1}(x) = L_{-m}(x)f_{i-m} + \dots + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i + L_1(x)f_{i+1}$

## Ordem 4: caso com $p_3(x)$

- Pontos de interpolação:  $(x_{i+1}, y_{i+1}), (x_i, y_i), (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_{i-2}, y_{i-2})$
- $f(x, y(x)) = y'(x) \approx p_3(x) = L_{-2}(x)f_{i-2} + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i + L_1(x)f_{i+1}$
- $L_{-2}(x) = [(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})]/(-3h)(-2h)(-h)$
- $L_{-1}(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_i)(x-x_{i+1})]/(h)(-h)(-2h)$
- $L_0(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})]/(2h)(h)(-h)$
- $L_1(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)]/(3h)(2h)(h)$
- Sejam  $s = (x-x_i)/h$ ,  $dx = h ds$  e  $x = hs + x_i$ . Então:
  - $L_{-2}(s) = -(s+1)s(s-1)/6 = -(s^3 - s)/6$
  - $L_{-1}(s) = (s+2)s(s-1)/2 = (s^3 + s^2 - 2s)/2$
  - $L_0(s) = -(s+2)(s+1)(s-1)/2 = -(s^3 + 2s^2 - s - 2)/2$
  - $L_1(s) = (s+2)(s+1)s/6 = (s^3 + 3s^2 + 2s)/6$
- Substituindo na integral:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_3(x) dx = \frac{-h}{6} \int_0^1 f_{i-2}(s) ds + \frac{h}{2} \int_0^1 f_{i-1}(s) ds - \frac{h}{2} \int_0^1 f_i(s) ds + \frac{h}{6} \int_0^1 f_{i+1}(s) ds$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

$y_{i+1}$  está presente em  $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$ : **formulação implícita**

## Ordem 4: estimativa de erro

- Pontos de interpolação:  $(x_{i+1}, y_{i+1}), (x_i, y_i), (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_{i-2}, y_{i-2})$
- De forma análoga, com  $s = (x-x_i)/h$ ,  $dx = h ds$  e  $x = hs + x_i$ :

$$e(x_{i+1}) = \frac{h^5}{4!} \int_0^1 (s+2)(s+1)s(s-1) f^{(4)}(\xi, y(\xi)) ds$$

- Como  $g(s) = (s+2)(s+1)s(s-1)$  é sempre menor ou igual a zero em  $[0;1]$ , então existe  $\eta \in (0;1)$  tal que:

$$e(x_{i+1}) = -h^5 y^{(5)}(\eta) \frac{19}{720}$$

## Exemplo

- Seja o PVI  $y' = 0,04y$ , onde  $y(0) = 1000$
- Usando o Método de Adams-Bashforth de ordem 4, aproximar  $y(2)$  com  $h = 0,2$ 
  - $x_0 = 0$  e  $y_0 = 1000$
  - É possível verificar que a solução exata do PVI é  $y(x) = 1000e^{0,04x}$
  - Através dessa solução, podemos calcular  $y_1, y_2$  e  $y_3$
  - Em seguida, utilizamos a fórmula desse método:
    - $y_{i+1} = y_i + h(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})/24$

i	$x_i$	$y_i$	$f_i = f(x_i, y_i)$	$y(x_i)$ (solução exata)
0	0,0	1000	40	1000
1	0,2	1008,0321	40,321284	1008,0321
2	0,4	1016,1287	40,645148	1016,1287
3	0,6	1024,2903	40,971612	1024,2903
4	0,8	1032,517487	41,30069948	1032,5175
5	1,0	1040,810756		1040,810774

## Alguns casos

### Métodos explícitos (Adams-Bashforth):

Ordem	Fórmula	Erro
2	$y_{i+1} = y_i + h(3f_i - f_{i-1})/2$	$5h^3 f''(\xi)/12$
3	$y_{i+1} = y_i + h(23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2})/12$	$9h^4 f^{(3)}(\xi)/24$
4	$y_{i+1} = y_i + h(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})/24$	$251h^5 f^{(4)}(\xi)/720$
5	$y_{i+1} = y_i + h(1901f_i - 2774f_{i-1} + 2616f_{i-2} - 1274f_{i-3} + 251f_{i-4})/720$	$475h^6 f^{(5)}(\xi)/1440$

### Métodos implícitos (Adams-Moulton):

Ordem	Fórmula	Erro
2	$y_{i+1} = y_i + h(f_{i+1} + f_i)/2$	$-h^3 f''(\xi)/12$
3	$y_{i+1} = y_i + h(5f_{i+1} + 8f_i - f_{i-1})/12$	$-h^4 f^{(3)}(\xi)/24$
4	$y_{i+1} = y_i + h(9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2})/24$	$-19h^5 f^{(4)}(\xi)/720$
5	$y_{i+1} = y_i + h(251f_{i+1} + 646f_i - 264f_{i-1} + 106f_{i-2} - 19f_{i-3})/720$	$-27h^6 f^{(5)}(\xi)/1440$

## Métodos de previsão-correção

- Uma das principais desvantagens dos métodos de passo múltiplo é que não se auto-iniciam: precisam de outros dados, geralmente obtidos por algum método de passo simples (Runge-Kutta ou série de Taylor, por exemplo)
- Por outro lado, parece difícil utilizar métodos implícitos, pois na expressão de  $y_{i+1}$  aparece  $f_{i+1}$ ...
- Na verdade, eles são usados em pares *previsor-corretor*:
  - Através de um método explícito (chamado *previsor*), encontra-se a primeira aproximação  $y_{i+1}^0$  para  $y_{i+1}$
  - Calcula-se então  $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)$
  - Com um método implícito (chamado *corretor*), utiliza-se o valor acima para calcular uma nova aproximação  $y_{i+1}^1$  para  $y_{i+1}$
  - Volta-se ao passo 2, e o processo continua até que um determinado erro relativo de  $y_{i+1}$  seja alcançado
  - Caso se deseje calcular  $y_{i+2}$ , calcula-se  $f_{i+1}$  e volta-se ao passo 1

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Exemplo

- Seja o PVI  $y' = -y^2$ , onde  $y(1) = 1$ . Deseja-se obter valores de  $y$  com erros relativos menores que  $10^{-4}$ 
  - Consideremos, por exemplo,  $h = 0,1$
  - Neste caso, como sabemos que a solução analítica é  $y(x) = 1/x$ , vamos utilizá-la para calcular  $y_1, y_2$  e  $y_3$ , pois usaremos métodos de ordem 4:

$x_0 = 1$	$y_0 = 1$	$f_0 = -1$
$x_1 = 1,1$	$y_1 = 1/1,1 = 0,9090909$	$f_1 = -0,8264462$
$x_2 = 1,2$	$y_2 = 1/1,2 = 0,8333333$	$f_2 = -0,6944443$
$x_3 = 1,3$	$y_3 = 1/1,3 = 0,7692307$	$f_3 = -0,5917158$

- Previsor:  $y_4^0 = y_3 + h(55f_3 - 59f_2 + 37f_1 - 9f_0)/24 = 0,7144362$
- $f_4^0 = f(x_4, y_4^0) = -(y_4^0)^2 = -0,510419$
- Corretor:  $y_4^1 = y_3 + h(9f_4^0 + 19f_3 - 5f_2 + f_1)/24 = 0,7142698$
- $f_4^1 = f(x_4, y_4^1) = -(y_4^1)^2 = -0,5101814$
- Corretor:  $y_4^2 = y_3 + h(9f_4^1 + 19f_3 - 5f_2 + f_1)/24 = 0,7142787$
- $|y_4^2 - y_4^1|/|y_4^2| = 1,2591374 \cdot 10^{-5} < 10^{-4}$
- Calcular  $f_4^2$ , usar o previsor no cálculo de  $y_5^0$ , e continuar o processo...

## Convergência

- Questões sobre os métodos de previsão-correção:
  - Em que condições há garantia de convergência para  $y_{i+1}$ ?
  - Quantas iterações do corretor são necessárias para se atingir essa convergência na precisão desejada?
- Teorema: Se  $f(x,y)$  e  $\partial f/\partial y$  são contínuas em  $x$  e  $y$  em todo o intervalo  $[a,b]$ , as iterações do corretor vão convergir desde que  $h \cdot |\partial f/\partial y| < 2$
- Na prática, basta escolher  $h$  suficientemente pequeno...
- Além disso, a experiência diz que, se o par previsor-corretor for da mesma ordem e  $h$  satisfizer as condições do teorema, bastam apenas uma ou duas iterações do corretor

## Voltando ao exemplo anterior

- Seja o PVI  $y' = -y^2$ , onde  $y(1) = 1$
- $\partial f/\partial y = -2y$
- Para que o teorema da convergência seja satisfeito,  $h \cdot |2y| < 2$ , ou seja,  $h < 1/|y|$  garante a convergência
- Todos os valores obtidos para  $y$ , no exemplo anterior, são menores que 1, ou seja,  $1/|y| > 1$
- O espaçamento  $h = 0,1$  satisfaz a condição exigida para a convergência

## CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

## Equações de ordem superior

- Uma equação diferencial  $y^{(m)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(m-1)})$  de ordem  $m$  pode ser facilmente transformada em um sistema de equações diferenciais de ordem 1:
  - $z_1 = y$
  - $z_1' = y' = z_2$
  - $z_2' = y'' = z_3$
  - $z_{m-1}' = y^{(m-1)} = z_m$
  - $z_m' = y^{(m)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(m-1)}) = f(x, z_1, z_2, z_3, \dots, z_m)$
- Sejam  $y_i = y(x_i)$ ,  $y_i' = y'(x_i)$ ,  $y_i'' = y''(x_i)$ , ...,  $y_i^{(m-1)} = y^{(m-1)}(x_i)$
- Este sistema pode ser resolvido através dos métodos de passos simples já vistos, onde as funções têm agora 3 ou mais variáveis, e os cálculos precisam obedecer uma determinada sequência:
  - Fase  $i$ :  $y_i, y_i', y_i'', \dots, y_i^{(m-1)}$
  - Fase  $i+1$ :  $y_{i+1}, y_{i+1}', y_{i+1}'', \dots, y_{i+1}^{(m-1)}$

## Exemplo

- Usando o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, calcule  $y(0,5)$  e  $y''(0,5)$ , onde  $y'' = e^x - 2y^2$ , tal que  $y(0) = 0$ ,  $y'(0) = 0$  e  $h = 0,5$ 
  - Sejam  $f(x, y, z) = z = y'$  e  $g(x, y, z) = z' = y'' = e^x - 2y^2$
  - Sabemos que  $x_0 = 0$ ,  $y_0 = 0$  e  $z_0 = 0$  → Terceira variável
  - Fórmulas de cálculo (Runge-Kutta de 4ª ordem):
    - $y_1 = y_0 + (k_{f1} + 2k_{f2} + 2k_{f3} + k_{f4})h/6$
    - $z_1 = z_0 + (k_{g1} + 2k_{g2} + 2k_{g3} + k_{g4})h/6$
  - Sequência de cálculos que deve ser obedecida: → Irá determinar a sequência dos cálculos
    - $k_{f1} = f(x_0, y_0, z_0) = f(0; 0; 0) = 0$
    - $k_{g1} = g(x_0, y_0, z_0) = g(0; 0; 0) = e^0 - 0 = 1$
    - $k_{f2} = f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_{f1}h, z_0 + \frac{1}{2}k_{g1}h) = f(0,25; 0; 0,25) = 0,25$
    - $k_{g2} = g(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_{f1}h, z_0 + \frac{1}{2}k_{g1}h) = g(0,25; 0; 0,25) = e^{0,25} - 2 \cdot 0^2 = 1,2840$
    - $k_{f3} = f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_{f2}h, z_0 + \frac{1}{2}k_{g2}h) = f(0,25; 0,0625; 0,321) = 0,321$
    - $k_{g3} = g(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_{f2}h, z_0 + \frac{1}{2}k_{g2}h) = g(0,25; 0,0625; 0,321) = e^{0,25} - 2 \cdot 0,0625^2 = 1,2762$
    - $k_{f4} = f(x_0 + h, y_0 + k_{f3}h, z_0 + k_{g3}h) = f(0,5; 0,1605; 0,6381) = 0,6381$
    - $k_{g4} = g(x_0 + h, y_0 + k_{f3}h, z_0 + k_{g3}h) = g(0,5; 0,1605; 0,6381) = e^{0,5} - 2 \cdot 0,1605^2 = 1,5972$
    - $y_1 = y_0 + (k_{f1} + 2k_{f2} + 2k_{f3} + k_{f4})h/6 = 0 + (0 + 2 \cdot 0,25 + 2 \cdot 0,321 + 0,6381) \cdot 0,5/6 = 0,1483$
    - $z_1 = z_0 + (k_{g1} + 2k_{g2} + 2k_{g3} + k_{g4})h/6 = 0 + (1 + 2 \cdot 1,284 + 2 \cdot 1,2762 + 1,5972) \cdot 0,5/6 = 0,6431$
    - $y(0,5) \approx 0,1483$        $y'(0,5) = e^{0,5} - 2y(0,5)^2 \approx 1,6047$
    - $y(0,5) \approx 0,6431$

## Um caso particular

- É possível, por exemplo, deduzir uma fórmula específica do Método de Heun para a resolução de uma equação diferencial de 2ª ordem:
  - Sejam  $y'' = f(x, y, y')$ ,  $y(0) = y_0$  e  $y'(0) = y'_0$
  - Troca de variáveis:  $y' = z \Rightarrow y'' = z' = f(x, y, y') = f(x, y, z)$
  - Chamando  $Y = [y \ z]^T$ :
 
$$Y' = \begin{bmatrix} y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z \\ f(x, y, z) \end{bmatrix} = F(x, Y) = F(x, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}) \quad Y(0) = \begin{bmatrix} y(0) \\ z(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y'_0 \end{bmatrix} = Y_0$$
  - O Método de Heun para uma equação é:
    - $y_{i+1} = y_i + h[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hy'_i)]/2$
  - No nosso caso:
    - $Y_{i+1} = Y_i + h[F(x_i, Y_i) + F(x_i + h, Y_i + hY'_i)]/2$
  - Valores que aparecem na expressão acima:
 
$$F(x_i, Y_i) = \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix} \quad F(x_i + h, Y_i + hY'_i) = F(x_i + h, \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix})$$

## Um caso particular

- Voltando ao Método de Heun:

$$Y_{i+1} = Y_i + h[F(x_i, Y_i) + F(x_i + h, Y_i + hY'_i)]/2$$

$$Y_{i+1} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \frac{h}{2} \left[ \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix} + F(x_i + h, \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix}) \right]$$

$$Y_{i+1} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \frac{h}{2} \left[ \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix} + F(x_i + h, \begin{bmatrix} y_i + hz_i \\ z_i + hf(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix}) \right]$$

$$Y_{i+1} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \frac{h}{2} \left( \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_i + hf(x_i, y_i, z_i) \\ f(x_i + h, y_i + hz_i, z_i + hf(x_i, y_i, z_i)) \end{bmatrix} \right)$$

$$Y_{i+1} = \begin{bmatrix} y_i + hz_i + h^2 f(x_i, y_i, z_i) / 2 \\ z_i + hf(x_i, y_i, z_i) / 2 + f(x_i + h, y_i + hz_i, z_i + hf(x_i, y_i, z_i)) / 2 \end{bmatrix}$$

- Definindo p e q:

$$p = hf(x_i, y_i, z_i)$$

$$Y_{i+1} = \begin{bmatrix} y_i + hz_i + hp/2 \\ z_i + (p+q)/2 \end{bmatrix}$$

$$q = hf(x_i + h, y_i + hz_i, z_i + p)$$

## Exemplo

- Seja o PVI  $y'' = 4y' - 3y - x$ , onde  $y(0) = 4/9$  e  $y'(0) = 7/3$ 
  - Consideraremos  $h = 0,25$
  - Troca de variáveis:
    - $y' = z$
    - $z' = f(x, y, z) = 4z - 3y - x$

$$Y = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} \quad F(x, Y) = \begin{bmatrix} z \\ 4z - 3y - x \end{bmatrix} \quad Y_0 = \begin{bmatrix} 4/9 \\ 7/3 \end{bmatrix}$$

- Aplicando o Método de Heun:

- $p = hf(x_0, y_0, z_0) = h(4z_0 - 3y_0 - x_0) = 0,25(4 \cdot 7/3 - 3 \cdot 4/9 - 0) = 2$
- $q = hf(x_0 + h, y_0 + hz_0, z_0 + p) \approx 0,25f(0,25; 1,028; 4,333) \approx 3,4995$

$$Y_1 = \begin{bmatrix} y_0 + hz_0 + hp/2 \\ z_0 + (p+q)/2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 4/9 + 0,25 \cdot 7/3 + 0,25 \cdot 2/2 \\ 7/3 + (2 + 3,4995)/2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1,278 \\ 5,083 \end{bmatrix}$$

- Desse modo,  $y(0,25) \approx 1,278$  e  $y'(0,25) \approx 5,083$

## CCI-22

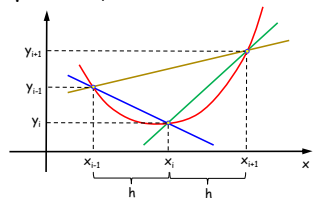
- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
  - Equações de ordem superior
- **Problemas de Valor de Contorno (PVC)**

## Problemas de Valor de Contorno

- Como vimos anteriormente, dada uma equação diferencial de ordem  $m > 1$ , se as condições iniciais, envolvendo a função e suas derivadas até a ordem  $m-1$ , não são especificadas em um mesmo ponto, então temos um *Problema de Valor de Contorno (PVC)*
- Concretamente, a forma geral dos PVC de 2ª ordem é:
  - $y'' = f(x, y, y')$
  - $a_1 y'(w) + b_1 y(w) = c_1$       $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1$  e  $c_2$ : constantes reais conhecidas
  - $a_2 y'(z) + b_2 y(z) = c_2$       $a_1$  e  $b_1$  não podem ser nulos simultaneamente
- Se  $f(x, y, y')=0$  e  $c_1=c_2=0$ , o PVC é homogêneo: tem solução  $y(x)=0$
- Veremos a resolução de um PVC de 2ª ordem através do *Método das Diferenças Finitas*:
  - As derivadas são aproximadas por diferenças finitas
  - A equação diferencial transforma-se em um sistema de equações algébricas
  - Se esse sistema for linear, pode ser resolvido com os métodos estudados no Capítulo 3; caso contrário, utilizam-se os métodos do Capítulo 4

## Aproximações das derivadas

- Considerando o intervalo  $[a, b]$  dividido em  $n$  partes iguais de tamanho  $h$ , onde  $x_0=a$  e  $x_n=b$ , são três as aproximações mais usadas para a primeira derivada no ponto  $x_i$ :



Diferença avançada

$$y'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_i)/h$$

Diferença centrada

$$y'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_{i-1})/2h$$

Diferença atrasada

$$y'(x_i) \approx (y_i - y_{i-1})/h$$

- Podemos estimar os erros cometidos nessas aproximações através da fórmula de Taylor de  $y(x)$  em torno de  $x_i$ , onde  $\xi$  está entre  $x$  e  $x_i$ :
  - $y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x-x_i) + \dots + y^{(k)}(x_i)(x-x_i)^k/k! + y^{(k+1)}(\xi)(x-x_i)^{k+1}/(k+1)!$

## Estimativa do erro

- O erro cometido no cálculo de  $y'(x_i)$  através da *diferença avançada* pode ser estimado com a fórmula de Taylor de  $y(x)$  em torno de  $x_i$ , considerando  $k = 1$ :
  - $y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x-x_i) + y''(\xi)(x-x_i)^2/2$
- No ponto  $x = x_{i+1} = x_i + h$ :
  - $y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)(x_{i+1}-x_i) + y''(\xi_{i+1})(x_{i+1}-x_i)^2/2$
  - $y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + y''(\xi_{i+1})h^2/2$
  - $y'(x_i) = [y(x_{i+1}) - y(x_i)]/h - y''(\xi_{i+1})h/2$
- Se  $y''(x)$  for limitada em  $[a, b]$ , então:
  - $y'(x_i) = (y_{i+1} - y_i)/h + O(h)$
- Um resultado análogo pode ser obtido em relação à *diferença atrasada*:
  - $y'(x_i) = (y_i - y_{i-1})/h + O(h)$

