

Matemática Computacional
Equações Diferenciais Ordinárias
maria irene falcão

Mestrado em Matemática e Computação

5. Problemas de valor inicial

5.1 Problemas de valor inicial: background

5.1.1 Introdução

As equações diferenciais são usadas para descrever um grande número de fenómenos em ciências e tecnologia. Para grande parte das equações diferenciais que aparecem nos problemas, não é possível encontrar uma solução por processos analíticos, sendo, assim, indispensável o recurso a métodos numéricos para a obtenção de solução (aproximada). De facto, a necessidade de resolver (numericamente) equações diferenciais foi uma das grandes motivações para o desenvolvimento dos computadores. Ainda hoje, grande parte do tempo de “computação científica” é gasto na resolução de problemas de equações diferenciais.

Nestes textos, é feita uma introdução resumida ao problema da resolução numérica de equações diferenciais **ordinárias**.

Nestes capítulo, consideramos apenas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, isto é, equações que possam ser escritas como

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad (5.1)$$

onde f é uma função dada de duas variáveis, x é a variável independente e $y(x)$ é a função incógnita que pretendemos determinar.

Naturalmente, muitos problemas físicos envolvem equações diferenciais de ordem superior à primeira; note-se, todavia, que uma tal equação diferencial pode ser reformulada como um sistema de equações diferenciais de primeira ordem, através do “artifício” de introduzir novas variáveis iguais às derivadas de y . Por exemplo, a equação diferencial de segunda ordem

$$y'' + f(x)y' + g(x)y = h(x)$$

pode ser transformada no seguinte sistema de duas equações de primeira ordem:

$$\begin{cases} y' = u \\ u' = h(x) - g(x)y - f(x)u \end{cases}$$

Exemplo 5.1 A chamada equação de **van der Pol**

$$y'' - \mu(1 - y^2)y' + y = 0$$

pode reescrever-se como

$$\mathbf{z}' = \begin{pmatrix} y \\ u \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} u \\ \mu(1 - y^2)u - y \end{pmatrix}$$

Os métodos numéricos que descreveremos para **uma** equação de primeira ordem generalizam-se de maneira simples para **sistemas** de tais equações, pelo que o caso aqui abordado não é tão restritivo quanto possa parecer.

5.1.2 Existência e unicidade de solução

Em geral, como sabemos, uma equação do tipo (5.1) admite uma infinidade de soluções. Por exemplo, facilmente se verifica que a equação diferencial

$$y'(x) = y,$$

é satisfeita por qualquer função do tipo $y(x) = Ce^x$, para qualquer valor arbitrário da constante C .

Normalmente, pretende-se uma solução (particular) da equação (5.1), isto é, pretende-se encontrar a solução que satisfaz uma condição adicional do tipo

$$y(a) = \alpha. \quad (5.2)$$

A condição anterior é referida como **condição inicial** e o problema de resolver

$$y'(x) = f(x, y), \quad y(a) = \alpha \quad (5.3)$$

é dito um problema de valores iniciais (PVI).

Por exemplo, o PVI

$$y'(x) = y, \quad y(0) = 1$$

tem como solução $y = e^x$.

O teorema seguinte estabelece condições de existência e unicidade de solução de um problema de valores iniciais do tipo (5.3).

Teorema 5.1 (Picard-Lindelöf) *Seja $f(x, y)$ definida e contínua para todos os pontos (x, y) tais que $a \leq x \leq b$, $y \in \mathbb{R}$ (a e b finitos). Se f satisfaz uma condição de Lipschitz relativamente à segunda variável, i.e., se existe uma constante $0 < L < \infty$ tal que*

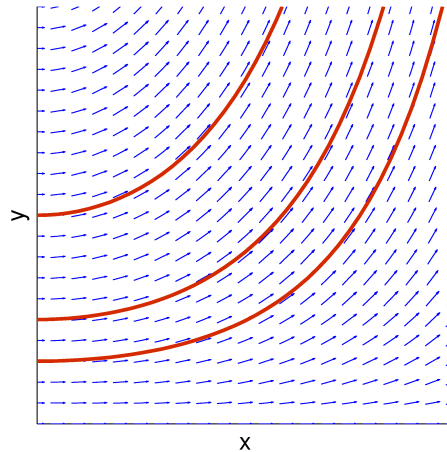
$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|,$$

para $a \leq x \leq b$ e quaisquer $y_1, y_2 \in \mathbb{R}$, então, dado qualquer valor α existe uma e uma só solução do problema

$$y'(x) = f(x, y), \quad y(a) = \alpha.$$

Demonstração. Ver, por exemplo, Henrici, *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*. New York/London 1962. John Wiley & Sons.

Nota 5.1 O enunciado do teorema anterior pode ser formulado do seguinte modo: por cada ponto (x_0, y_0) , onde $x_0 \in [a, b]$, passa uma e uma só “curva” $y(x)$ que é a solução da equação $y'(x) = f(x, y)$.



5.1.3 Métodos de variável discreta

Retomemos então o PVI (5.3) e suponhamos que o problema admite uma e uma só solução $y(x)$ que pretendemos aproximar numericamente.

Os métodos numéricos que vamos descrever são baseados na seguinte ideia: como não conseguimos determinar $y(x)$ para todo o $x \in [a, b]$, temos de satisfazer-nos em calcular **aproximações** y_k para os valores $y(x_k)$ num **conjunto discreto de pontos** $(x_k)_{k=0}^N$, nesse intervalo. Para simplificar, suporemos que esses pontos são equidistantes, isto é, que

$$x_k = a + kh; \quad k = 0, 1, \dots, N, \quad (5.4)$$

onde o **passo** h é dado por

$$h = \frac{b - a}{N}, \quad (5.5)$$

para um determinado inteiro N .

O valor inicial dá-nos

$$y_0 = y(x_0) = y(a) = \alpha.$$

A ideia é tentar, a partir deste valor, determinar y_1 como aproximação para $y(x_1)$, y_2 como aproximação para $y(x_2)$ etc.

Os métodos que determinam aproximações para a solução do problema num conjunto discreto de pontos (x_k) da variável independente são chamados **métodos de variável discreta**.

5.1.4 Método de Euler

O mais simples dos métodos de variável discreta é o chamado **Método de Euler**, que passamos a descrever. Devemos referir aqui que o método de Euler é raramente utilizado na prática, uma vez que existem outros métodos bastante mais eficientes; a razão de iniciarmos o estudo dos métodos de variável discreta com o método de Euler tem a ver com o facto de este método ser extremamente simples, mas possuir já as diversas características que pretendemos estudar para os métodos mais elaborados.

A ideia do método de Euler é muito simples. Aqui e em tudo quanto se segue, admitimos que y admite derivadas até à ordem indicada.

Expandindo $y(x_{k+1})$ em série de Taylor em torno do ponto x_k , obtém-se

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k + h) = y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_k) \\ &= y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_k), \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde $\xi_k \in (x_k, x_{k+1})$.

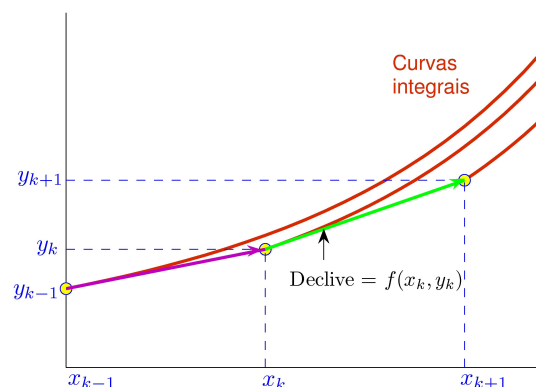
Se y'' for limitada e o passo h for “pequeno”, será natural “ignorar” o último termo em (5.6), tendo-se

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)).$$

Esta é a base do **método de Euler** para aproximar a solução do PVI (5.3), o qual será, portanto definido por

$$\left| \begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + hf(x_k, y_k); \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \\ y_0 &= \alpha. \end{aligned} \right. \quad (5.7)$$

Geometricamente, o Método de Euler consiste em aproximar a solução em x_{k+1} , seguindo a tangente à curva integral em x_k



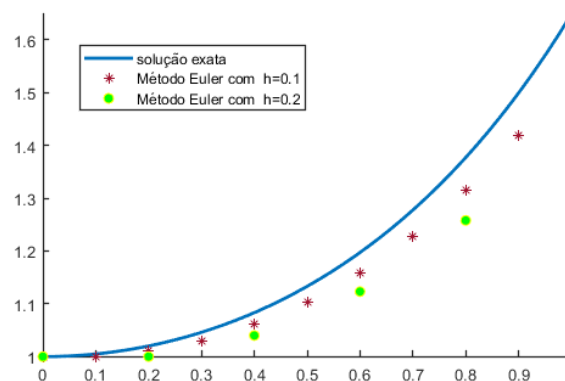
Exemplo 5.2 Consideremos o PVI

$$y' = xy, \quad y(0) = 1,$$

cujas solução exata é $y(x) = e^{x^2/2}$.

Os resultados do Método de Euler com passo $h = 0.2$ e $h = 0.1$ apresentam-se nas tabelas e figura seguinte.

$h = 0.2$					$h = 0.1$				
k	x_k	y_k	$y(x_k)$	Erro	k	x_k	y_k	$y(x_k)$	Erro
1	0.2	1.000	1.020	0.020	1	0.1	1.000	1.005	0.005
2	0.4	1.040	1.083	0.043	2	0.2	1.010	1.020	0.010
\vdots					3	0.3	1.030	1.046	0.016
					4	0.4	1.062	1.083	0.022
					\vdots				



Como a tabela e a figura anterior indicam, a solução calculada é afetada de erro (como seria de esperar). Uma questão importante na utilização de um método numérico é, naturalmente, saber qual o tipo de precisão das aproximações y_k para $y(x_k)$. O erro nas aproximações obtidas vem de duas fontes: erros de arredondamento cometidos ao efetuar as operações aritméticas envolvidas na utilização do método e erro de truncatura (ou discretização), inerente ao próprio método. De momento, vamos ignorar os erros de arredondamento e concentrar-nos apenas no estudo do erro de discretização.

Relativamente ao erro de discretização, vamos ainda distinguir o chamado **erro de discretização local** do chamado **erro de discretização global**.

Definição 5.1 Chama-se **erro de discretização local** no ponto x_{k+1} e denota-se por $\mathcal{L}_h(x_{k+1})$, ao erro produzido na aplicação do passo k do método (isto é, ao erro cometido ao passar de y_k para y_{k+1}), supondo que partimos da solução exata, isto é, supondo que $y_k = y(x_k)$.

Teorema 5.2 Consideremos o PVI (5.3) e suponhamos que $y \in C^2[a, b]$ e $M = \max_{a \leq x \leq b} |y''(x)|$. O erro de discretização local do Método de Euler, no ponto x_{k+1} satisfaz

$$|\mathcal{L}_h(x_{k+1})| \leq \frac{h^2}{2} M. \quad (5.8)$$

Demonstração. Sendo $\mathcal{L}_h(x_{k+1}) = y(x_{k+1}) - y_{k+1}$ e usando (5.6) e (5.7), obtém-se

$$\mathcal{L}_h(x_{k+1}) = y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_k) - (y_k + hf(x_k, y_k)) = \frac{h^2}{2} y''(\xi_k), \quad \xi_k \in (x_k, x_{k+1}),$$

uma vez que estamos a supor que não há erro até ao passo k , isto é, que $y(x_k) = y_k$. Nessas condições, podemos concluir que o erro de discretização local do método de Euler é $\mathcal{O}(h^2)$. \square

Na prática, ao calcularmos o valor y_{k+1} , usaremos o valor de y_k (aproximação para $y(x_k)$), o qual já foi calculado usando y_{k-1} , etc. Há, assim, que ter em conta a acumulação dos erros de discretização até chegar ao valor de y_{k+1} . Mais precisamente, tem-se a seguinte definição.

Definição 5.2 Chama-se **erro de discretização global** no ponto x_{k+1} e denota-se por $\epsilon_h(x_{k+1})$ ao erro acumulado nos diversos passos até se chegar a y_{k+1} , isto é

$$\epsilon_h(x_{k+1}) = y(x_{k+1}) - y_{k+1}. \quad (5.9)$$

Nota 5.2 Note-se que o valor de y_{k+1} referido na fórmula não é o valor “efetivamente” calculado, o qual vem, naturalmente afetado de erros de arredondamento.

Teorema 5.3 Consideremos o PVI (5.3) nas condições do Teorema 5.2 e que, além disso, f é diferenciável em relação à segunda variável com derivada parcial $\frac{\partial f}{\partial y}$ limitada, isto é, suponhamos que existe $L > 0$ tal que $|\frac{\partial f}{\partial y}| \leq L, \forall x \in [a, b]$. O erro de discretização global do Método de Euler, no ponto x_{k+1} satisfaz

$$|\epsilon_h(x_{k+1})| \leq \frac{hM}{2L} (e^{(x_k - x_0)L} - 1). \quad (5.10)$$

Demonstração. Temos, neste caso,

$$\begin{aligned} |\epsilon_h(x_{k+1})| &= |y(x_{k+1}) - y_{k+1}| = |y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_k) - y_k - hf(x_k, y_k)| \\ &\leq |y(x_k) - y_k| + h|f(x_k, y(x_k)) - f(x_k, y_k)| + \frac{h^2}{2} M \\ &= |\epsilon_h(x_k)| + h|\frac{\partial f}{\partial y}(x_k, \mu_k)(y(x_k) - y_k)| + \frac{h^2}{2} M, \quad (\text{com } \mu_k \text{ entre } y(x_k) \text{ e } y_k) \\ &\leq |\epsilon_h(x_k)| + hL|\epsilon_h(x_k)| + \frac{h^2}{2} M \\ &= (1 + hL)|\epsilon_h(x_k)| + \frac{h^2}{2} M \end{aligned}$$

Assim, tem-se

$$\begin{aligned}
 |\epsilon_h(x_k)| &\leq (1 + hL)|\epsilon_h(x_{k-1})| + \frac{h^2}{2}M \\
 &\leq (1 + hL) \left((1 + hL)|\epsilon_h(x_{k-2})| + \frac{h^2}{2}M \right) + \frac{h^2}{2}M \\
 &\vdots \\
 &\leq (1 + hL)^k |\epsilon_h(x_0)| + (1 + hL)^{k-1} \frac{h^2}{2}M + \dots + \frac{h^2}{2}M \\
 &= \frac{h^2}{2}M \left(1 + (1 + hL) + \dots + (1 + hL)^{k-1} \right) \\
 &= \frac{h^2}{2}M \frac{(1 + hL)^k - 1}{(1 + hL) - 1} = \frac{hM}{2L} (1 + hL)^{k-1}
 \end{aligned}$$

Como $1 + a < e^a$, $\forall a > 0$, vem finalmente $|\epsilon_h(x_k)| \leq \frac{hM}{2L} (e^{hkL} - 1) = \frac{hM}{2L} (e^{(x_k - x_0)L} - 1)$. \square

Assim, podemos concluir que, nas condições referidas para a função f e para a solução y do problema de valores iniciais (5.3), o erro de discretização global do método de Euler é $\mathcal{O}(h)$. Dizemos, por isso, que o método de Euler é um método de primeira ordem.

Em particular, se denotarmos por $E(h) := \max_{1 \leq k \leq N} |\epsilon_h(x_k)|$, temos que

$$E(h) \leq \frac{hM}{2L} (e^{(b-a)L} - 1).$$

Estimativa para o erro no método de Euler

Pode obter-se uma estimativa para o erro no método de Euler, observando o seguinte. De (5.10), vem

$$|\epsilon_h(x_k)| = |y(x_k) - y_k| \leq Ch,$$

onde C é uma constante independente de h . Se denotarmos por \tilde{y}_k a aproximação para $y(x_k)$ obtida usando passo $2h$,¹ ter-se-á

$$|y(x_k) - \tilde{y}_k| \leq C(2h).$$

Temos, então que

$$|y(x_k) - y_k| \approx \frac{1}{2}|y(x_k) - \tilde{y}_k| = \frac{1}{2}|y(x_k) - y_k + y_k - \tilde{y}_k| \leq \frac{1}{2}|y(x_k) - y_k| + \frac{1}{2}|y_k - \tilde{y}_k|,$$

donde se obtém a seguinte **estimativa** para o erro de discretização no ponto x_k (correspondente ao uso do passo “mais fino”)

$$|\epsilon_h(x_k)| = |y(x_k) - y_k| \approx |y_k - \tilde{y}_k|. \quad (5.11)$$

Método de Euler no MATLAB

A implementação do Método de Euler no Matlab é muito simples. Para resolver, por exemplo, o PVI do Exemplo 5.2, basta fazer:

¹Estamos, implicitamente, a admitir que k é par.

```
>> f=@(x,y) x.*y;
>> y=metEuler(f,0,0.4,1,4)
```

sendo metEuler a função cujo código se apresenta de seguida.

M-file metEuler

```
function y=metEuler(f,a,b,alfa,N)
h=(b-a)/N;
x=a:h:b;
y=zeros(1,N+1);
y(1)=alfa;
for k=1:N
y(k+1)=y(k)+h*f(x(k),y(k));
end
```

Exercício 5.1 Considere o seguinte problema de valores iniciais

$$\begin{cases} y' = xy^2, & x \in [0, 1], \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

- Usando a função **metEuler**, calcule aproximações para $y(1.0)$, usando, sucessivamente, $N = 10, 20, 40, 80$.
- Sabendo que a solução exata do problema é dada por $y(x) = \frac{2}{2-x^2}$, diga se os seus resultados ilustram a ordem de convergência $\mathcal{O}(h)$ do método.

Exercício 5.2 Modifique convenientemente a função **metEuler** para que ela possa calcular a solução de um sistema de m equações de primeira ordem:

$$\begin{cases} \mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), & x \in [a, b], \\ \mathbf{y}(a) = \mathbf{a}, \end{cases} \quad (5.12)$$

onde

$$\mathbf{y}(x) = (y_1(x), \dots, y_m(x)), \quad \mathbf{f} = (f_1, \dots, f_m), \quad \mathbf{a} = (a_1, \dots, a_m).$$

Teste a sua função para encontrar uma solução aproximada, no ponto $x = 0.2$, do seguinte problema de valores iniciais (use $h = 0.01$):

$$\begin{cases} y''(x) = xy, \\ y(0) = 1, \quad y'(0) = 1. \end{cases}$$

5.1.5 Métodos baseados na série de Taylor

Recordemos que o método de Euler foi deduzido truncando a expansão em série de Taylor de $y(x_{k+1})$ em torno de x_k antes do termo $\mathcal{O}(h^2)$. Métodos de ordem superior poderiam ser obtidos de modo análogo, retendo mais termos da série de Taylor. Por exemplo, tem-se

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2}y''(x_k) + \frac{h^3}{6}y'''(\xi_k) \\ &= y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}f\right)(x_k, y(x_k)) + \frac{h^3}{6}y'''(\xi_k) \end{aligned}$$

donde se poderia obter o método

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f \right)(x_k, y_k),$$

o qual teria ordem de convergência local $\mathcal{O}(h^3)$ e ordem de convergência global $\mathcal{O}(h^2)$. Este tipo de métodos baseados na expansão em série de Taylor têm, no entanto, a desvantagem de necessitarem do cálculo das derivadas parciais da função f , o que os pode tornar bastante trabalhosos.

Exercício 5.3 Considere o problema de valores iniciais

$$\begin{cases} y'(x) = \sin(xy), \\ y(0) = \pi. \end{cases}$$

- Encontre uma solução aproximada no ponto $x = 0.4$, usando o método de Euler, com passo $h = 0.1$.
- Escreva a expressão do método de Taylor de 2ª ordem para o problema dado.
- Encontre uma solução aproximada para o mesmo ponto $x = 0.4$, usando o método de Taylor de 2ª ordem, com passo $h = 0.1$.

5.1.6 Métodos de Runge-Kutta

Os chamados métodos de Runge-Kutta foram desenvolvidos com o objetivo de produzir aproximações para a solução do PVI

$$y'(x) = f(x, y), \quad y(a) = b$$

com o mesmo grau de precisão fornecida pelos métodos obtidos pela expansão em série de Taylor, mas evitando o cálculo das diversas derivadas da função f . Estas técnicas foram desenvolvidas pelos matemáticos alemães C. Runge (1856-1927) e M. W. Kutta (1867-1944).

Pretende-se obter fórmulas do tipo

$$y_{k+1} = y_k + b_1 k_1 + b_2 k_2 + \dots + b_s k_s, \quad (5.13)$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_k, y_k) \\ k_2 &= hf(x_k + c_2 h, y_k + a_{21} k_1) \\ k_3 &= hf(x_k + c_3 h, y_k + a_{31} k_1 + a_{32} k_2) \\ &\vdots \\ k_{s-1} &= hf(x_k + c_{s-1} h, y_k + a_{s-1,1} k_1 + a_{s-1,2} k_2 + \dots + a_{s-1,s-2} k_{s-2}) \\ k_s &= hf(x_k + c_s h, y_k + a_{s1} k_1 + a_{s2} k_2 + \dots + a_{s,s-2} k_{s-2} + a_{s,s-1} k_{s-1}) \end{aligned}$$

e a_{ij} , b_i e c_i são constantes a determinar por forma a que, ao substituirmos y_{k+1} e y_k por $y(x_{k+1})$ e $y(x_k)$, respetivamente, em (5.13), obtenhamos coincidência com a série de Taylor truncada

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2}y''(x_k) + \dots + \frac{h^m}{m!}y^{(m)}(x_k) \quad (5.14)$$

da maior ordem possível.

Os parâmetros que definem os métodos de Runge-Kutta (5.13) podem ser organizados num quadro, conhecido como **quadro de Butcher**, da seguinte forma:

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots		
c_{s-1}	$a_{s-1,1}$	$a_{s-1,2}$	\dots	$a_{s-1,s-2}$	
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	$a_{s,s-2}$	$a_{s,s-1}$
	b_1	b_2	\dots	b_{s-2}	$b_{s-1} \quad b_s$

Método de Runge-Kutta de ordem 2

Pretende-se, neste caso, obter uma fórmula do tipo

$$y_{k+1} = y_k + ak_1 + bk_2, \quad (5.15)$$

com

$$k_1 = hf(x_k, y_k)$$

$$k_2 = hf(x_k + \beta_1 h, y_k + \beta_2 k_1)$$

Derivando y em ordem a x , sucessivamente, e notando que $y'(x) = f(x, y(x))$, tem-se²

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k) + hf + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f \right) + \\ &+ \frac{h^3}{6} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} f^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 f \right) + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Por outro lado, usando a fórmula de Taylor para funções de duas variáveis, tem-se³

$$\begin{aligned} f(x_k + \beta_1 h, y(x_k) + \beta_2 hf(x_k, y(x_k))) &= f + \beta_1 h \frac{\partial f}{\partial x} + \beta_2 h f \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\beta_1^2 h^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \\ &\beta_1 \beta_2 h^2 f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{\beta_2^2 h^2}{2} f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \quad (5.17)$$

Substituindo (5.17) em (5.15), (com y_k e y_{k+1} substituídos, por $y(x_k)$ e $y(x_{k+1})$), vem, após rearranjo segundo as potências crescentes de h :

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k) + (a + b)hf + bh^2 \left(\beta_1 \frac{\partial f}{\partial x} + \beta_2 \frac{\partial f}{\partial y} f \right) \\ &+ bh^3 \left(\frac{\beta_1^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \beta_1 \beta_2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\beta_2^2}{2} f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned} \quad (5.18)$$

²No lado direito da equação, f e as suas derivadas são calculadas em $(x_k, y(x_k))$

³Considera-se, uma vez mais, que f e as suas derivadas parciais estão calculadas em $(x_k, y(x_k))$.

Igualando os coeficientes das potências de h do mesmo grau de (5.18) e (5.16) até à ordem 2, vem:

$$\begin{cases} a + b = 1 \\ \beta_1 b = \frac{1}{2} \\ \beta_2 b = \frac{1}{2} \end{cases}$$

O sistema anterior é um sistema de 3 equações em 4 incógnitas, pelo que temos ainda um grau de liberdade na sua solução. Poderíamos usar esse grau de liberdade para tentar obter concordância no coeficiente de h^3 ; é imediato concluir, no entanto, que tal é impossível para todas as funções $f(x, y)$. Um solução particularmente simples do sistema será dada por

$$a = b = \frac{1}{2}; \quad \beta_1 = \beta_2 = 1.$$

O Método de Runge-Kutta de 2ª ordem é, então definido por:

$$\left| \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \\ k_1 = hf(x_k, y_k) \\ k_2 = hf(x_k + h, y_k + k_1) \\ y_0 = \alpha \end{array} \right. \quad (5.19)$$

sendo o correspondente quadro de Butcher o seguinte:

0	
1	1
	$\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}$

Método de Runge-Kutta de ordem 4

De um modo análogo, se deduz a fórmula do **método de Runge-Kutta de 4ª ordem**:

$$\left| \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ k_1 = hf(x_k, y_k), \\ k_2 = hf(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{k_1}{2}), \\ k_3 = hf(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{k_2}{2}), \\ k_4 = hf(x_k + h, y_k + k_3), \\ y_0 = \alpha. \end{array} \right. \quad (5.20)$$

O quadro de Butcher é, neste caso, o seguinte:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

Exercício 5.4 Escreva uma função $y = \text{metRK}(f, a, b, \alpha, N, \text{ordem})$ para resolver um sistema de m equações de primeira ordem da forma (5.12), usando o método de Runge-Kutta de ordem 2 ou 4 ($\text{ordem}=2$ ou $\text{ordem}=4$, respetivamente).

Teste a sua função para resolver o seguinte problema de valores iniciais

$$\begin{cases} y''(x) - 3y'(x) + 2y(x) = 6e^{3x}, & x \in [0, 1], \\ y(0) = 1, & y'(0) = -1, \end{cases}$$

tomando $N = 10$. Apresente graficamente e sob a forma de uma tabela, os valores aproximados para y e y' , valores exatos e erros respetivos.

Nota: A solução exata do problema é $y(x) = -8e^{2x} + 6e^x + 3e^{3x}$.

Exercício 5.5 Considere um problema de valores iniciais da forma (5.3) e suponha que $f(x, y)$ é apenas função de x . Mostre que, neste caso, o método de Runge-Kutta de 4ª ordem se reduz à aplicação da regra de Simpson:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx = y(x_{k+1}) - y(x_k) \approx \frac{h}{6} [f(x_k) + 4f(x_k + \frac{h}{2}) + f(x_k + h)].$$

Métodos de passo único

Os métodos que acabámos de descrever pertencem à classe dos chamados métodos de **passo único** os quais podem ser escritos na forma geral

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k),$$

para alguma função ϕ . Nestes métodos, o passo $k+1$ baseia-se **apenas** no uso de informação obtida no passo k . No caso dos métodos de Euler e Runge-Kutta tem-se:

Euler: $\phi(x, y) = f(x, y)$

R-K ordem 2: $\phi(x, y) = \frac{1}{2} (f(x, y) + f(x + h, y + h(f(x, y))))$.

Pode provar-se, sob certas condições em ϕ e f que, se o erro de discretização local de um método é $\mathcal{O}(h^p)$, então o erro de discretização global é $\mathcal{O}(h^{p-1})$.

5.1.7 Exercícios

Exercício 5.6 Considere a aplicação de um método de passo único na resolução do PVI (5.3). Seja \tilde{y}_k uma aproximação para $y(x_k)$, obtida usando um método de ordem p com passo h e seja y_k o valor obtido repetindo o processo com passo $h/2$. Estabeleça a seguinte estimativa para o erro de discretização:

$$\epsilon_{h/2}(x_k) = |y(x_k) - y_k| \approx \frac{|y_k - \tilde{y}_k|}{2^p - 1}.$$

Exercício 5.7 Considere a aplicação de um método de Runge-Kutta na resolução do PVI (5.3). Seja y_k o valor obtido com um método de ordem p e \bar{y}_k o valor obtido com um método de ordem $p + 1$. Estabeleça a seguinte estimativa para o erro de discretização:

$$\epsilon_h(x_k) = |y(x_k) - y_k| \approx |y_k - \bar{y}_k|.$$

Exercício 5.8 Considere, com a notação usual, o método definido por,

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3); k = 0, 1, \dots, N-1, \\ k_1 = f(x_k, y_k), \\ k_2 = f(x_k + \frac{h}{3}, y_k + \frac{h}{3}k_1), \\ k_3 = f(x_k + \frac{2h}{3}, y_k + \frac{2h}{3}k_2), \\ y_0 = \alpha. \end{array} \right.$$

- Faça o quadro de Butcher deste método.
- Mostre que se trata de um método de ordem 3.
- Escreva uma *script*/função para implementar este método.
- Considere o PVI

$$\left\{ \begin{array}{l} y'(x) = -y(x) + x^2 + 2x, \\ y(0) = 1, \end{array} \right.$$

cujas solução exata é $y(x) = e^{-x} + x^2$. Apresente, sob a forma de tabela, os valores obtidos para $y(1)$ e os correspondentes erros, considerando, sucessivamente, $N = 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640$.

- Os resultados obtidos permitem-lhe ilustrar a ordem de convergência deste método? Justifique.

Exercício 5.9 Em https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_Runge-Kutta_methods pode encontrar uma lista de métodos de Runge-Kutta, definidos pelo seu quadro de Butcher. Escolha um dos métodos (explícitos) e prove a sua ordem de convergência.

5.2 Métodos de passo único adaptativos

5.2.1 Controle adaptativo do passo

Consideremos um método de passo único da forma

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k),$$

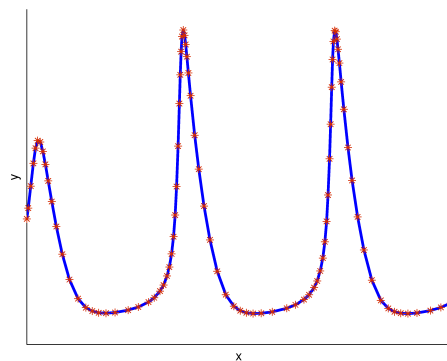
com erro de discretização $\mathcal{O}(h^p)$. Naturalmente que, na aplicação do método há também que ter em conta os erros de arredondamento envolvidos, em particular, na avaliação da função ϕ . Se é um facto que o erro de discretização diminui com h , também é verdade que quanto menor for o valor de h mais passos do método são necessários e, em geral, maior será o efeito dos erros de arredondamento na solução calculada.

Na prática, isto significa que, a partir de determinado valor do passo, os erros de arredondamento podem ser dominantes relativamente aos erros de discretização e nada se ganha com a diminuição do passo.

Relembremos que, por exemplo, para o Método de Euler, o erro de discretização local satisfaz $|\mathcal{L}_h(x_{k+1})| \leq \frac{h^2}{2} M$, onde $M = \max_{a \leq x \leq b} |y''(x)|$ (cf. (5.8)).

Isto significa que o erro será, em princípio, pequeno se a segunda derivada da solução for pequena. Em regiões onde isto acontece, pode obter-se a precisão desejada, usando um valor do passo h relativamente grande. Em contrapartida, se M é grande, é necessário usar um passo mais pequeno para controlar o erro.

Esta é a ideia do controle adaptativo do passo: usar uma malha que tem mais pontos (h menor) nas regiões onde a solução tiver uma variação mais rápida e menos pontos (h maior) nas zonas em que y variar lentamente.



No caso dos métodos de Runge-Kutta, a estratégia é análoga, mas devem ser tidas em linha de conta derivadas da solução de ordem superior. Note-se que, geralmente, estas derivadas não são conhecidas. No entanto, em algumas situações são conhecidas as regiões onde a solução varia mais e onde varia menos, podendo o passo ser adaptado em função desse facto.

Atualmente todos os bons códigos que usam Métodos de Runge-Kutta empregam mecanismos para automaticamente alterar o valor do passo h à medida que o processo avança.

O procedimento usual é estimar o erro de discretização local e ajustar o passo adequadamente. Há duas formas simples de o fazer:

Processo 1

Usar um método de ordem p para calcular uma aproximação \tilde{y}_k com passo h e repetir o processo com passo $h/2$ para obter uma outra aproximação (em princípio diferente da anterior) y_k e comparar os resultados, usando a estimativa proposta no Exercício 5.6,

$$|\epsilon_{h/2}(x_k)| = |y(x_k) - y_k| \approx \frac{|y_k - \tilde{y}_k|}{2^p - 1}$$

Processo 2

Usar dois métodos de Runge-Kutta de ordem p e $p+1$: seja y_k o valor obtido com um método de ordem p e \bar{y}_k o valor obtido com um método de ordem $p+1$. Então, pelo Exercício 5.7,

$$|\epsilon_h(x_k)| = |y(x_k) - y_k| \approx |y_k - \bar{y}_k|$$

Em ambos os casos, admitimos que pretendemos distribuir uniformemente o erro ϵ no intervalo $[a, b]$. Então, se a condição $|\epsilon_h(x_k)| \leq \epsilon h$ for verdadeira, o valor obtido usando o passo correspondente é aceite. Caso contrário, deve usar-se um passo menor.

O segundo processo não teria vantagens sobre o primeiro se não fosse possível reaproveitar os valores de f utilizados no método de ordem p para o método de ordem $p+1$. Fehlberg mostrou que é possível desenvolver métodos, conhecidos como **métodos de Runge-Kutta-Fehlberg**, gozando desta propriedade.

BS(2,3) em ode23

O MATLAB tem implementada na função ode23 a técnica de usar um método de Runge-Kutta de ordem 3 para estimar o erro associado ao uso do método de Runge-Kutta de ordem 2. O algoritmo usado é da autoria de Bogacki-Shampine (1989) BS(2,3)⁴

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_k, y_k), \\ k_2 &= f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_1), \\ k_3 &= f(x_k + \frac{3}{4}h, y_k + \frac{3}{4}hk_2), \\ k_4 &= f(x_k + h, y_k + \frac{2}{9}hk_1 + \frac{1}{3}hk_2 + \frac{4}{9}hk_3), \\ &\quad k_4 \text{ pode ser reutilizado no passo seguinte} \\ y_{k+1} &= y_k + \frac{7}{24}hk_1 + \frac{1}{4}hk_2 + \frac{1}{3}hk_3 + \frac{1}{8}hk_4, & \text{ordem 2} \\ \bar{y}_{k+1} &= y_k + \frac{2}{9}hk_1 + \frac{1}{3}hk_2 + \frac{4}{9}hk_3, & \text{ordem 3} \end{aligned}$$

⁴Bogacki & Shampine, "A 3(2) pair of Runge-Kutta formulas", Appl. Math. Letters, 2, 1989, 321–325.

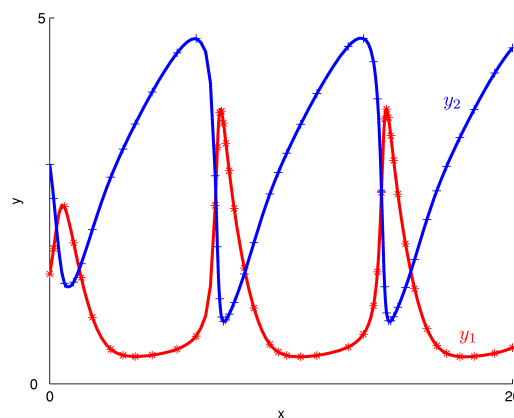
Este método precisa de 4 passos (3 avaliações da função, se o passo for aceite). Fehlberg (1979) desenvolveu o popular método F(4,5) que envolve apenas 6 passos⁵. A função ode45 do Matlab é baseada no algoritmo de 7 passos de Dormand e Prince (1980) DOPRI5⁶. O passo adicional é usado para melhorar a fórmula.

Exemplo 5.3 Resolver o sistema

$$\begin{cases} y_1' = 1 + y_1^2 y_2, & y_1(0) = 1.5 \\ y_2' = 3y_1 - y_1^2 y_2, & y_2(0) = 3 \end{cases}$$

usando a função ode45 do Matlab.

```
>> f=@(x,y) [1+y(1)^2*y(2)-4*y(1);3*y(1)-y(1)^2*y(2)];
>> options=odeset('absTol',1e-6,'RelTol',1e-3,'Stats','on');
>> [x y]=ode45(f,[0,20],[1.5;3],options);
46 successful steps
12 failed attempts
349 function evaluations
>> i=1:4:length(x);
>> plot(x,y(:,1),'r',x(i),y(i,1),'*r',x,y(:,2),'b',x(i),y(i,2),'+b')
```



5.2.2 Exercícios

Exercício 5.10 Considere o problema de valores iniciais: $y'(x) = -y(x) - 5e^{-x} \sin 5x$; $y(0) = 1$.

- Determine a solução aproximada do problema no intervalo $[0, 3]$, usando a função **ode23**.
- Sabendo que a solução exata do problema é: $y(x) = e^{-x} \cos 5x$, esboce o gráfico de $y(x)$ e da solução aproximada.

⁵ver, e.g. Heitor Pina, "Métodos Numérico", pag. 532

⁶Dormand & Prince, "A family of embedded Runge-Kutta formulae", J. Comp. Appl. Math., **6**, 1980, 19–26.

Exercício 5.11 Considere a equação do pêndulo:

$$\begin{cases} \frac{d^2\theta}{dt^2}(t) + \sin \theta(t) = 0, & t \in [0, 10], \\ \theta(0) = 1; \frac{d\theta}{dt}(0) = 1. \end{cases}$$

- Use a função `ode45` para encontrar aproximações para a solução do problema.
- Esboce o gráfico da solução.
- Repita o exercício para as condições iniciais

$$\theta(0) = -5; \frac{d\theta}{dt}(0) = 2 \quad \text{e} \quad \theta(0) = 5; \frac{d\theta}{dt}(0) = -2.$$

5.3 Métodos de Passo Múltiplo

Nos chamados **métodos de passo múltiplo**, a aproximação da solução num certo ponto é calculada usando informação acerca do valor aproximado da solução em vários pontos. Mais precisamente, vamos descrever métodos de m passos da forma

$$y_{k+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{k+1-i} + h \sum_{i=0}^m \beta_i f_{k+1-i}, \quad (5.21)$$

onde m é um inteiro fixo.

5.3.1 Métodos Explícitos :: Métodos de Adams-Bashforth

Uma classe importante de métodos de passo múltiplo é baseada no princípio de integração numérica. Suponhamos, então, que são já conhecidas aproximações para a solução y e para $y' = f(x, y)$, num conjunto de pontos igualmente espaçados $x_i = x_0 + ih; i = 0, \dots, k$.

Se integrarmos a equação diferencial $y'(x) = f(x, y(x))$ entre o ponto x_k e o ponto x_{k+1} , vem

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

ou seja,

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

Substituindo $f(x, y(x))$ por um polinómio p que aproxime f , obter-se-á

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} p(x) dx.$$

Para obter o polinómio p atrás referido, poderemos, por exemplo, proceder do seguinte modo:

Sejam $y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-m+1}$ ($m \geq 1$) aproximações para a solução do problema nos pontos $x_k, x_{k-1}, \dots, x_{k-m+1}$ (as quais admitimos conhecer) e sejam $f_i = f(x_i, y_i); i = k, k-1, \dots, k-m+1$

as correspondentes aproximações para $f(x, y(x))$ nos mesmos pontos. Tomemos para p o polinómio p_{m-1} de grau não superior a $m - 1$ que satisfaz as condições de interpolação

$$p_{m-1}(x_i) = f_i; i = k - m + 1, \dots, k.$$

Integrando este polinómio explicitamente, obtemos então o método:

$$y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} p_{m-1}(x) dx. \quad (5.22)$$

Este processo gera uma família de métodos conhecidos por **métodos de Adams-Bashforth** de passo m , os quais têm ordem m (ver Exercício 5.13).

Exemplo 5.4 Caso $m = 1$

Neste caso, $p = p_0$, é o polinómio de grau zero que satisfaz $p(x_k) = f_k$, vindo, assim

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f_k dx = y_k + f_k(x_{k+1} - x_k) \\ &= y_k + hf(x_k, y_k) \end{aligned}$$

e obtendo-se o método de Euler (o qual não é verdadeiramente um método de passo múltiplo).

Exemplo 5.5 Caso $m = 2$

Neste caso, tomamos para p o polinómio linear p_1 que interpola (x_{k-1}, f_{k-1}) e (x_k, f_k) , ou seja,

$$p_1(x) = -\frac{x - x_k}{h} f_{k-1} + \frac{x - x_{k-1}}{h} f_k,$$

pelo que o método será definido por

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} [-(x - x_k)f_{k-1} + (x - x_{k-1})f_k] dx,$$

obtendo-se, então o chamado **Método de Adams-Bashforth de 2ª ordem**

$$\left| \quad y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(3f_k - f_{k-1}) \right. \quad (5.23)$$

De modo análogo se deduz o **método de Adams-Bashforth de 3ª ordem** ($m = 3$)

$$\left| \quad y_{k+1} = y_k + \frac{h}{12}(23f_k - 16f_{k-1} + 5f_{k-2}) \right. \quad (5.24)$$

e o **método de Adams-Bashforth de 4ª ordem** ($m = 4$)

$$\left| \quad y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3}) \right. \quad (5.25)$$

Nota 5.3 Os métodos de passo múltiplo têm um problema que não encontrámos para os de passo único. Considere-se, por exemplo, a utilização do Método de Adams-Bashforth de 4ª ordem. O valor inicial y_0 é conhecido. Mas, para $k = 0$, a fórmula exige informação da solução em x_{-1} , x_{-2} e x_{-3} . Mais precisamente, a fórmula do método de Adams-Bashforth de 4ª ordem só pode ser usada para $k \geq 3$.

Isto mostra que os métodos de passo múltiplo precisam de “ajuda” para se iniciar a sua utilização. A solução usual consiste em usar um método de passo único (da mesma ordem do método de passo múltiplo) até que se tenham calculado os valores necessários para a utilização do método de passo múltiplo.

Em alternativa, poderá usar-se um método de passo único no 1º passo, seguido de um método de passo duplo no 2º passo, etc. É, no entanto, importante que os valores iniciais obtidos desta maneira sejam da **mesma ordem de precisão** daqueles que irão ser obtidos pelo método final. Como os métodos iniciais são de ordem mais baixa, será necessário utilizá-los com um passo mais pequeno, gerando resultados intermédios.

5.3.2 Métodos Implícitos :: Métodos de Adams-Moulton

Os métodos de Adams-Bashforth foram obtidos usando informação já calculada nos m pontos anteriores x_k, \dots, x_{k-m+1} . Em princípio, poder-se-á formar o polinómio interpolador usando informação em x_{k+1}, x_{k+2} , etc. No caso mais simples, usar-se-ão os pontos x_{k-m+1}, \dots, x_k e x_{k+1} e determinar-se-á o polinómio de grau não superior a m satisfazendo

$$p_m(x_i) = f_i; i = k - m + 1, \dots, k, k + 1.$$

Este processo gera uma família de métodos conhecidos por **métodos de Adams-Moulton** de passo m , os quais têm ordem $m + 1$.

Exemplo 5.6 Caso $m = 0$

Neste caso, $p = p_0 = f_{k+1}$ e obtém-se o chamado **Método de Euler regressivo** (o qual não é também verdadeiramente um método de passo múltiplo)

$$\left| \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + hf_{k+1} \end{array} \right. \quad (5.26)$$

Exemplo 5.7 Caso $m = 1$

O polinómio linear p_1 que interpola (x_k, f_k) e (x_{k+1}, f_{k+1}) é $p_1(x) = -\frac{x-x_{k+1}}{h}f_k + \frac{x-x_k}{h}f_{k+1}$, obtendo-se, então o chamado **Método de Adams-Moulton de 2ª ordem**

$$\left| \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(f_k + f_{k+1}) \end{array} \right. \quad (5.27)$$

Outros métodos de Adams-Moulton podem ser obtidos de modo análogo, para diferentes valores de m . Por exemplo, para $m = 2$, obtém-se o **método de Adams-Moulton de 4ª ordem**:

$$\left| \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(9f_{k+1} + 19f_k - 5f_{k-1} + f_{k-2}) \end{array} \right. \quad (5.28)$$

Nota 5.4 Note-se que todos os métodos de Adams-Moulton são métodos implícitos, contrariamente aos métodos de Adams-Bashforth. Isto significa que é necessário resolver uma equação não linear para obter y_{k+1} . Métodos iterativos, como por exemplo, o Método de Newton são frequentemente usados. Outra solução passa pelo uso de métodos explícitos para “predizer” o valor de y_{k+1} , como se descreve de seguida.

5.3.3 Métodos Preditores-Corretores

Os métodos implícitos são geralmente usados para corrigir aproximações obtidas por fórmulas explícitas. Deste modo obtêm-se métodos conhecidos por **preditores-corretores**.

Um método preditor-corretor frequentemente utilizado combina os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de 4ª ordem, do seguinte modo:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{k+1}^{(p)} = y_k + \frac{h}{24}(55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3}) \\ f_{k+1}^{(p)} = f(x_{k+1}, y_{k+1}^{(p)}) \\ y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(9f_{k+1}^{(p)} + 19f_k - 5f_{k-1} + f_{k-2}) \end{array} \right. \quad (5.29)$$

Note-se que este método é totalmente explícito; primeiro utiliza-se o método explícito de Adams-Bashforth para “predizer” uma aproximação $y_{k+1}^{(p)}$; esta aproximação é utilizada para obter um valor aproximado de f_{k+1} , $f_{k+1}^{(p)}$, o qual é então usado na fórmula do método de Adams-Moulton para corrigir o valor de $y_{k+1}^{(p)}$.

5.3.4 Métodos de Diferenciação Regressiva

Métodos de diferenciação regressiva (do inglês *Backward Differentiation Formulas - BDF*) são métodos implícitos, da forma

$$y_{k+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{k+1-i} + h\beta f_{k+1}, \quad (5.30)$$

e podem ser obtidos da seguinte forma:

Suponhamos, então, que são já conhecidas aproximações para a solução y e para $y' = f(x, y)$, num conjunto de pontos igualmente espaçados $x_i = x_0 + ih; i = 0, \dots, k$. A solução em x_{k+1} satisfaz

$$y'(x_{k+1}) = f(x_{k+1}, y(x_{k+1})).$$

Seja p_m o polinómio de grau não superior a m que interpola os valores y_{k-m+1}, \dots, y_k e y_{k+1} . Aproximando $y(x_{k+1})$ e $y'(x_{k+1})$ por y_{k+1} e $p'_m(x_{k+1})$, obter-se-á o método

$$p'_m(x_{k+1}) = f(x_{k+1}, y_{k+1}),$$

o qual pode provar-se que tem ordem m .

Exemplo 5.8 Exemplos de métodos BDF de ordem m são:

$$y_{k+1} = y_k + hf_{k+1} \quad [m = 1] \quad (5.31)$$

$$y_{k+1} = \frac{4}{3}y_k - \frac{1}{3}y_{k-1} + \frac{2}{3}hf_{k+1} \quad [m = 2] \quad (5.32)$$

$$y_{k+1} = \frac{18}{11}y_k - \frac{9}{11}y_{k-1} + \frac{2}{11}y_{k-2} + \frac{6}{11}hf_{k+1} \quad [m = 3] \quad (5.33)$$

$$y_{k+1} = \frac{48}{25}y_k - \frac{36}{25}y_{k-1} + \frac{16}{25}y_{k-2} - \frac{3}{25}y_{k-3} + \frac{12}{25}hf_{k+1} \quad [m = 4] \quad (5.34)$$

Os métodos descritos anteriormente são casos particulares dos métodos (5.21), também chamados de métodos de passo múltiplo **lineares**, uma vez que y_{k+1} é uma combinação linear de y_i e f_i .

De facto, note-se que, se $\beta_0 = 0$, os métodos (5.21) são explícitos, obtendo-se métodos implícitos sempre que $\beta_0 \neq 0$.

Além disso, quando $\alpha_1 = 1$ e $\alpha_i = 0, i > 1$, estamos perante os métodos de Adams, mais concretamente, Adams-Bashford, se $\beta_0 = 0$ e Adams-Moulton, caso contrário.

Quando $\beta_0 \neq 0$ e $\beta_i = 0, i > 1$ obtêm-se os BDF.

Outra forma de obter métodos de passo múltiplo de ordem q é “obrigar” o método (5.21) a ser exato quando a solução y da equação diferencial é um polinómio de grau q .

Exemplo 5.9 *Caso $q = 0$*

Neste caso, $y(x) = 1$ e substituindo em (5.21), obtém-se a relação

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i = 1 \quad (5.35)$$

Exemplo 5.10 *Caso $q = 1$*

Considerando agora $y(x) = x$, obtém-se de (5.21),

$$x_{k+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i x_{k+1-i} + h \sum_{i=0}^m \beta_i,$$

ou seja

$$\begin{aligned} x_{k-m} + h(m+1) &= \sum_{i=1}^m \alpha_i (x_{k-m} + h(m-i+1)) + h \sum_{i=0}^m \beta_i \\ &= x_{k-m} \sum_{i=1}^m \alpha_i + h \sum_{i=1}^m \alpha_i (m-i+1) + h \sum_{i=0}^m \beta_i \end{aligned}$$

Usando a relação (5.35), obtém-se

$$\sum_{i=0}^m \beta_i = m+1 - \sum_{i=1}^m (m-i+1) \alpha_i. \quad (5.36)$$

As relações (5.35)-(5.36) são conhecidas como **condições de consistência** para um método de passo múltiplo e são necessárias e suficientes para um método ser de **ordem 1**. Voltaremos posteriormente a este tema.

Combinando os métodos de passo único com os métodos de passo múltiplo agora apresentados, obtém-se a formulação geral

$$y_{k+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{k+1-i} + h \phi(x_{k+1}, \dots, x_{k+1-m}, y_{k+1}, \dots, y_{k+1-m}) \quad (5.37)$$

5.3.5 Exercícios

Exercício 5.12 Considere o método de Euler regressivo (5.26).

- Mostre que o erro de discretização deste método é $\mathcal{O}(h)$, i.e. trata-se de um método de 1ª ordem.
- Sendo este método implícito, normalmente é necessário usar um método numérico para resolver uma equação não linear da forma $z = y_k + hf(x_k, z)$. Escreva o método iterativo que se obtém quando é usado o método do ponto fixo para resolver (5.26) e implemente-o no Matlab.
- Considere o seguinte problema de valores iniciais $y'(x) = y(x)$, $x \in [0, 1]$, $y(0) = 1$. Calcule aproximações para $y(1.0)$, usando, sucessivamente, $N = 10, 20, 40, 80$. Diga, justificando, se os resultados obtidos ilustram a ordem de convergência do método.

Exercício 5.13 Obtenha a forma geral dos métodos de Adam-Bashforth de ordem m

$$y_{k+1} = y_k + h \sum_{i=0}^{m-1} b_i f_{k-i},$$

onde

$$b_i = \frac{(-1)^{m-i-1}}{(m-i-1)!i!} \int_0^1 \prod_{\substack{s=0 \\ s \neq i}}^{m-1} (s+t) dt; \quad i = 0, \dots, m-1$$

Sugestão: Use a fórmula de Lagrange para escrever o polinómio p_{m-1} em (5.22) na forma

$$p_{m-1}(x) = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{(-1)^{m-i-1} f_{k-i}}{(m-i-1)!i!h^{m-1}} \prod_{\substack{s=0 \\ s \neq i}}^{m-1} (x - x_{k-s}).$$

Exercício 5.14 Deduza o método de Adams-Moulton de 4ª ordem (5.28).

Exercício 5.15 Obtenha as fórmulas de diferenciação regressiva (5.31)-(5.34).

Exercício 5.16 Use o método preditor-corretor de 2ª ordem (Adams-Bashforth de 2ª ordem e Adams-Moulton de 2ª ordem) para determinar uma aproximação em $x = 0.75$, da solução do PVI $y'(x) = -2xy^2(x)$, $y(0) = 1$. Considere $h = 0.25$ e tome como aproximação para y em $x = 0.25$ o valor $y_2 = 0.9375$.

Exercício 5.17 Use o método preditor-corretor de 4ª ordem para determinar uma aproximação, no ponto $x = 0.5$, da solução do problema $y'(x) = y(x)$, $y(0) = 1$. Tome $h = 0.1$ e considere as seguintes aproximações iniciais; $y_2 = 1.1051708$, $y_3 = 1.2214026$ e $y_4 = 1.3498585$. Compare a aproximação obtida com o valor exato e comente.

Exercício 5.18 Método preditor-corretor AB4-AM4

Escreva uma função **metPC4** destinada a implementar o método preditor-corretor AB4-AM4. A sua função deve

- (i) usar o método de Runge-Kutta de 4ª ordem para obter os três primeiros valores y_2, y_3 e y_4 ;
- (ii) para $k = 4, 5, \dots, N$:
 - usar a fórmula do método AB4 para calcular uma primeira aproximação para y_{k+1} ;
 - estimar f_{k+1} , usando essa aproximação;
 - gerar uma nova aproximação y_{k+1} , usando a fórmula do método AM4.

Exercício 5.19 Considere o PVI

$$y'(x) = y - \frac{y}{x}, \quad x \in [1, 2], \quad y(1) = \frac{1}{2},$$

cujas solução exata é $y(x) = \frac{e^{x-1}}{2x}$.

- a) Use a função **metPC4** para resolver o problema, tomando $N = 10$. Faça uma tabela com os valores exatos, aproximados e respectivo erro, nos pontos x_k .
- b) Esboce o gráfico da solução exata, marcando também os valores aproximados obtidos.

Exercício 5.20 Funções ode23t, ode23tb e ode113

- a) Obtenha informação sobre as funções pré-definidas `ode23t`, `ode23tb` e `ode113`.
- b) Use-as para obter a solução aproximada do seguinte problema,

$$y'(x) = y(x); \quad y(0) = 1,$$

nos pontos $x=0:0.2:1$, com as seguintes opções:

```
>>options=odeset('Stats','on','AbsTol',1e-10,'RelTol',1e-10);
```

- c) Use agora as funções `ode23` e `ode34` para resolver o mesmo problema.
- d) Compare o esforço computacional e o tempo de cpu, em todos os casos considerados.

Exercício 5.21 Repita o exercício anterior para o PVI

$$y'(x) = -100y(x) + 10; \quad y(0) = 1,$$

cujas solução exata é

$$y(x) = \frac{1}{10} + \frac{9}{10} \exp(-100x).$$

Exercício 5.22 Considere os métodos de passo múltiplo lineares,

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{12} (5f_{k+1} + 8f_k - f_{k-1}) \quad (\mathbf{M}_1)$$

$$y_{k+1} = -9y_k + 9y_{k-1} + y_{k-2} + 6h(f_k + f_{k-1}) \quad (\mathbf{M}_2)$$

para resolução de um problema de valor inicial $y'(x) = f(x, y)$; $y(a) = \alpha$.

- a) Verifique que o método \mathbf{M}_1 é um método de passo duplo, implícito, com erro de truncatura local $\mathcal{O}(h^4)$ e que \mathbf{M}_2 é um método de passo triplo, explícito, com erro de truncatura local $\mathcal{O}(h^5)$.
- b) Use estes métodos para obter aproximações para a solução do PVI

$$y'(x) = -y(x) - \frac{1}{(1+x)^2} + \frac{1}{1+x}; \quad y(0) = 1,$$

para $x \in [0, 1]$. Complete, então, a seguinte tabela, sabendo que a solução exata do PVI apresentado é $y(x) = \frac{1}{1+x}$.

	\mathbf{M}_1		\mathbf{M}_2	
x	Erro ($h = 0.2$)	Erro ($h = 0.1$)	Erro ($h = 0.2$)	Erro ($h = 0.1$)
0.0				
0.1	—		—	
0.2				
0.3	—		—	
0.4				
0.5	—		—	
0.6				
0.7	—		—	
0.8				
0.9	—		—	
1.0				

5.4 Consistência e estabilidade

5.4.1 Condicionamento de um problema

Consideremos o problema

$$y'' - 10y' - 11y = 0; \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = -1,$$

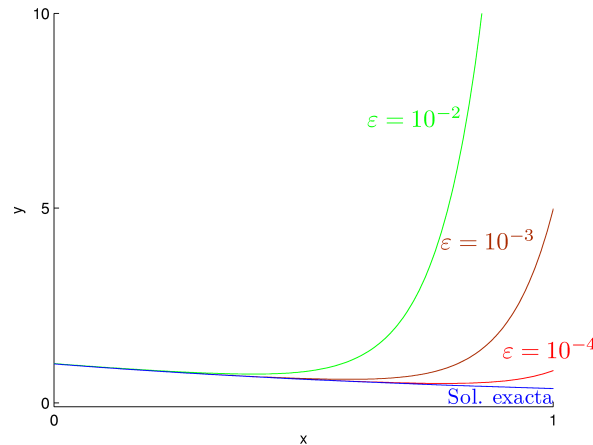
cuja solução exata é $y(x) = \exp(-x)$.

A solução exata do problema *perturbado*

$$y'' - 10y' - 11y = 0; \quad y(0) = 1 + \varepsilon, \quad y'(0) = -1,$$

é

$$y(x) = \left(1 + \frac{11}{12}\varepsilon\right)\exp(-x) + \frac{\varepsilon}{12}\exp(11x).$$



Como

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\varepsilon}{12} \exp(11x) = \infty,$$

a solução tende para ∞ , quando $x \rightarrow \infty$, por muito pequeno que seja ε .

Dizemos então que a **solução** é **instável** ou o **problema** é **mal condicionado**, uma vez que pequenas alterações nas condições iniciais podem produzir grandes alterações na solução, quando $x \rightarrow \infty$.

Para problemas deste tipo é sempre difícil obter soluções numericamente, uma vez que **erros de discretização e arredondamento causam o mesmo efeito da perturbação das condições iniciais**.

5.4.2 Estabilidade, consistência, convergência

Quando falamos em **convergência** de um método, esperamos que a solução numérica obtida, através desse método, num dado ponto $x = X$, tal que $X = x_0 + nh$, tenda para a solução exata, quando $h \rightarrow 0$, isto é, quando $n \rightarrow \infty$.

Há dois tipos de fatores que afetam este tipo de convergência:

1. A fórmula usada deve ser **consistente**, isto é, deve ser suficientemente precisa, em relação ao seu erro de truncatura local.

Temos visto que, se uma fórmula tem erro de truncatura local $\mathcal{O}(h^{p+1})$, então esperamos que o correspondente erro de truncatura global seja $\mathcal{O}(h^p)$. Para haver convergência, este erro tem naturalmente que tender para zero, quando $h \rightarrow 0$.

Para um inteiro p , tem-se $p \geq 1$ e, portanto, o erro de truncatura local de qualquer método deve ser pelo menos $\mathcal{O}(h^2)$. Para uma fórmula de passo m linear,

$$y_{n+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{n+1-i} + h \sum_{i=0}^m \beta_i f_{n+1-i}, \quad (*)$$

vimos já quais as duas condições de consistência, se $p = 1$.

2. O outro fator é a **estabilidade** e está relacionado com a propagação do erro à medida que o processo avança.

Pode provar-se que se um método é **consistência e estável então é convergente**.

O estudo da estabilidade passa pela análise das soluções de $(*)$, quando $h \rightarrow 0$. O comportamento da sequência $\{y_n\}$, quando $h \rightarrow 0$, ou $n \rightarrow \infty$, gerado pela fórmula $(*)$ pode ser feito recorrendo a resultados da teoria das **equações às diferenças**.

Equações às diferenças (revisões)

Equações às diferenças lineares de ordem m com coeficientes constantes:

$$y_{n+1} = a_m y_n + \cdots a_1 y_{n-m+1} + a_0, \quad n = m-1, m, m+1, \dots, \quad (5.38)$$

onde a_0, a_1, \dots, a_m são constantes.

Parte homogênea de (5.38):

$$y_{n+1} = a_m y_n + \cdots a_1 y_{n-m+1}. \quad (5.39)$$

Teorema 5.4 Se $\lambda_i; i = 1, \dots, m$, são as raízes **simples** da **equação característica**

$$\lambda^m - a_m \lambda^{m-1} - \cdots - a_2 \lambda - a_1 = 0$$

então as soluções de (5.39) são da forma $A_i \lambda_i^n$. Uma **solução particular** de (5.38) é

$$y_n = \frac{a_0}{1 - a_1 - \cdots - a_m},$$

(se o denominador for diferente de zero). A **solução geral** de (5.38) será então

$$y_n = \sum_{i=1}^m A_i \lambda_i^n + \frac{a_0}{1 - a_1 - \cdots - a_m},$$

Nota 5.5 Se λ_k for uma raiz **dupla** da equação característica, então as soluções de (5.39) são da forma

$$A_i \lambda_i^n, \quad i \neq k \quad \text{e} \quad (A_k + B_k n) \lambda_k^n.$$

Métodos estáveis e fortemente estáveis

Consideremos, então, um método de passo m

$$y_{n+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{n+1-i} + h \sum_{i=0}^m \beta_i f_{n+1-i}$$

A correspondente **equação característica**, quando $h = 0$ é

$$\lambda^m - \sum_{i=1}^m \alpha_i \lambda^{m-i} = 0$$

Segue-se, de imediato, que $\lambda = 1$ é uma raiz da equação característica, quando $h = 0$. (recorde as condições de consistência de um método de ordem ≥ 1).

Esta raiz representa a solução aproximada correspondente à única solução exata da equação diferencial. As outras $m - 1$ raízes são **parasitas** e não têm qualquer relação com a equação diferencial. Pretende-se, por isso, que estas soluções tenham um papel insignificante, ou pelo menos, não dominante, na solução, quando $h = 0$. Isto significa que todas as $m - 1$ raízes parasitas têm de satisfazer

$$|\lambda_i| \leq 1$$

(para que $\lim_{n \rightarrow \infty} A_i \lambda_i^n = 0$). Se, para alguma dessas raízes, $|\lambda_k| = 1$, então a raiz λ_k tem que ser simples (Porquê?).

Um método da forma

$$y_{k+1} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_{k+1-i} + h\phi(x_{k+1}, \dots, x_{k+1-m}, y_{k+1}, \dots, y_{k+1-m})$$

diz-se

- **estável** se todas as raízes λ_i do polinómio

$$\rho(\lambda) = \lambda^m - \alpha_1 \lambda^{m-1} - \dots - \alpha_m$$

satisfazem

$$\triangleright |\lambda_i| \leq 1$$

$$\triangleright \text{se } |\lambda_i| = 1, \text{ para algum } i, \text{ então } \lambda_i \text{ é uma raiz simples de } \rho.$$

- **fortemente estável** se é estável e
 - $\triangleright m - 1$ raízes de ρ satisfazem $|\lambda_i| < 1$.

Exemplo 5.11 Métodos de passo único ($m = 1, \alpha_1 = 1$)

$$\rho(\lambda) = \lambda - 1$$

→ **Raízes:** 1 multiplicidade 1 ✓

Os métodos de passo único são fortemente estáveis.

Exemplo 5.12 Métodos de Adams de passo m ($\alpha_1 = 1, \alpha_i = 0, i > 1$)

$$\rho(\lambda) = \lambda^m - \lambda^{m-1}$$

→ **Raízes:** 0 multiplicidade $m-1$ ✓

1 multiplicidade 1 ✓

Os métodos de Adams de passo m são fortemente estáveis.

Exemplo 5.13 Consideremos o seguinte método

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf_n$$

Trata-se de um método de 2ª ordem, explícito, de passo duplo. (Provar!)

→ Polinómio característico: $\rho(\lambda) = \lambda^2 - 1$

→ Raízes: 1 multiplicidade 1 ✓

-1 multiplicidade 1 ✓

Método estável, não fortemente estável

Aplicando este método na resolução do problema (bem condicionado)

$$y' = -2y + 1; y(0) = 1,$$

cuja solução exata é $y(x) = \frac{1}{2} \exp(-2x) + \frac{1}{2}$, obtém-se

$$y_{n+1} = -4hy_n + y_{n-1} + 2h, \quad n > 1$$

$$y_0 = 1$$

$$y_1 = \frac{1}{2} \exp(-2h) + \frac{1}{2} \quad \text{obtida da solução exata}$$

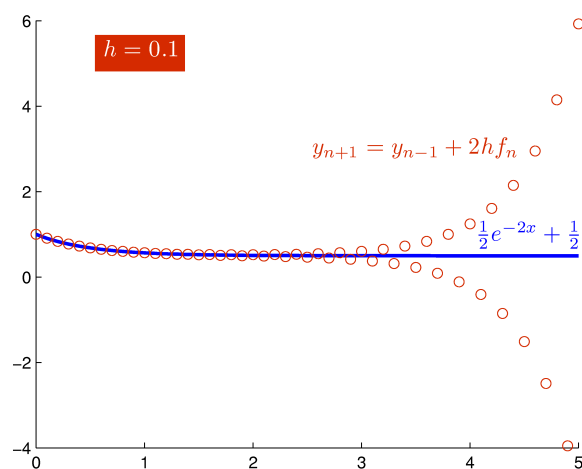
→ Polinómio característico: $\rho(\lambda) = \lambda^2 + 4h\lambda - 1$.

→ Raízes: $\lambda_1 = -2h + \sqrt{4h^2 + 1}$ ✓

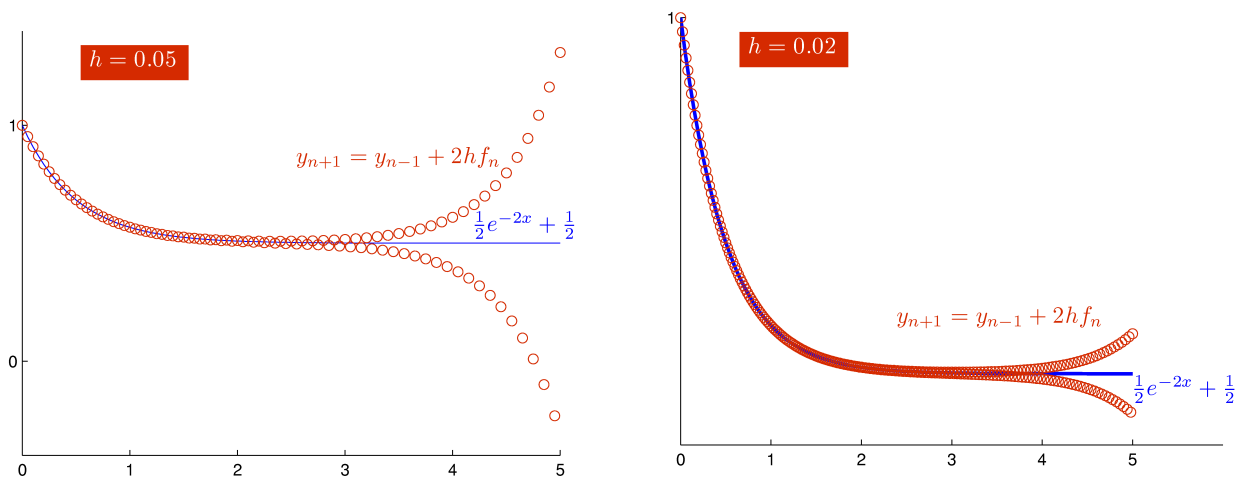
$\lambda_2 = -2h - \sqrt{4h^2 + 1} < -1$ ✗ raiz parasita

→ Solução: $y_n = A_1(-2h + \sqrt{4h^2 + 1})^n + A_2(-2h - \sqrt{4h^2 + 1})^n + \frac{1}{2}$. Como

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \infty \Rightarrow \text{Instabilidade!}$$



Este comportamento não resulta de erros de arredondamento.



A análise de estabilidade feita diz respeito essencialmente à estabilidade no limite, quando $h \rightarrow 0$.

O último exemplo dado mostra que um método **estável**, mas **não fortemente estável**, pode ter um comportamento **instável**, quando h é pequeno, mas o intervalo considerado é infinito.

Num intervalo finito, um método **estável** produz “bons” resultados para h **suficientemente pequeno**.

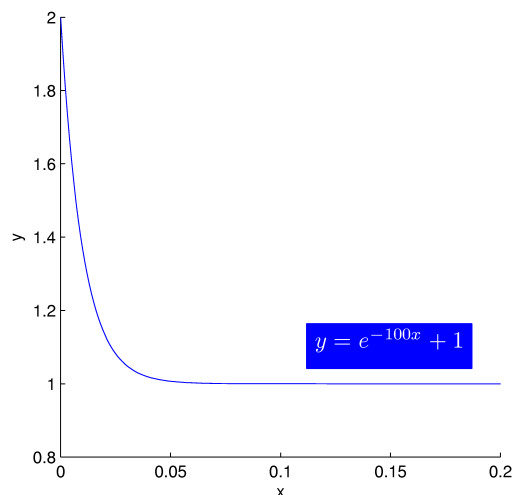
Por outro lado, mesmo métodos **fortemente estáveis** podem evidenciar um comportamento **instável** se h não for **suficientemente pequeno**. Embora, em princípio, h possa ser tomado suficientemente pequeno para poder ultrapassar esta dificuldade, o custo computacional pode ser enorme, como veremos de seguida.

5.4.3 Equações rígidas ou stiff

Consideremos o PVI

$$y' = -100y + 100; \quad y(0) = 2$$

cuja solução exata é $y(x) = \exp(-100x) + 1$.



O método de Euler aplicado a este problema, resulta em

$$y_{n+1} = (1 - 100h)y_n + 100h; \quad y_0 = 2.$$

Analisando o gráfico da solução do PVI, seria de esperar o uso de um passo inicial h pequeno, (até $x = 0.1$, por exemplo) e depois o uso de um valor do passo maior.

Vejamos que, por questões de estabilidade, tal não deve ser feito.

Embora o método de Euler seja fortemente estável, a única raiz do polinómio

$$\rho(\lambda) = \lambda - (1 - 100h),$$

isto é, $\lambda = 1 - 100h$, deverá, por motivos de estabilidade, satisfazer

$$|\lambda| < 1 \Leftrightarrow h < 0.02.$$

Note-se que a quantidade $(1 - 100h)^n$ é uma “boa” aproximação para $\exp(-100x)$, para valores de h pequenos. Se $h > 0.02$, esta aproximação é muito “pobre”. Mesmo que o termo $\exp(-100x)$ não contribua praticamente nada para a precisão da solução, para $x \geq 0.1$, o método de Euler requer ainda assim que seja aproximada com precisão, para que seja mantida a estabilidade.

Este é um problema típico das equações *stiff*: a solução contém uma componente que contribui muito pouco para a solução, mas o método usado requer que seja suficientemente bem aproximada para manter a estabilidade. É esta componente “menos” importante que determina o valor do passo.

Num problema *stiff*, o passo é determinado em função da estabilidade e não da precisão.

O problema pode ser ainda mais grave, se se tratar de um sistema de EDOs. Normalmente, nos sistemas *stiff*, a variável independente é o tempo e o problema físico que está a ser modelado tem transientes rápidos sobrepostos a evoluções muito mais lentas.

A resposta usual para problemas *stiff* é o uso de **métodos implícitos**

Exemplo 5.14 Consideremos novamente o PVI

$$y' = -100y + 100; \quad y(0) = 2.$$

Usando o método de Euler regressivo,

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_n + 1),$$

obtém-se

$$(1 + 100h)y_{n+1} - y_n = 100h; \quad y_0 = 2.$$

A única raiz do polinómio $\rho(\lambda) = (1 + 100h)\lambda - 1$ é $\lambda = \frac{1}{1+100h}$ e como $|\lambda| < 1$, $\forall h > 0$, não haverá problemas de instabilidade, independentemente do valor de h usado.

h=0.1

x	M. Euler	M. Euler Reg	Solucao exata
0	2	2.000000000000000	2.000000000000000
0.1	-8	1.090909090909090	1.00004539992976
0.2	82	1.00826446280992	1.00000000206115
0.3	-728	1.00075131480090	1.000000000000009
0.4	6562	1.00006830134554	1.000000000000000
0.5	-59048	1.00000620921323	1.000000000000000
0.6	5.3144e+005	1.00000056447393	1.000000000000000
0.7	-4.783e+006	1.00000005131581	1.000000000000000
0.8	4.3047e+007	1.00000000466507	1.000000000000000
0.9	-3.8742e+008	1.00000000042410	1.000000000000000
1	3.4868e+009	1.00000000003855	1.000000000000000

h=0.02

x	M. Euler	M. Euler Reg	Solucao exata
0	2.000000000000000	2.000000000000000	2.000000000000000
0.1	0	1.00411522633745	1.00004539992976
0.2	2.000000000000000	1.00001693508781	1.00000000206115
0.3	0	1.00000006969172	1.000000000000009
0.4	2.000000000000000	1.00000000028680	1.000000000000000
0.5	0	1.00000000000118	1.000000000000000
0.6	2.000000000000000	1.000000000000000	1.000000000000000
0.7	0	1.000000000000000	1.000000000000000
0.8	2.000000000000000	1.000000000000000	1.000000000000000
0.9	0	1.000000000000000	1.000000000000000
1	2.000000000000000	1.000000000000000	1.000000000000000

h=0.01

x	M. Euler	M. Euler Reg	Solucao exata
0	2.000000000000000	2.000000000000000	2.000000000000000
0.1	1.000000000000000	1.00097656250000	1.00004539992976
0.2	1.000000000000000	1.00000095367432	1.00000000206115
0.3	1.000000000000000	1.00000000093132	1.000000000000009
0.4	1.000000000000000	1.00000000000091	1.000000000000000
0.5	1.000000000000000	1.00000000000000	1.000000000000000
0.6	1.000000000000000	1.00000000000000	1.000000000000000
0.7	1.000000000000000	1.00000000000000	1.000000000000000
0.8	1.000000000000000	1.00000000000000	1.000000000000000
0.9	1.000000000000000	1.00000000000000	1.000000000000000
1	1.000000000000000	1.00000000000000	1.000000000000000

Equações *stiff* no MATLAB

```

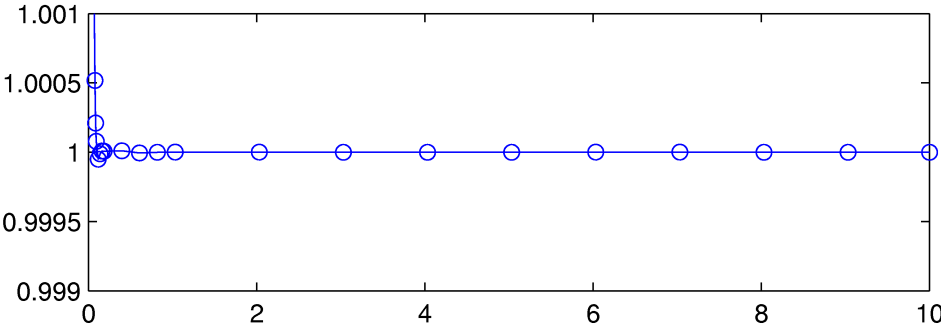
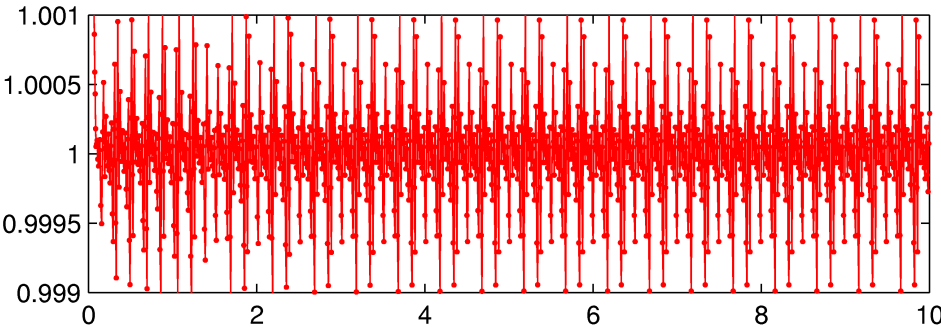
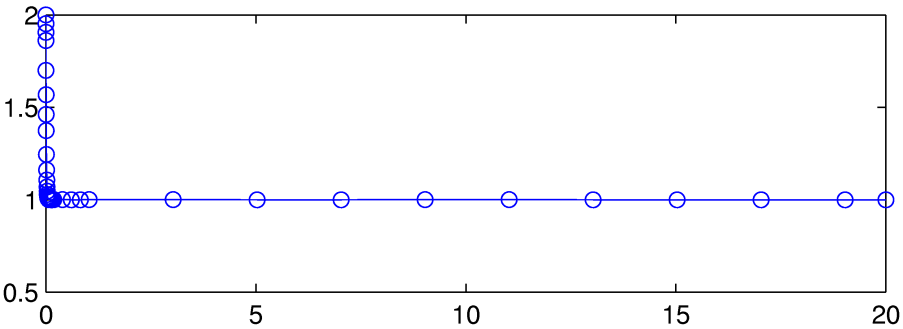
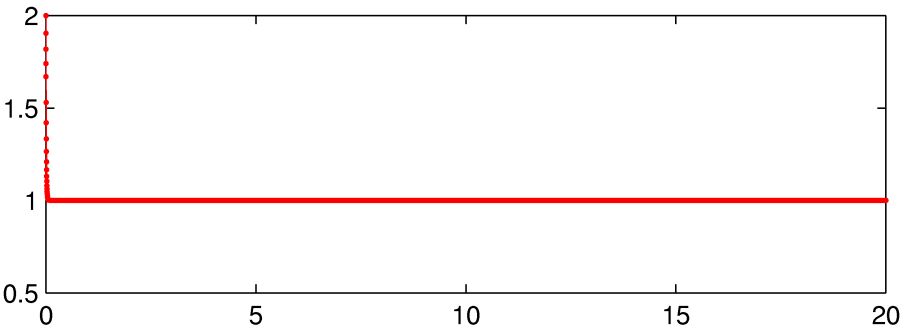
f=@(x,y) -100*y+100;
sol=@(x) exp(-100*x)+1;

▷ I = [0,10]

options=odeset('AbsTol',1e-3,'Stats','on' );
disp('***** Funcao ode45 *****')
t=cputime;[x1,y1]=ode45(f,[0,10],2,options);tempo=cputime-t
pontos_do_grafico=length(x1)
disp(' ')
disp('***** Funcao ode15s *****')
t=cputime;[x2,y2]=ode15s(f,[0,10],2,options);tempo=cputime-t
pontos_do_grafico=length(x2)
subplot(2,1,1),plot(x1,y1,'r.-');
subplot(2,1,2),plot(x2,y2,'bo-');

***** Funcao ode45 *****
306 successful steps
19 failed attempts
1951 function evaluations
tempo = 0.0625
pontos_do_grafico = 1225
***** Funcao ode15s *****
39 successful steps
0 failed attempts
79 function evaluations
1 partial derivatives
9 LU decompositions
76 solutions of linear systems
tempo = 0.0156
pontos_do_grafico = 40

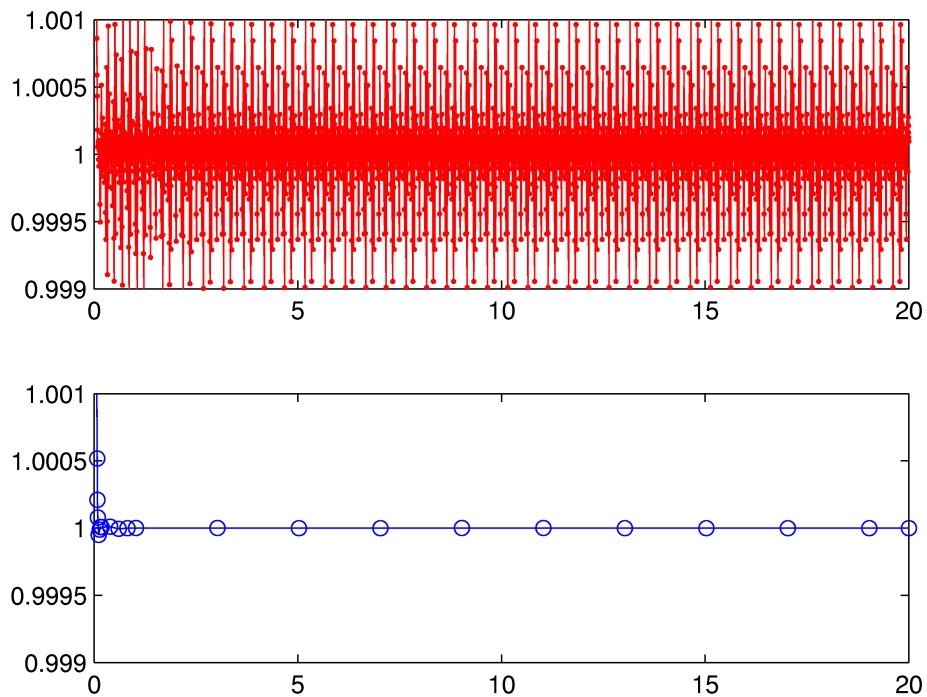
```



▷ $I = [0, 20]$

```
***** Funcao ode45 *****
608 successful steps
40 failed attempts
3889 function evaluations
tempo =
    0.1406
pontos_do_grafico =
    2433

***** Funcao ode15s *****
40 successful steps
0 failed attempts
78 function evaluations
tempo = 0.0156
pontos_do_grafico = 41
```



5.4.4 Exercícios

Exercício 5.23 Considere os seguintes métodos de passo triplo, dados pelas fórmulas explícitas de ordem 3,

$$y_{k+1} = -\frac{3}{2}y_k + 3y_{k-1} - \frac{1}{2}y_{k-2} + 3hf_k$$

$$y_{k+1} = y_k + h \left(\frac{23}{12}f_k - \frac{16}{12}f_{k-1} + \frac{5}{12}f_{k-2} \right) \quad (\text{AB3})$$

Pretende-se estudar a forma como o erro máximo da solução do problema

$$y' = -y; \quad y(0) = 1,$$

depende do valor do passo h escolhido. Construa uma tabela com os valores máximos dos erros obtidos em $[0, 1]$, considerando ambos os métodos e escolhendo sucessivamente $h = 2^{-i}$; $i = 2, 3, \dots, 10$.

Exercício 5.24 Estude a estabilidade do Método de Euler (progressivo e regressivo), considerando o problema modelo

$$y'(x) = ky; \quad y(a) = \alpha,$$

para vários valores negativos do parâmetro real k .

Exercício 5.25 Diga quais dos seguintes métodos são estáveis e quais são fortemente estáveis.

- a) $y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6}(6f_k - 3f_{k-1} + 3f_{k-2})$;
- b) $y_{k+1} = y_{k-1} + \frac{h}{2}(f_{k+1} + 2f_k + f_{k-1})$;
- c) $y_{k+1} = 3y_k - 2y_{k-1} + \frac{h}{2}(f_{k+1} + 2f_k + f_{k-1})$;
- d) $y_{k+1} = \frac{1}{2}(y_k + y_{k-1}) + \frac{3h}{4}(3f_k - f_{k-1})$.

Exercício 5.26 A função `vdode` do Matlab permite resolver a equação de Van der Pol

$$y''(x) - \mu(1 - y(x)^2)y'(x) + y(x) = 0; \quad y(0) = 2, y'(0) = 0,$$

para vários valores do parâmetro μ , usando o `solver ode15s`.

- a) Faça `edit vdode` para analisar o código desta função.
- b) Escreva uma função `vdodeRK` para resolver o mesmo problema, usando o `solver ode45`.
- c) Compare os resultados obtidos pelas duas funções para $\mu = 2, 100$ e 200 .
- d) Como classifica este problema? Justifique.

Exercício 5.27 Pretende-se resolver o problema

$$\begin{aligned}y'(x) &= y(x)^2 - y(x)^3 \\ y(0) &= \delta \\ 0 \leq x &\leq 2/\delta,\end{aligned}$$

com erro relativo inferior a 10^{-4} .

- a) Faça $\delta = 0.1$ e use as funções `ode45` e `ode23s` do MATLAB para resolver o problema apresentado. Em ambos os casos, faça um gráfico da solução obtida e indique o número de pontos usados para obter esse gráfico.
- b) Repita a alínea anterior para $\delta = 0.001$.
- c) O que pode concluir dos resultados obtidos nas alíneas anteriores? Justifique.

Exercício 5.28 Considere o problema

$$\begin{aligned}y'(x) &= \lambda(-y(x) + \sin x) \\ y(0) &= 0,\end{aligned}$$

cujas solução exata é

$$y(x) = \frac{\lambda}{1 + \lambda^2}(\exp(-\lambda x) + \lambda \sin x - \cos x).$$

Ilustre o comportamento das funções `ode45` e `ode23s` do MATLAB e da função `metRK4` implementada anteriormente na resolução deste problema, considerando $\lambda = 2$ e $\lambda = 50$.

6. Problemas de valores de fronteira

6.1 Introdução

Consideremos, agora, uma equação diferencial de 2ª ordem da forma

$$y''(x) = f(x, y(x), y'(x)), a \leq x \leq b, \quad (6.1)$$

sujeita a condições de fronteira do tipo¹

$$y(a) = \alpha \quad (6.2)$$

$$y(b) = \beta. \quad (6.3)$$

As equações (6.1) - (6.3) definem um **problema de valores de fronteira (PVF)** para a função incógnita y , para a qual se pretende obter uma solução aproximada.

No que se segue, suporemos sempre que a solução y existe, é única e suficientemente diferenciável em $[a, b]$.

6.2 Método do tiro

Uma forma natural de atacar o problema (6.1) - (6.3) é transformá-lo num problema de valores iniciais (PVI), substituindo a condição (6.3) pela condição

$$y'(a) = v \quad (6.4)$$

e tentar encontrar v de forma a que a condição de fronteira (6.3) seja satisfeita. Esta é a base do chamado **método do tiro** ("shooting method") cujo nome provém da analogia com o tiro ao alvo ou lançamento de um projétil.

Como ilustrado na Figura 6.1, é lançado inicialmente um projétil (trajetória a vermelho) e com base no resultado obtido, vai-se ajustando os lançamentos até se atingir o alvo.

Naturalmente existem estratégias que permitem obter v de forma sistemática. Denotemos então por y_v a solução da equação diferencial (6.1), com condições iniciais (6.2) e (6.4). O objetivo é seleccionar v de forma a que a condição (6.3) seja verificada, o que significa que é necessário resolver a equação

$$\Phi(y) := y_v(b) - \beta = 0 \quad (6.5)$$

¹Condições de fronteira mais gerais serão consideradas posteriormente.

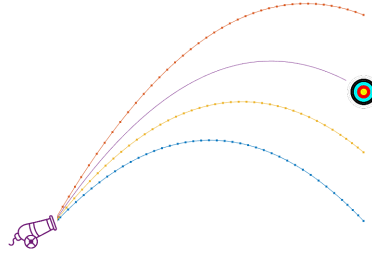


Figura 6.1: Ilustração do método do tiro.

No que se segue, consideraremos a aplicação do método da secante para aproximar a solução de (6.5), o qual (recordamos) consiste na aplicação da fórmula iterativa

$$v_n = v_{n-1} - \Phi(v_{n-1}) \frac{v_{n-1} - v_{n-2}}{\Phi(v_{n-1}) - \Phi(v_{n-2})}; n = 2, \dots \quad (6.6)$$

6.2.1 Problemas lineares

Há uma classe de problemas para a qual o método da secante fornece a solução exata em apenas um passo. É o caso em que a função y é uma função linear, sendo o correspondente PVF também linear. O PVF tem então a forma

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x) \quad (6.7)$$

$$y(a) = \alpha, \quad (6.8)$$

$$y(b) = \beta \quad (6.9)$$

onde (assumimos) p, q, r são funções contínuas em $[a, b]$. Suponhamos que resolvemos a equação² (6.7) duas vezes, usando a condição inicial (6.8) e duas condições iniciais diferentes $y'(a) = v_0$ e $y'(a) = v_1$, tendo obtidas duas soluções diferentes y_{v_0} e y_{v_1} . Consideremos a combinação linear destas soluções

$$z(x) = ty_{v_0}(x) + (1 - t)y_{v_1}(x), \quad t \in \mathbb{R}. \quad (6.10)$$

Facilmente se verifica que z é solução da EDO (6.7) e que satisfaz a condição de fronteira (6.8). Seleccionemos t de modo que $z(b) = \beta$, isto é, que a condição de fronteira (6.9) seja também satisfeita:

$$ty_{v_0}(b) + (1 - t)y_{v_1}(b) = \beta,$$

ou seja

$$t = \frac{\beta - y_{v_1}(b)}{y_{v_0}(b) - y_{v_1}(b)}.$$

Usando este valor de t , obtém-se a solução pretendida a partir de (6.10).

²Podemos usar para o efeito, a função ode45 do Matlab.

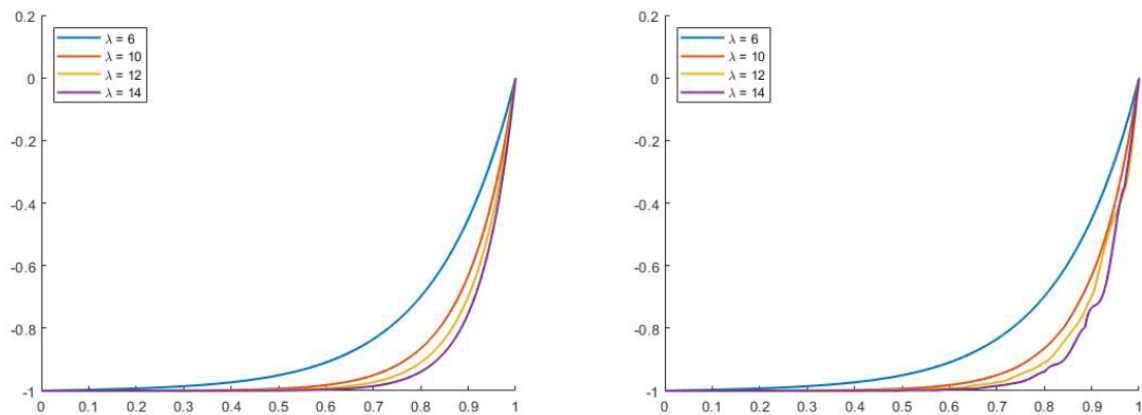
Exemplo 6.1 Seja λ um parâmetro real e consideremos a seguinte família de PVF

$$\begin{cases} y'' = \lambda^2 y + \lambda^2, & x \in [0, 1], \lambda \in \mathbb{R} \\ y(0) = -1, \\ y(1) = 0 \end{cases}$$

cuja solução exata é,

$$y(x) = \frac{\sinh(\lambda x)}{\sinh(\lambda)} - 1.$$

Na figura seguinte estão representadas as soluções do problema para $\lambda = 6, 10, 12, 14$. Na figura à esquerda foi usado $v_0 = 0$ e $v_1 = 1$ como condições iniciais e na figura à direita $v_0 = 0.1$ e $v_1 = 1$. Como facilmente se observa, no 2º caso, a solução perde precisão à medida que λ aumenta e se aproxima do extremo $x = 1$ do intervalo.



A tabela abaixo regista os erros máximos obtidos em 1000 pontos igualmente espaçados do intervalo $[0, 1]$, em cada um dos casos.

λ	$v_0 = 0; v_1 = 1$	$v_0 = 0.1; v_1 = 1$
6	6×10^{-6}	6×10^{-6}
10	3×10^{-5}	2×10^{-3}
12	8×10^{-5}	7×10^{-2}
14	6×10^{-5}	4×10^{-2}

Os valores obtidos justificam-se pelo facto da solução do PVI ser muito sensível à escolha da aproximação inicial. Para obter uma maior precisão no 2º caso considerado, teríamos que aumentar a precisão do solver ode45 em todo o intervalo, obrigando a obter aproximações próximas de $x = 0$ com grande precisão.

6.2.2 Problemas não lineares

Descrevamos agora o algoritmo para resolver o PVF (6.1) - (6.3), no caso geral, usando o método da secante para aproximar v em (6.4).

Passo 1: Obter as aproximações iniciais y_{v_0} e y_{v_1} (escolher, por exemplo, $v_0 = 1$ e $v_1 = 1$). Estas aproximações podem obter-se resolvendo dois sistemas de equações de 1ª ordem

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = f(x, y, z) \\ y(a) = \alpha \\ z(a) = v \end{cases} \quad (6.11)$$

para $v = v_0$ e $v = v_1$.

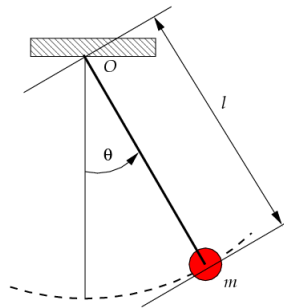
Passo 2: Usar método da secante (6.6) para obter uma nova aproximação para v e resolver o correspondente PVI (6.11) para obter y_v .

Passo 3: Comparar y_v com β e repetir o passo 2 enquanto $|y_v - \beta| < \text{tol}$, para uma dada tolerância tol .

Exemplo 6.2 A equação diferencial ordinária que governa o movimento do pêndulo (gravitacional simples) é a seguinte:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{\ell} \sin \theta = 0,$$

onde t representa o tempo (s), $\theta(t)$ o deslocamento angular (rad), g a aceleração da gravidade ($g \approx 9.8 \text{ m/s}^2$) e ℓ o comprimento da haste (m). Considere um pêndulo de comprimento $\ell = 9.8 \text{ m}$, ou seja, $g/\ell = 1$.



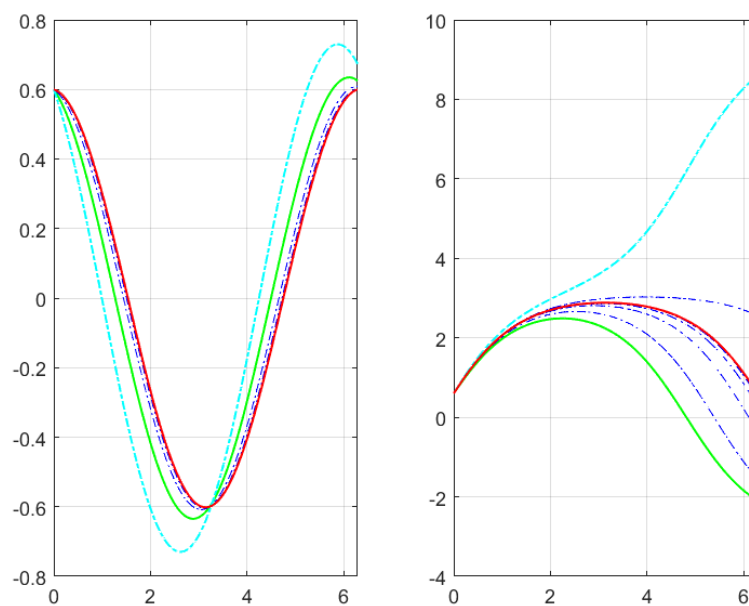
Para abordar o problema do pêndulo, usar problemas de valores iniciais (PVI) é a abordagem mais intuitiva (cf. Exercício 5.11). Nesse caso, iniciamos o movimento do pêndulo a partir de uma posição inicial específica ($\theta(0) = \alpha$), com uma determinada velocidade angular inicial ($\theta'(0) = \nu$). Estas duas condições iniciais são suficientes para estabelecer uma solução única que descreve o comportamento do pêndulo em todos os momentos subsequentes.

Suponhamos que desejamos que o pêndulo comece a oscilar a partir de um ponto inicial definido (i.e., $\theta(0) = \alpha$), porém com uma velocidade angular desconhecida. Além disso, queremos que o pêndulo alcance uma posição específica num momento futuro determinado, representado por um tempo T (i.e., $\theta(T) = \beta$). Neste cenário, estamos perante o seguinte problema de valores de fronteira (PVF):

$$\theta'' = \sin(\theta(t)) \text{ para } 0 < t < T$$

$$\theta(0) = \alpha, \theta(T) = \beta.$$

Na figura seguinte estão representadas as aproximações obtidas $\alpha = \beta = 0.6$ e $T = 2\pi$: na figura da esquerda usámos $v_0 = -0.2$ e $v_1 = -0.4$ e na da direita $v_0 = 1.8$ e $v_1 = 2$. As curvas a verde e ciano representam as aproximações iniciais e as curvas a vermelho são as duas soluções do problema. Do ponto de vista físico, seria de esperar haver duas soluções. A solução que encontrámos à esquerda corresponde à libertação do pêndulo com velocidade inicial pequena. Ele passa por quase um ciclo completo e retorna à posição inicial no tempo T . Outra possibilidade seria impulsionar o pêndulo para cima, de modo que ele subisse em direção ao topo (um equilíbrio instável), antes de cair novamente, como ilustra a figura da direita.



6.2.3 Exercícios

Exercício 6.1 Escreva uma função em Matlab para implementar o método do tiro. Teste a sua função:

- reproduzindo os resultados dos Exemplos 6.1 e 6.2.
- escolhendo um problema físico ou biológico interessante.

6.3 Método de diferenças finitas

O método que vamos descrever para a resolução do PVF (6.7)-(6.9) é chamado **método de diferenças finitas**, pois baseia-se no uso de fórmulas de diferenças finitas para aproximar as derivadas envolvidas em (6.7).

6.3.1 Diferenças finitas para aproximar derivadas

Sejam $x, x - h$ e $x + h$ três pontos de um intervalo onde uma determinada função y está definida.² Consideremos as expansões em série de Taylor de $y(x + h)$ e $y(x - h)$ em torno de x , até à segunda ordem:

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(\xi), \quad \xi \in (x, x + h) \quad (6.12)$$

$$y(x - h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(\mu), \quad \mu \in (x - h, x) \quad (6.13)$$

De (6.12) decorre de imediato que

$$\frac{y(x + h) - y(x)}{h} = y'(x) + \frac{h}{2}y''(\xi), \quad \xi \in (x, x + h).$$

Temos, então

$$y'(x) = \frac{y(x + h) - y(x)}{h} - \frac{h}{2}y''(\xi) = \frac{y(x + h) - y(x)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (6.14)$$

Assim, se h for pequeno, poderemos aproximar a derivada de y no ponto x pela combinação linear dos valores de y em x e $x + h$ dada por

$$\frac{y(x + h) - y(x)}{h}. \quad (6.15)$$

Essa expressão é conhecida por **diferença finita progressiva de 1ª ordem** para aproximar $y'(x)$. De modo análogo se define a **diferença finita regressiva de 1ª ordem**

$$\frac{y(x) - y(x - h)}{h}, \quad (6.16)$$

tendo-se, naturalmente,

$$y'(x) = \frac{y(x) - y(x - h)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (6.17)$$

Se y for três vezes continuamente diferenciável em $[x - h, x + h]$, tem-se

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \frac{h^3}{6}y'''(\xi_+), \quad \xi_+ \in (x, x + h)$$

$$y(x - h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) - \frac{h^3}{6}y'''(\xi_-), \quad \xi_- \in (x - h, x)$$

Subtraindo membro a membro, vem

$$y(x + h) - y(x - h) = 2hy'(x) + \frac{h^3}{3} \left(\frac{y'''(\xi_+) + y'''(\xi_-)}{2} \right).$$

Sendo y''' contínua, a média dos valores $y'''(\xi_+)$ e $y'''(\xi_-)$ será igual a $y'''(\xi)$ para algum $\xi \in (x - h, x + h)$. Tem-se, assim, a seguinte fórmula, conhecida por **diferença finita centrada de segunda ordem para aproximar $y'(x)$** :

$$\begin{aligned} y'(x) &= \frac{y(x + h) - y(x - h)}{2h} - \frac{h^2}{6}y'''(\xi) \\ &= \frac{y(x + h) - y(x - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned} \quad (6.18)$$

²No que se segue, admitimos sempre que a função em causa tem tantas derivadas contínuas quanto necessário.

Fórmulas de diferenças finitas para aproximar outras derivadas de y podem ser obtidas de modo análogo. Em particular, tem-se a seguinte **fórmula centrada (de segunda ordem)** para aproximar $y''(x)$:

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (6.19)$$

6.3.2 Método das diferenças finitas para problemas lineares

Dividamos o intervalo $[a, b]$ em N subintervalos de igual amplitude h , pela introdução de $N + 1$ nós, i.e. sejam

$$x_k = a + (k-1)h; k = 1, \dots, N+1; h = \frac{b-a}{N}. \quad (6.20)$$

Os nós $x_1 = a$ e $x_{N+1} = b$ são ditos **nós fronteiros**, sendo os restantes chamados **nós interiores**.

Em cada nó interior a equação diferencial

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x)$$

tem de ser satisfeita, isto é, tem-se

$$y''(x_k) + p(x_k)y'(x_k) + q(x_k)y(x_k) = r(x_k); k = 2, \dots, N. \quad (6.21)$$

Se substituirmos as derivadas envolvidas na equação anterior por fórmulas de diferenças centradas (de 2ª ordem), vem

$$\begin{aligned} \frac{y(x_{k+1}) - 2y(x_k) + y(x_{k-1}))}{h^2} + p(x_k) \frac{y(x_{k+1}) - y(x_{k-1}))}{2h} + \\ + q(x_k)y(x_k) = r(x_k) + \mathcal{O}(h^2); k = 2, \dots, N. \end{aligned}$$

Aproximações y_k para $y(x_k)$ poderão ser obtidas das equações anteriores “ignorando” os termos $\mathcal{O}(h^2)$, isto é, de

$$\begin{aligned} \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} + p(x_k) \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h} + q(x_k)y_k = r(x_k); \\ k = 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (6.22)$$

sendo os valores y_1 e y_{N+1} conhecidos, das condições de fronteira:

$$y_1 = y(x_1) = \alpha, \quad y_{N+1} = y(x_{N+1}) = \beta. \quad (6.23)$$

As equações (6.22) podem reescrever-se como

$$\underbrace{\left(1 - \frac{h}{2}p(x_k)\right)}_{a_k} y_{k-1} + \underbrace{\left(-2 + h^2q(x_k)\right)}_{d_k} y_k + \underbrace{\left(1 + \frac{h}{2}p(x_k)\right)}_{c_k} y_{k+1} = \underbrace{h^2r(x_k)}_{b_k}; \quad k = 2, \dots, N. \quad (6.24)$$

Estas equações, juntamente com (6.23), constituem um sistema linear de $N - 1$ equações nas $N - 1$ incógnitas y_2, \dots, y_N , o qual pode ser escrito na forma matricial

$$T\mathbf{y} = \mathbf{b},$$

onde:

- T é a matriz tridiagonal

$$T = \begin{pmatrix} d_2 & c_2 & & & \\ a_3 & d_3 & c_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-1} & d_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & a_N & d_N \end{pmatrix},$$

em que

$$a_k = 1 - \frac{h}{2} p(x_k), \quad d_k = -2 + h^2 q(x_k), \quad c_k = 1 + \frac{h}{2} p(x_k),$$

- $\mathbf{y} = (y_2, \dots, y_N)^\top$
- $\mathbf{b} = (h^2 r(x_2) - a_2 \alpha, h^2 r(x_3), \dots, h^2 r(x_{N-1}), h^2 r(x_N) - c_N \beta)^\top$.

O método que descrevemos é chamado **método das diferenças finitas de 2ª ordem** para resolver o PVF considerado.

6.3.3 Condições de fronteira envolvendo derivadas

Para ilustrar a aplicação de métodos de diferenças finitas para problemas cujas condições de fronteira não sejam tão simples como as condições (6.8)-(6.9), considere-se, por exemplo, um problema do tipo

$$\begin{cases} y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & x \in [a, b], \\ y'(a) = \gamma, \\ y(b) = \beta. \end{cases}$$

Supondo que são usadas as mesmas fórmulas de diferenças finitas, teremos então as mesmas equações (6.24) para obter y_2, y_3, \dots, y_N .

A diferença agora, é que o valor de y_1 na primeira equação não é conhecido da condição de fronteira em $x = a$, sendo portanto uma nova incógnita a determinar.

Uma primeira possibilidade será aproximar condição de fronteira em a , $y'(a) = \gamma$, usando a fórmula de diferenças progressiva, obtendo, então uma nova equação

$$\frac{y_2 - y_1}{h} = \gamma,$$

a qual, adicionada às $N - 1$ equações (6.24), permitirá determinar as N incógnitas y_1, \dots, y_N .

Note-se, no entanto, que

$$\frac{y(x_2) - y(x_1)}{h} = y'(x_1) + \mathcal{O}(h),$$

ou seja, esta fórmula tem ordem de precisão inferior às fórmulas usadas nos restantes pontos.

Se introduzirmos a notação $x_0 = x_1 - h = a - h$, tem-se, usando a forma centrada de 2ª ordem:

$$\frac{y(x_2) - y(x_0)}{2h} = y'(x_1) + \mathcal{O}(h^2).$$

Assim, para que seja usada uma fórmula na fronteira com a mesma ordem de precisão ($\mathcal{O}(h^2)$) das usadas nos restantes pontos, dever-se-á usar esta última fórmula.

Nesse caso, obter-se-á uma nova equação

$$y_2 - y_0 = 2h\gamma, \quad (6.25)$$

a qual envolve, no entanto, uma nova incógnita $y_0 \approx y(x_0)$.

Uma equação adicional para (juntamente com as $N - 1$ equações (6.24) e a equação (6.25)) permitir determinar y_0, y_1, \dots, y_{N-1} pode ser obtida aproximando também a equação diferencial no ponto fronteiro $x_1 = a$, isto é, exigindo que

$$\frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2} + p(x_1)\frac{y_2 - y_0}{2h} + q(x_1)y_1 = r(x_1),$$

o que corresponde à equação

$$\underbrace{\left(1 - \frac{h}{2}p(x_1)\right)}_{a_1} y_0 + \underbrace{\left(-2 + h^2q(x_1)\right)}_{d_1} y_1 + \underbrace{\left(1 + \frac{h}{2}p(x_1)\right)}_{c_1} y_2 = \underbrace{h^2r(x_1)}_{b_1}. \quad (6.26)$$

6.3.4 Exercícios

Exercício 6.2 Use o método das diferenças finitas para obter a solução do problema do Exemplo 6.1. Comente os resultados obtidos.

Exercício 6.3 a) Escreva uma função $y = \text{pvf2D}$, para determinar a solução de um problema de valores de fronteira de 2ª ordem da forma

$$\begin{cases} y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & x \in [a, b], \\ y(a) = \alpha, \\ y(b) = \beta. \end{cases}$$

usando o método das diferenças finitas de 2ª ordem.

b) Considere o problema

$$x^2 y''(x) - x(x+2)y'(x) + (x+2)y(x) = 0,$$

cujas soluções gerais são da forma $y(x) = c_1 x + c_2 x e^x$.

- Qual é a solução do problema, se as condições de fronteira $y(1) = e$, $y(2) = 2e^2$, forem usadas?
- Teste o código desenvolvido na alínea anterior na resolução deste problema. Represente graficamente a solução aproximada e a solução exata, para $N = 20$.
- Efetue várias experiências com $N = 5, 10, 20, 40, 80$, calcule o erro máximo para cada um destes valores de N e verifique se os resultados obtidos confirmam a ordem de convergência esperada.

Exercício 6.4 Considere o problema de valores de fronteira

$$\begin{cases} y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & x \in [a, b], \\ \alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = \alpha, \\ \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = \beta. \end{cases}$$

- a) Escreva o sistema de equações lineares resultante da aplicação do método das diferenças finitas de 2ª ordem a este problema.
- b) Resolva o seguinte problema, usando $N = 10, 20, 40, 80, 160$.

$$\begin{cases} y''(x) - y(x) = x, & x \in [0, 1], \\ 2y(0) + y'(0) = 2, \\ y(1) = y'(1). \end{cases}$$

Apresente, sob a forma de uma tabela, o erro máximo obtido para cada valor de N .

(A solução deste problema é $y(x) = \exp(x) - x$.)

Exercício 6.5 Considere o problema de valores de fronteira

$$\begin{cases} y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & x \in [a, b], \\ y(a) = y(b). \end{cases}$$

Escreva o sistema de equações lineares resultante da aplicação do método das diferenças finitas de 2ª ordem a este problema. Ilustre o método apresentando um exemplo adequado.

Exercício 6.6 A equação de Bratu

$$y''(x) + \lambda e^{y(x)} = 0,$$

com as condições de fronteira

$$y(0) = 0, \quad y(1) = 0,$$

pode ter, dependendo do valor de λ , uma, duas ou nenhuma solução.

- a) Use o *help* do Matlab para obter informação sobre o *solver* **bvp4c**.
- b) Para $\lambda = 1$, o problema tem duas soluções, mas os resultados obtidos, usando a função **bvp4c**, dependem fortemente das aproximações iniciais usadas. Ilustre este facto, considerando sucessivamente as seguintes aproximações iniciais:
- a) $y(x) = 0.1, \quad y'(x) = 0$
- b) $y(x) = 3, \quad y'(x) = 0$
- c) $y(x) = k x(1 - x), \quad y'(x) = k(1 - 2x); \quad k = 1, 5, 20, 100$

Conteúdo

5	Problemas de valor inicial	3
5.1	Problemas de valor inicial: background	3
5.1.1	Introdução	3
5.1.2	Existência e unicidade de solução	4
5.1.3	Métodos de variável discreta	5
5.1.4	Método de Euler	6
5.1.5	Métodos baseados na série de Taylor	10
5.1.6	Métodos de Runge-Kutta	11
5.1.7	Exercícios	15
5.2	Métodos de passo único adaptativos	16
5.2.1	Controle adaptativo do passo	16
5.2.2	Exercícios	18
5.3	Métodos de Passo Múltiplo	19
5.3.1	Métodos Explícitos :: Métodos de Adams-Bashforth	19
5.3.2	Métodos Implícitos :: Métodos de Adams-Moulton	21
5.3.3	Métodos Preditores-Corretores	22
5.3.4	Métodos de Diferenciação Regressiva	22
5.3.5	Exercícios	24
5.4	Consistência e estabilidade	26
5.4.1	Condicionamento de um problema	26
5.4.2	Estabilidade, consistência, convergência	27
5.4.3	Equações rígidas ou stiff	31
5.4.4	Exercícios	37
6	Problemas de valores de fronteira	39
6.1	Introdução	39
6.2	Método do tiro	39
6.2.1	Problemas lineares	40
6.2.2	Problemas não lineares	41

6.2.3	Exercícios	43
6.3	Método de diferenças finitas	43
6.3.1	Diferenças finitas para aproximar derivadas	44
6.3.2	Método das diferenças finitas para problemas lineares	45
6.3.3	Condições de fronteira envolvendo derivadas	46
6.3.4	Exercícios	47