

CCI-22



Matemática Computacional

Carlos Alberto Alonso Sanches

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):
 - $y^{(4)}(x) + ky(x) = q$
 - $y(0) = y'(0) = 0; y(L) = y'(L) = 0$
- Ao contrário de um PVI, é comum que um PVC não tenha unicidade de solução

k é uma constante que depende do material da barra

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

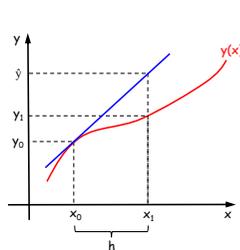
- Embora haja garantia teórica da resolução analítica de um PVI, essa solução costuma ser de difícil obtenção: por isso, utilizam-se métodos numéricos
- Dado o PVI $y' = f(x,y)$, onde $y(x_0) = y_0$, construímos x_1, x_2, \dots, x_n igualmente espaçados (embora não seja uma condição necessária), e calculamos 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 $y_{i+1} = y(x_{i+1})$:

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

- 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 $y'(x), y''(x), \dots, y^{(k)}(x)$
- Considerando $y'(x) = f(x, y(x))$, vamos calcular $y''(x)$:
 - $y''(x) = f'(x, y(x))$
 - $y''(x) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) \cdot y'(x)$, 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 $y_{i+1} \approx y_i + h \cdot f(x_i, y_i) + h^2 [f_x(x_i, y_i) + f_y(x_i, y_i) \cdot f(x_i, y_i)] / 2$
- Vamos calcular agora $y'''(x)$:
 - $y'''(x) = f_{xx}(x, y(x)) + f_{xy}(x, y(x)) \cdot y'(x) + [f_{yx}(x, y(x)) + f_{yy}(x, y(x)) \cdot y'(x)] \cdot y'(x) + f_y(x, y(x)) \cdot y''(x)$
 - $y''' = f_{xx} + f_{xy} \cdot f + f_{yx} \cdot f + f_{yy} \cdot f^2 + f_y \cdot (f_x + f_y \cdot f)$
 - $y''' = f_{xx} + 2f_{xy} \cdot f + f_{yy} \cdot f^2 + f_y \cdot f_x + f_y^2 \cdot f$
- 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

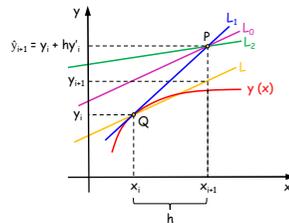
- Usando a série de Taylor de 2ª ordem, calcular $y(2,1)$, onde $xy' = x-y$ e $y(2)=2$
 - $xy' = x-y \Leftrightarrow y' = (x-y)/x \Leftrightarrow y' = 1 - y/x$
 - $y'(2) = 1 - 2/2 = 0$
 - $y'' = -y'/x + y/x^2$
 - $y''(2) = 0/2 + 2/2^2 = 1/2$
 - Série de Taylor de 2ª ordem:
 - $y(x) \approx y(2) + (x-2)y'(2)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

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

- Vejam 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*:
 - São métodos de passo simples
 - Não exigem o cálculo de qualquer derivada de $f(x,y)$; por esse motivo, calculam $f(x,y)$ em vários pontos
 - 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:
 - $y_{i+1} = y_i + a_1 k_1 h + a_2 [f(x_i, y_i) + p_1 h f_x(x_i, y_i) + q_{11} k_1 h f_y(x_i, y_i) + O(h^2)]h$
 - $y_{i+1} = y_i + a_1 h f(x_i, y_i) + a_2 h f(x_i, y_i) + a_2 p_1 h^2 f_x(x_i, y_i) + a_2 q_{11} h^2 f_y(x_i, y_i) f(x_i, y_i) + O(h^3)$
- Por outro lado, a série de Taylor de 2ª ordem para y_{i+1} é:
 - $y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + f'(x_i, y_i)h^2/2!$
 - $y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + [f_x(x_i, y_i) + f_y(x_i, y_i)f(x_i, y_i)]h^2/2$
 - $y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i) + h^2 f_x(x_i, y_i)/2 + h^2 f_y(x_i, y_i) f(x_i, y_i)/2$
- 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 $h = 0,2$
 - $f(x,y) = x - y$
 - $x_0 = 0, x_i = x_0 + 0,2i$
 - $y_0 = 2$
 - $k_1 = f(x_i, y_i)$
 - $k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1h)$
 - $y_{i+1} = y_i + (\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2)h$

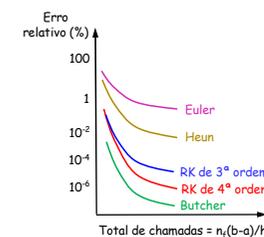
i	x_i	y_i	k_1	k_2
0	0,0	2,0	-2,0	-1,4
1	0,2	1,66	-1,46	-0,968
2	0,4	1,4172	-1,0172	-0,61376
3	0,6	1,254104	-0,654104	-0,323283
4	0,8	1,1563652	-0,356369	-0,0850914
5	1,0	1,1122192		

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 $s = (x-x_i)/h$, $dx = h \cdot ds$ 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 $s = (x-x_i)/h$, $dx = h \cdot ds$ 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 $g(s) = (s+1)(s+2)(s+3)$ 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 $s = (x-x_i)/h$, $dx = h \cdot ds$ e $x = hs + x_i$. Então:
 - $L_{-2}(s) = -(s+1)s(s-1)/6 = -(s^3 - s)/6$
 - $L_{-1}(s) = (s+2)s(s-1)/2 = (s^3 + 2s^2 - 2s)/2$
 - $L_0(s) = -(s+2)(s+1)(s-1)/2 = -(s^3 + 2s^2 - s - 2)/2$
 - $L_1(s) = (s+2)(s+1)s/6 = (s^3 + 3s^2 + 2s)/6$
- Substituindo na integral:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_3(x) dx = \frac{-h}{6} \int_{-2}^{-1} L_{-2}(s) ds + \frac{h}{2} \int_{-1}^0 L_{-1}(s) ds - \frac{h}{2} \int_0^1 L_0(s) ds + \frac{h}{6} \int_0^1 L_1(s) ds$$

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

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 $s = (x-x_i)/h$, $dx = h \cdot ds$ 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
 - $k_{f1} = f(x_0, y_0, z_0) = f(0; 0; 0) = 0$
 - $k_{g1} = g(x_0, y_0, z_0) = g(0; 0; 0) = e^0 - 0 = 1$
 - $k_{f2} = f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_{f1}h, z_0 + \frac{1}{2}k_{g1}h) = f(0,25; 0; 0,25) = 0,25$
 - $k_{g2} = g(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_{f1}h, z_0 + \frac{1}{2}k_{g1}h) = g(0,25; 0; 0,25) = e^{0,25} - 2 \cdot 0^2 = 1,2840$
 - $k_{f3} = f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + k_{f2}h, z_0 + k_{g2}h) = f(0,25; 0,0625; 0,321) = 0,321$
 - $k_{g3} = g(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + k_{f2}h, z_0 + k_{g2}h) = g(0,25; 0,0625; 0,321) = e^{0,25} - 2 \cdot 0,0625^2 = 1,2762$
 - $k_{f4} = f(x_0 + h, y_0 + k_{f3}h, z_0 + k_{g3}h) = f(0,5; 0,1605; 0,6381) = 0,6381$
 - $k_{g4} = g(x_0 + h, y_0 + k_{f3}h, z_0 + k_{g3}h) = g(0,5; 0,1605; 0,6381) = e^{0,5} - 2 \cdot 0,1605^2 = 1,5972$
 - $y_1 = y_0 + (k_{f1} + 2k_{f2} + 2k_{f3} + k_{f4})h/6 = 0 + (0 + 2 \cdot 0,25 + 2 \cdot 0,321 + 0,6381) \cdot 0,5/6 = 0,1483$
 - $z_1 = z_0 + (k_{g1} + 2k_{g2} + 2k_{g3} + k_{g4})h/6 = 0 + (1 + 2 \cdot 1,284 + 2 \cdot 1,2762 + 1,5972) \cdot 0,5/6 = 0,6431$
 - $y(0,5) \approx 0,1483$
 - $y'(0,5) = e^{0,5} - 2y(0,5)^2 \approx 1,6047$

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:

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

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

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

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

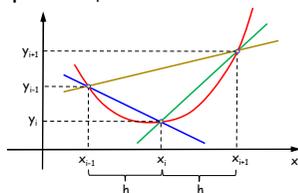
- Definições
- Problemas de Valor Inicial (PVI)
 - Métodos de passo simples
 - Método de Euler
 - Métodos de série de Taylor
 - Métodos de Runge-Kutta
 - Métodos de passo múltiplo
 - Métodos explícitos (Adams-Bashforth)
 - Métodos implícitos (Adams-Moulton)
 - Métodos de previsão-correção
 - Equações 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 ξ 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*:
 - $y'(x_i) = (y_i - y_{i-1})/h + O(h)$

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 derivada segunda

- 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:
 - $y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) = 2y(x_i) + y''(x_i)h^2 + [y^{(4)}(\xi_{i+1}) + y^{(4)}(\xi_{i-1})]h^4/24$
 - $y''(x_i) = [y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) - 2y(x_i)]/h^2 - [y^{(4)}(\xi_{i+1}) + y^{(4)}(\xi_{i-1})]h^2/24$
- Se $y^{(4)}(x)$ for limitada em $[a,b]$, então:
 - $y''(x_i) = (y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i)/h^2 + O(h^2)$

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 $x_i = ih$, $0 < i < n$
 - Como $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $x_n = 1$ e $y_n = -1$, chegamos ao sistema abaixo:

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

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

- 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)

- $y'' = y \cdot \text{sen } y + x \cdot y$, 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 $x = x_i$:
 - $(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2 = y_i \cdot \text{sen } y_i + x_i \cdot y_i$
 - $y_{i+1} - y_i \cdot [2 + h^2(\text{sen } y_i + ih)] + y_{i-1} = 0$, pois $x_i = ih$
 - Como $x_0 = 0$, $y_0 = 1$, $x_n = 1$ e $y_n = 5$, chegamos ao sistema não linear abaixo:
 - $1 - y_1 \cdot [2 + h^2(\text{sen } y_1 + h)] + y_2 = 0$
 - $y_{i-1} - y_i \cdot [2 + h^2(\text{sen } y_i + ih)] + y_{i+1} = 0$, $1 < i < n-1$
 - $y_{n-2} - y_{n-1} \cdot [2 + h^2(\text{sen } y_{n-1} + (n-1)h)] + 5 = 0$
 - 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