Resolução Numérica de Equações Diferenciais

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

Definições

- Muitos fenômenos físicos podem ser modelados 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:

$$y^{(n)}(x) = f(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(n-1)}(x)), \text{ onde } a \leq x \leq b$$

- 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:
  - $y''' + (x+1)y'' + \cos(xy') - (x^2-1)y = x^2 + y^2\mathrm{sen}(x+y)$
  - $y(0)=1{,}1;\ \ y'(0)=2{,}2;\ \ y''(0)=3{,}3$
- 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):
  - $y^{(4)}(x) + ky(x) = q$
  - $y(0) = y'(0) = 0;\ \ y(L) = y''(L) = 0$

k é uma constante que depende do material da barra

- 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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

PROBLEMAS DE VALOR INICIAL

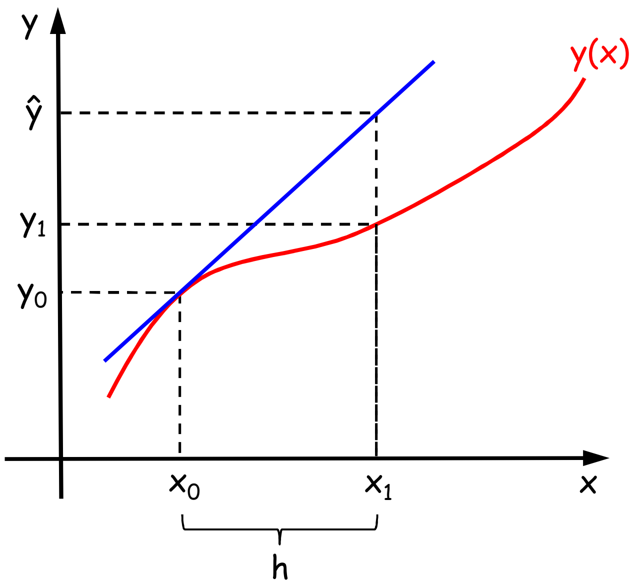
- Embora haja garantia teórica da resolução analítica de um PVI, essa solução costuma ser de difícil obtenção: por isso, utilizam-se métodos numéricos
- Dado o PVI $y' = f(x,y)$, onde $y(x_0) = y_0$, construímos $x_1, x_2, \ldots, x_n$ igualmente espaçados (embora não seja uma condição necessária), e 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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- 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 $h = x_1 - x_0$:
  - $y^* = y_0 + h.f(x_0,y_0)$
- Quando h tende a zero, y^* tende a y_1:
  - $y_1 \approx y_0 + h.f(x_0,y_0)$

- Generalizando, temos a expressão do Método de Euler:

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

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:
  - $x_i = x_0 + h.i$, 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:
  - $y'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_i)/h$
  - $y_{i+1} \approx y_i + h.y'(x_i)$
  - $y_{i+1} \approx y_i + h.f(x_i,y_i)$

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:
  - $y_{i+1} \approx y_i + h.f(x_i, y_i)$
  - $y_{i+1} \approx y_i + h.(2x_i + 3)$
- 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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

MÉTODOS DE SÉRIE DE TAYLOR

- Suponhamos que, de alguma maneira, estejam disponíveis as aproximações $y_1, y_2, \ldots, y_n$ para $y(x)$ em $x_1, x_2, \ldots, x_n$, respectivamente
- A série de Taylor de k-ésima ordem de $y(x)$ em torno de $x = x_i$ é

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

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

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

- 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 $y''(x)$, $y'''(x)$, ..., $y^{(k)}(x)$
- Considerando $y'(x) = f(x,y(x))$, vamos calcular $y''(x)$:
  - $y''(x) = f'(x,y(x))$
  - $y''(x) = f_x(x,y(x)) + f_y(x,y(x)).y'(x)$, onde f_x e f_y são as derivadas parciais de f em relação a x e a y, respectivamente
  - $y'' = f_x + f_y.f$
- Desse modo, a série de Taylor de 2ª ordem é $y_{i+1} \approx y_i + h.f(x_i,y_i) + h^2[f_x(x_i,y_i) + f_y(x_i,y_i).f(x_i,y_i)]/2$
- Vamos calcular agora $y'''(x)$:
  - $y'''(x) = f_{xx}(x,y(x)) + f_{xy}(x,y(x)).y'(x) + [f_{yx}(x,y(x)) + f_{yy}(x,y(x)).y'(x)].y'(x) + f_y(x,y(x)).y''(x)$
  - $y''' = f_{xx} + f_{xy}.f + f_{yx}.f + f_{yy}.f^2 + f_y.(f_x + f_y.f)$
  - $y''' = f_{xx} + 2f_{xy}.f + f_{yy}.f^2 + f_y.f_x + f_y^{\,2}.f$
- É possível perceber como se torna difícil o cálculo de derivadas mais altas.

EXEMPLO

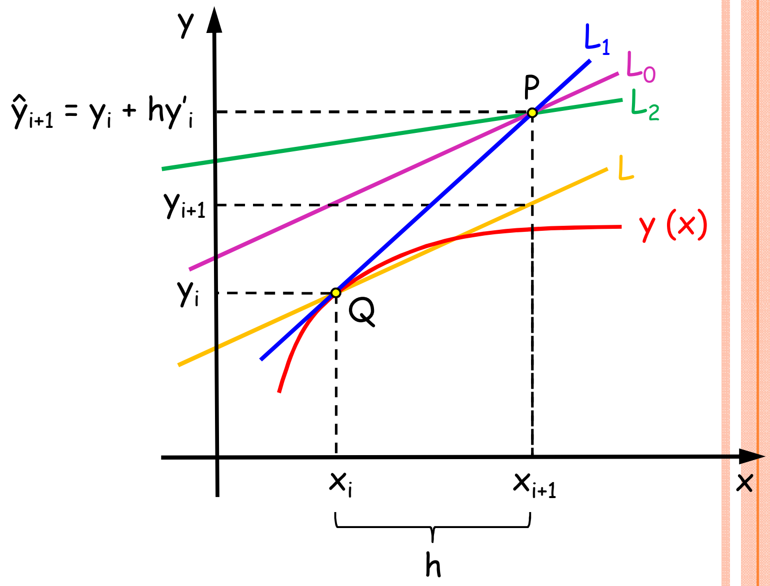
- Usando a série de Taylor de 2ª ordem, calcular $y(2,1)$, onde $xy' = x - y$ e $y(2)=2$
  - $xy' = x - y \Leftrightarrow y' = (x-y)/x \Leftrightarrow y' = 1 - y/x$
  - $y'(2) = 1 - 2/2 = 0$
  - $y'' = -y'/x + y/x^2$
  - $y''(2) = 0/2 + 2/2^2 = 1/2$
  - Série de Taylor de 2ª ordem:
    - $y(x) \approx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

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)

Pode-se mostrar que Coincide com um Método de Taylor 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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- 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:
  - $y_{i+1} = y_i + \Phi(x_i, y_i, h)h$
- $\Phi(x_i, y_i, h)$ é chamada *função incremento*, e pode ser interpretada como a inclinação no intervalo considerado
- Fórmula geral da função incremento de *ordem n* :
  - $\Phi(x_i, y_i, h) = a_1k_1 + a_2k_2 + \ldots + a_nk_n$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h)$
  - $k_3 = f(x_i + p_2h, y_i + q_{21}k_1h + q_{22}k_2h)$
  - ...
  - $k_n = f(x_i + p_{n-1}h, y_i + q_{(n-1)1}k_1h + \ldots + q_{(n-1)(n-1)}k_{n-1}h)$
- a_i, p_i 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 $y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h$, onde $k_1 = f(x_i,y_i)$ e $k_2 = f(x_i+p_1h,\ y_i+q_{11}k_1h)$
- Expandindo k_2 por Taylor em torno de (x_i,y_i):
  - $f(x_i+p_1h,\ y_i+q_{11}k_1h) = f(x_i,y_i) + p_1hf_x(x_i,y_i) + q_{11}k_1hf_y(x_i,y_i)f(x_i,y_i) + O(h^2)$
- Substituindo na fórmula de Runge-Kutta:
  - $y_{i+1} = y_i + a_1k_1h + a_2[f(x_i,y_i) + p_1hf_x(x_i,y_i) + q_{11}k_1hf_y(x_i,y_i)f(x_i,y_i) + O(h^2)]h$
  - $y_{i+1} = y_i + a_1hf(x_i,y_i) + a_2hf(x_i,y_i) + a_2p_1h^2f_x(x_i,y_i) + a_2q_{11}h^2f_y(x_i,y_i)f(x_i,y_i) + O(h^3)$
- Por outro lado, a série de Taylor de 2ª ordem para y_{i+1} é:
  - $y_{i+1} = y_i + f(x_i,y_i)h + f'(x_i,y_i)h^2/2!$
  - $y_{i+1} = y_i + f(x_i,y_i)h + [f_x(x_i,y_i) + f_y(x_i,y_i)f(x_i,y_i)]h^2/2$
  - $y_{i+1} = y_i + hf(x_i,y_i) + h^2f_x(x_i,y_i)/2 + h^2f_y(x_i,y_i)f(x_i,y_i)/2$
- Desprezando os termos de $O(h^3)$, para que ambas expressões sejam iguais, é preciso que:
  - $a_1 + a_2 = 1$
  - $a_2p_1 = ½$
  - $a_2q_{11} = ½$
- 3 equações e 4 incógnitas: há infinitas soluções

Runge-Kutta de 2ª ordem

- Há três versões mais utilizadas: $a_2 = ½$, $a_2 = 1$ ou $a_2 = 2/3$
- *Método de Euler Aperfeiçoado (ou Método de Heun)*
  - $(a_2 = ½, a_1 = ½, p_1 = q_{11} = 1)$:
  - $y_{i+1} = y_i + (½k_1 + ½k_2)h$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1h)$
- *Método do Ponto Médio* $(a_2 = 1, a_1 = 0, p_1 = q_{11} = ½)$:
  - $y_{i+1} = y_i + k_2h$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + ½h, y_i + ½k_1h)$
- *Método de Ralston* $(a_2 = 2/3, a_1 = 1/3, p_1 = q_{11} = 3/4)$:
  - $y_{i+1} = y_i + (k_1/3 + 2k_2/3)h$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + 3h/4, y_i + 3k_1h/4)$

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:
    - $y_{i+1} = y_i + (k_1 + 4k_2 + k_3)h/6$
    - $k_1 = f(x_i, y_i)$
    - $k_2 = f(x_i + ½h, y_i + ½k_1h)$
    - $k_3 = f(x_i + h, y_i - k_1h + 2k_2h)$
  - 4ª ordem:
    - $y_{i+1} = y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6$
    - $k_1 = f(x_i, y_i)$
    - $k_2 = f(x_i + ½h, y_i + ½k_1h)$
    - $k_3 = f(x_i + ½h, y_i + ½k_2h)$
    - $k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3h)$

EXEMPLO

- Usando o Método de Runge-Kutta de 2ª ordem (Método de Heun), resolva $y' = x - y$, tal que $y(0) = 2$
  - Consideraremos $h = 0,2$
  - $f(x,y) = x - y$
  - $x_0 = 0$, $x_i = x_0 + 0,2i$
  - $y_0 = 2$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1h)$
  - $y_{i+1} = y_i + (½k_1 + ½k_2)h$

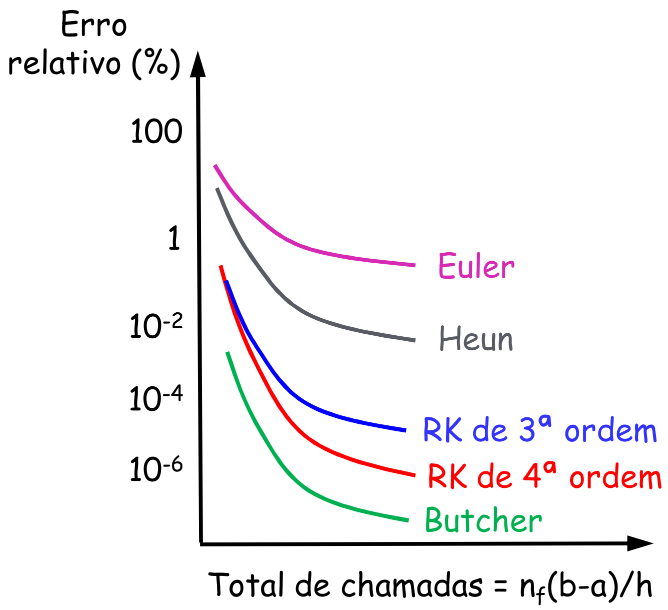
i	x_i	y_i	k_1	k_2
0	0,0	2,0	-2,0	-1,4
1	0,2	1,66	-1,46	-0,968
2	0,4	1,4172	-1,0172	-0,61376
3	0,6	1,254104	-0,654104	-0,323283
4	0,8	1,1563652	-0,356369	-0,0850914
5	1,0	1,1122192		

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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

EQUAÇÕES DE ORDEM SUPERIOR

- Uma equação diferencial $y^{(m)} = f(x, y, y', y'', ..., y^{(m-1)})$ de ordem m pode ser facilmente transformada em um sistema de equações diferenciais de ordem 1:
  - $y' = z_1$
  - $z_1' = y'' = z_2$
  - $z_2' = y''' = z_3$
  - ...
  - $z_{m-2}' = y^{(m-1)} = z_{m-1}$
  - $z_{m-1}' = y^{(m)} = f(x, y, y', y'', ..., y^{(m-1)}) = f(x, y, z_1, z_2, z_3, ..., z_{m-1})$
- Sejam $y_i = y(x_i)$, $y'_i = y'(x_i)$, $y''_i = y''(x_i)$, ..., $y^{(m-1)}_i = y^{(m-1)}(x_i)$
- Este sistema pode ser resolvido através dos métodos de passos simples já vistos, onde as funções têm agora m+1 variáveis, e os cálculos obedecem uma determinada sequência:
  - Fase i: y_i, y'_i, y''_i, ..., $y^{(m-1)}_i$
  - Fase i+1: y_{i+1}, y'_{i+1}, y''_{i+1}, ..., $y^{(m-1)}_{i+1}$

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 $Y = [y\ z]^T$:

$$Y' = \begin{bmatrix} y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z \\ f(x,y,z) \end{bmatrix} = F(x,Y) = F(x, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}) \qquad Y(0) = \begin{bmatrix} y(0) \\ z(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y'_0 \end{bmatrix} = Y_0$$

  - 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:

$$F(x_i, Y_i) = \begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix} \qquad F(x_i + h, Y_i + hY'_i) = F(x_i + h, \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + h\begin{bmatrix} z_i \\ f(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix})$$

UM CASO PARTICULAR

- Voltando ao Método de Heun:

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

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

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

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

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

- Definindo p e q:

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

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

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

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

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

- Aplicando o Método de Heun:
  - $p = hf(x_0,y_0,z_0) = h(4z_0 - 3y_0 - x_0) = 0{,}25(4.7/3 - 3.4/9 - 0) = 2$
  - $q = hf(x_0+h, y_0+hz_0, z_0+p) \approx 0{,}25f(0{,}25;\ 1{,}028;\ 4{,}333) \approx 3{,}4995$

$$Y_1 = \begin{bmatrix} y_0 + hz_0 + hp/2 \\ z_0 + (p+q)/2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 4/9 + 0{,}25.7/3 + 0{,}25.2/2 \\ 7/3 + (2 + 3{,}4995)/2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1{,}278 \\ 5{,}083 \end{bmatrix}$$

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

EXEMPLO RK DE 4ª. ORDEM EM EQUAÇÕES DE ORDEM SUPERIOR

- Usando o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, calcule y(0,5) e y''(0,5), onde $y'' + 2y^2 = e^x$, tal que $y(0) = 0$, $y'(0) = 0$ e $h = 0,5$
  - Sejam $f(x, y, z) = z = y'$ e $g(x, y, z) = z' = y'' = e^x - 2y^2$

    Terceira variável
  - Sabemos que $x_0 = 0$, $y_0 = 0$ e $z_0 = 0$
  - 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
    - $k_{f1} = f(x_0, y_0, z_0) = f(0; 0; 0) = 0$
    - $k_{g1} = g(x_0, y_0, z_0) = g(0; 0; 0) = e^0 - 0 = 1$
    - $k_{f2} = f(x_0 + ½h, y_0 + ½k_{f1}h, z_0 + ½k_{g1}h) = f(0,25; 0; 0,25) = 0,25$
    - $k_{g2} = g(x_0 + ½h, y_0 + ½k_{f1}h, z_0 + ½k_{g1}h) = g(0,25; 0; 0,25) = e^{0,25} - 2.0^2 = 1,2840$
    - $k_{f3} = f(x_0 + ½h, y_0 + ½k_{f2}h, z_0 + ½k_{g2}h) = f(0,25; 0,0625; 0,321) = 0,321$
    - $k_{g3} = g(x_0 + ½h, y_0 + ½k_{f2}h, z_0 + ½k_{g2}h) = g(0,25; 0,0625; 0,321) = e^{0,25} - 2.0,0625^2 = 1,2762$
    - $k_{f4} = f(x_0 + h, y_0 + k_{f3}h, z_0 + k_{g3}h) = f(0,5; 0,1605; 0,6381) = 0,6381$
    - $k_{g4} = g(x_0 + h, y_0 + k_{f3}h, z_0 + k_{g3}h) = g(0,5; 0,1605; 0,6381) = e^{0,5} - 2.0,1605^2 = 1,5972$
    - $y_1 = y_0 + (k_{f1} + 2k_{f2} + 2k_{f3} + k_{f4})h/6 = 0 + (0 + 2.0,25 + 2.0,321 + 0,6381).0,5/6 = 0,1483$
    - $z_1 = z_0 + (k_{g1} + 2k_{g2} + 2k_{g3} + k_{g4})h/6 = 0 + (1 + 2.1,284 + 2.1,2762 + 1,5972).0,5/6 = 0,6431$
    - $y(0,5) \approx 0,1483$
    - $y''(0,5) \approx 0,6431$

CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- 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 $y(x_1), \ldots, y(x_k)$ 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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

MÉTODOS EXPLÍCITOS

- Na aproximação dessa integral, os *Métodos de Adams-Bashfort* utilizam m+1 pontos $x_i, x_{i-1}, \ldots, x_{i-m}$
- 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 a função f(x,y(x)) nos pontos $x_i, x_{i-1}, \ldots, x_{i-m}$. Basta escolher o valor de m
- Chamando $f_{i-j} = f(x_{i-j}, y_{i-j})$, $0 \le j \le m$, podemos expressar $p_m(x)$ através da forma de Lagrange:
  - $p_m(x) = L_{-m}(x)f_{i-m} + \ldots + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i$

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})
- $f(x,y(x)) = y'(x) \approx p_3(x) = L_{-3}(x)f_{i-3} + L_{-2}(x)f_{i-2} + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_0$
  - $L_{-3}(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)]/(-h)(-2h)(-3h)$
  - $L_{-2}(x) = [(x-x_{i-3})(x-x_{i-1})(x-x_i)]/(h)(-h)(-2h)$
  - $L_{-1}(x) = [(x-x_{i-3})(x-x_{i-2})(x-x_i)]/(2h)(h)(-2h)$
  - $L_0(x) = [(x-x_{i-3})(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})]/(3h)(2h)(h)$
- 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:

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

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

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

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 $x = hs + x_i$:

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

- 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:

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

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

Exemplo

- Seja o PVI $y' = 0{,}04y$, onde $y(0) = 1000$
- Usando o Método de Adams-Bashforth de ordem 4, aproximar $y(1)$ 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

CCI-22

- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
  - Métodos de passo simples
    - Método de Euler
    - Métodos de série de Taylor
    - Métodos de Runge-Kutta
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- 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, …, 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 f(x,y(x)) nos pontos x_{i+1}, x_i, …, x_{i-m}
- De modo análogo aos métodos explícitos, basta escolher o valor de m e calcular a integração da forma de Lagrange:
  - $p_{m+1}(x) = L_{-m}(x)f_{i-m} + \ldots + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i + L_1(x)f_{i+1}$

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})
- $f(x,y(x)) = y'(x) \approx p_3(x) = L_{-2}(x)f_{i-2} + L_{-1}(x)f_{i-1} + L_0(x)f_i + L_1(x)f_1$
  - $L_{-2}(x) = [(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})]/(-3h)(-2h)(-h)$
  - $L_{-1}(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_i)(x-x_{i+1})]/(h)(-h)(-2h)$
  - $L_0(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})]/(2h)(h)(-h)$
  - $L_1(x) = [(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)]/(3h)(2h)(h)$
- 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:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y(x))dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_3(x)dx = \frac{-h}{6} f_{i-2}\int_0^1 L_{-2}(s)ds + \frac{h}{2} f_{i-1}\int_0^1 L_{-1}(s)ds - \frac{h}{2} f_i\int_0^1 L_0(s)ds + \frac{h}{6} f_{i+1}\int_0^1 L_1(s)ds$$

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

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:

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

ALGUNS CASOS

- Métodos explícitos (Adams-Bashforth):

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

- Métodos implícitos (Adams-Moulton):

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

CCI-22

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

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* :
  1) Através de um método explícito (chamado *previsor*), encontra-se a primeira aproximação y^0_{i+1} para y_{i+1}
  2) Calcula-se então $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y^0_{i+1})$
  3) Com um método implícito (chamado *corretor*), utiliza-se o valor acima para calcular uma nova aproximação y^1_{i+1} para y_{i+1}
  4) Volta-se ao passo 2, e o processo continua até que um determinado erro relativo de y_{i+1} seja alcançado
  5) Caso se deseje calcular y_{i+2}, calcula-se f_{i+1} e volta-se ao passo 1

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: $y^0_4 = y_3 + h(55f_3 - 59f_2 + 37f_1 - 9f_0)/24 = 0,7144362$
- $f^0_4 = f(x_4,y^0_4) = -(y^0_4)^2 = -0,510419$
- Corretor: $y^1_4 = y_3 + h(9f^0_4 + 19f_3 - 5f_2 + f_1)/24 = 0,7142698$
- $f^1_4 = f(x_4,y^1_4) = -(y^1_4)^2 = -0,5101814$
- Corretor: $y^2_4 = y_3 + h(9f^1_4 + 19f_3 - 5f_2 + f_1)/24 = 0,7142787$
- $|y^2_4 - y^1_4|/|y^2_4| = 1,2591374.10^{-5} < 10^{-4}$
- Calcular f^2_4, usar o previsor no cálculo de y^0_5, 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 $h.|\partial f/\partial y| < 2$
- 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, $h.|2y| < 2$, 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
    - Equações de ordem superior
  - Métodos de passo múltiplo
    - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
    - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
    - Métodos de previsão-correção
- Problemas de Valor de Contorno (PVC)

Problemas de Valor de Contorno

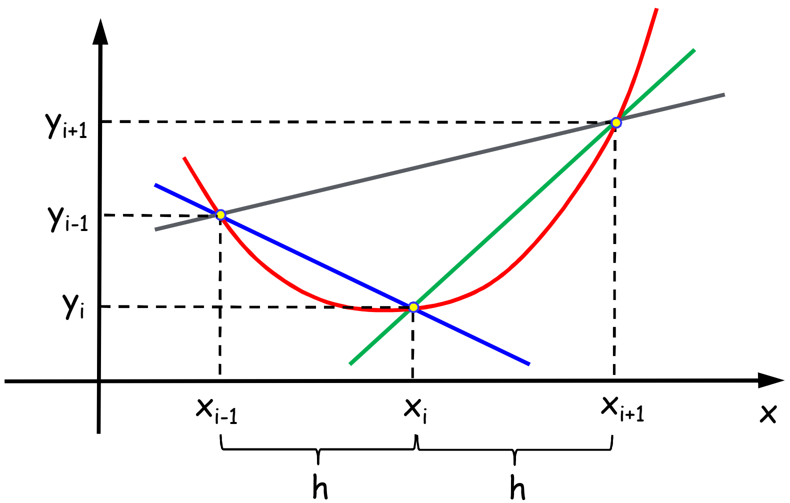
- Como vimos anteriormente, dada uma equação diferencial de ordem $m > 1$, se a função e suas derivadas até a ordem $m-1$ não são especificadas em um mesmo ponto, então temos um *Problema de Valor de Contorno* (PVC)
- A forma mais geral dos PVC é:
  - $y'' = f(x,y,y')$
  - $a_1 y(w) + b_1 y'(w) = c_1$
  - $a_2 y(z) + b_2 y'(z) = c_2$

a_1, a_2, b_1, b_2, c_1 e c_2: constantes reais conhecidas
a_i e b_i 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 através do *Método das Diferenças Finitas* :
  - As derivadas são aproximadas por diferenças finitas
  - A equação diferencial transforma-se em um sistema de equações algébricas que pode ser resolvidas com os métodos já estudados para sistemas de equações

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:



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

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

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

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

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:
  - $y'(x_i) = (y_i – y_{i-1})/h + O(h)$

Estimativa do erro

- O erro cometido no cálculo de $y'(x_i)$ através da diferença centrada pode ser estimado com a fórmula de Taylor de $y(x)$ em torno de x_i, considerando k = 2:
  - $y(x) = y(x_i) + y'(x_i).(x-x_i) + y''(x_i).(x-x_i)^2/2 + y'''(\xi).(x-x_i)^3/6$
- Nos pontos x_{i+1} e x_{i-1}:
  - $y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i).h + y''(x_i).h^2/2 + y'''(\xi_{i+1}).h^3/6$
  - $y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i).h + y''(x_i).h^2/2 - y'''(\xi_{i-1}).h^3/6$
- Subtraindo as equações:
  - $y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = 2y'(x_i).h + [y'''(\xi_{i+1}) - y'''(\xi_{i-1})].h^3/6$
  - $y'(x_i) = [y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})]/2h - [y'''(\xi_{i+1}) - y'''(\xi_{i-1})].h^2/12$
- Se $y'''(x)$ for limitada em [a,b], então:
  - $y'(x_i) = (y_{i+1} - y_{i-1})/2h + O(h^2)$
- Como geralmente $h<1$, esta fórmula é mais precisa

Aproximação da segunda derivada

- Com a fórmula de Taylor de $y(x)$ em torno de x_i, agora com $k = 3$, é possível estimar o erro cometido no cálculo de $y''(x_i)$
  - Nos pontos x_{i+1} e x_{i-1}:
    - $y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i).h + y''(x_i).h^2/2! + y'''(x_i).h^3/3! + y^{(4)}(\xi_{i+1}).h^4/4!$
    - $y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i).h + y''(x_i).h^2/2! - y'''(x_i).h^3/3! + y^{(4)}(\xi_{i-1}).h^4/4!$
  - Somando as equações:
    - $y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) = 2y(x_i) + y''(x_i).h^2 + [y^{(4)}(\xi_{i+1}) – y^{(4)}(\xi_{i-1})].h^4/24$
    - $y''(x_i) = [y(x_{i+1}) – 2y(x_i) + y(x_{i-1})]/h^2 - [y^{(4)}(\xi_{i+1}) - y^{(4)}(\xi_{i-1})].h^2/24$
  - Se $y^{(4)}(x)$ for limitada em $[a,b]$, então:
    - $y''(x_i) = (y_{i+1} – 2y_i + y_{i-1})/h^2 + O(h^2)$

EXEMPLO (PVC LINEAR)

- $y''(x) + 2y'(x) + y(x) = x$, onde $y(0) = 0$ e $y(1) = -1$
  - Usaremos as aproximações com erro $O(h^2)$:
    - $y'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_{i-1})/2h$
    - $y''(x_i) \approx (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2$
  - Substituindo-as na equação, e considerando $x = x_i$:
    - $(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2 + 2(y_{i+1} - y_{i-1})/2h + y_i = x_i$
    - $y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} + hy_{i+1} - hy_{i-1} + h^2y_i = h^2x_i$
    - $(1 - h)y_{i-1} + (h^2 - 2)y_i + (1 + h)y_{i+1} = ih^3$, pois $x_i = ih$
  - Como $x_0 = 0$ e $y_0 = 0$, chegamos ao sistema abaixo:

$$\begin{bmatrix} h^2-2 & 1+h & & & & \\ 1-h & h^2-2 & 1+h & & & \\ & 1-h & h^2-2 & 1+h & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & 1-h & h^2-2 & 1+h \\ & & & & 1-h & h^2-2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h^3 \\ 2h^3 \\ 3h^3 \\ \vdots \\ (n-2)h^3 \\ (n-1)h^3 + h + 1 \end{bmatrix}$$

$y(x) = 2e^{-x}(1-x) + x - 2$

- Soluções com h = 0,1 (a tabela ao lado não está completa):

x	y	solução exata	erro
0,1	-0,2720	-0,2713	0,0007
0,2	-0,4911	-0,4900	0,0011
0,3	-0,6641	-0,6629	0,0013
0,4	-0,7969	-0,7956	0,0013

EXEMPLO (PVC NÃO LINEAR)

- $y'' = y.\text{sen } y + x.y$, onde $y(0) = 1$ e $y(1) = 5$
  - Usaremos a aproximação $y''(x_i) \approx (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2$
  - Substituindo-a na equação, e considerando $x = x_i$:
    - $(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2 = y_i.\text{sen } y_i + x_i.y_i$
    - $y_{i-1} - y_i.[2 + h^2(\text{sen } y_i + ih)] + y_{i+1} = 0$, pois $x_i = ih$
  - Como $x_0 = 0$, $y_0 = 1$, $x_n = 1$ e $y_n = 5$, chegamos ao sistema não linear abaixo:
    - $1 - y_1.[2 + h^2(\text{sen } y_1 + h)] + y_2 = 0$
    - $y_{i-1} - y_i.[2 + h^2(\text{sen } y_i + ih)] + y_{i+1} = 0$, $1<i<n-1$
    - $y_{i-2} - y_{n-1}.[2 + h^2(\text{sen } y_{n-1} + (n-1)h)] + 5 = 0$
  - Soluções com h = 0,1 (a tabela abaixo também não está completa):

y_i	Resultado
y_1	1,3186
y_2	1,6513
y_3	2,0037
y_4	2,3803
y_5	2,7829
y_6	3,2091
y_7	3,6525