

Universidade do Minho Escola de Ciências

Departamento de Matemática

Equações Diferenciais Ordinárias

- Problemas de Valores Iniciais
- → Problemas de Valores de Fronteira

PROBLEMAS DE VALORES INICIAIS

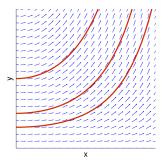
PVI de primeira ordem

PVI

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

$$y(a) = \alpha$$
 condição inicial

<u>Problema</u> Encontrar a curva integral que passa em (a, α) .



Curvas integrais

PVI de ordem superior a 1

► Ordem 2:

$$y'' + f(x)y' + g(x)y = h(x) \longrightarrow \begin{cases} y' = u \\ u' = h(x) - g(x)y - f(x)u \end{cases}$$
$$y'' = \underbrace{F(x, y, y')}_{h(x) - f(x)y' - g(x)y} \longrightarrow \underbrace{\mathbf{z}' = \mathbf{F}(x, \mathbf{z})}_{\mathbf{z} = (y, \mathbf{u}); \ \mathbf{F}(x, \mathbf{z}) = (\mathbf{u}, h(x) - g(x)y - f(x)u)}$$

Ordem k:

$$y^{(k)} = F(x, y', y'', \cdots, y^{(k-1)}) \quad \underset{z_i = y^{(i-1)}}{\longrightarrow} \quad \mathbf{z}' = \mathbf{F}(x, \mathbf{z})$$

Exemplo: Equação de van der Pol

$$y'' - \mu(1 - y^2)y' + y = 0$$
$$y(a) = \alpha \quad y'(a) = \beta$$

Reescrever como

$$\mathbf{z}' = \begin{bmatrix} y \\ u \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} u \\ \mu(1-y^2)u - y \end{bmatrix} \qquad \mathbf{z}_a = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

Existência e unicidade de solução

Teorema

Seja f(x,y) definida e contínua para todos os pontos (x,y) tais que $a \le x \le b, y \in \mathbb{R}$ (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

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

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

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

Métodos de variável discreta

ldeia: como não conseguimos determinar y(x) para todo o $x \in [a,b]$, calculamos aproximações y_k para os valores $y(x_k)$ num conjunto discreto de pontos $(x_k)_{k=0}^N$, nesse intervalo. Por simplificação, consideramos pontos equidistantes, i.e.,

 $x_k = a + kh; \ k = 0, 1, \dots, N$, onde o **passo** h é dado por

$$h = \frac{b-a}{N},$$

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** .

Métodos de passo único

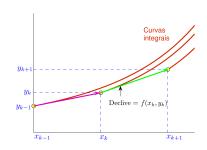
Método de Euler

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k); k = 0, 1, \dots, N - 1,$$

 $y_0 = \alpha.$

Geometricamente,

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



Exemplo: Método de Euler

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

Solução exata: $y(x) = e^{x^2/2}$.

$$h = 0.2$$

k	x_k	y_k	$y(x_k)$	Erro
1	0.2	1.000	1.020	0.020
2	0.4	1.040	1.083	0.043

$$h = 0.1$$

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

Método de Euler no MATLAB

```
function y=metEuler(f,a,b,alfa,N)
h=(b-a)/N;
x=a:h:b;
y=zeros(1,N+1);
v(1) = alfa;
for k=1:N
   y(k+1) = y(k) + h * f(x(k), y(k));
end
>> f=0(x,y) x.*y;
>> y=metEuler(f,0,0.4,1,4)
v =
1.0000 1.0000 1.0100 1.0302 1.0611
```

Erro de discretização

Erro de discretização local

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 $y_k = y(x_k)$. Por outras palavras,

 $\mathcal{L}_h(x_{k+1})$ é a diferença entre y_{k+1} e o valor em x_{k+1} da curva integral $x\mapsto \tilde{y}(x)$ que passa em (x_k,y_k) .

$$y \in C^{2}[a, b]$$

$$\Rightarrow |\mathcal{L}_{h}(x_{k+1})| \leq \frac{h^{2}}{2} M$$

$$M = \max_{a < x < b} |y''(x)|$$

O erro de discretização local do método de Euler é $\mathcal{O}(h^2)$.

Erro de discretização global

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} . Por outras palavras,

 $\epsilon_h(x_{k+1})$ é a diferença entre y_{k+1} e o valor em x_{k+1} da curva integral $x\mapsto y(x)$ que passa em (x_0,y_0) .

Erro de discretização do método de Euler

Se $y\in C^2[a,b],\, M=\max_{a\le x\le b}|y''(x)|$ e , além disso, f é diferenciável em relação à segunda variável com derivada parcial $\frac{\partial f}{\partial y}$ limitada, i.e. $|\frac{\partial f}{\partial y}|\le L$, então as aproximações obtidas pelo método de Euler convergem para a solução exata, quando $h\to 0$ e

$$|\epsilon_h(x_{k+1})| \le \frac{hM}{2L} (e^{(x_k - x_0)L} - 1),$$

i.e. o erro de discretização global do método de Euler é O(h).

Estimativa para o erro no método de Euler

- y_k aproximação para $y(x_k)$ obtida usando passo h
- \tilde{y}_k aproximação para $y(x_k)$ obtida usando passo 2h

Estimativa para o erro de discretização no ponto x_k : (correspondente ao uso do passo "mais fino")

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

Métodos baseados na série de Taylor

O método de Euler pode ser 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, retendo os três primeiros termos da série, obtém-se 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 tem 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.

Métodos de Runge-Kutta

Os chamados métodos de Runge-Kutta foram desenvolvidos com o objetivo de produzir resultados com o mesmo grau de precisão dos métodos obtidos pela expansão em série de Taylor, mas evitando o cálculo das várias derivadas da função f.

Método de Runge-Kutta de ordem 2

$$\begin{array}{rcl} y_{k+1} & = & y_k + \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \\ k_1 & = & hf(x_k, y_k), \\ k_2 & = & hf(x_k + h, y_k + k_1), \\ y_0 & = & \alpha. \end{array}$$

Este método corresponde a substituir $f(x_k, y_k)$ no método de Euler, por uma média pesada do valor de f nos pontos (x_k, y_k) e $(x_{k+1}, y_k + hf(x_k, y_k))$.

A ordem de convergência global deste método é $\mathcal{O}(h^2)$.

Método de Runge-Kutta de ordem 4

$$\begin{array}{rcl} y_{k+1} & = & y_k + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ k_1 & = & hf(x_k, y_k), \\ k_2 & = & hf(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{k_1}{2}), \\ k_3 & = & hf(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{k_2}{2}), \\ k_4 & = & hf(x_k + h, y_k + k_3), \\ y_0 & = & \alpha. \end{array}$$

Este método corresponde a substituir $f(x_k,y_k)$ no método de Euler, por uma média pesada do valor de f em 4 pontos.

A ordem de convergência global deste método é $\mathcal{O}(h^4)$.

Métodos de passo único

Métodos de passo único 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 $k\,$.

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

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

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 $\mathcal{O}(h^{p-1})$.

Erros de arredondamento

Consideremos um método de passo único da forma

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

com erro de discretização $\mathcal{O}(h^p)$.

$$h \ \mathbf{diminui} \left\{ egin{array}{ll} & \mathsf{Erro} \ \mathsf{discretiza} \\ \mathsf{c} & \mathsf{aumenta} \end{array}
ight.$$

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.

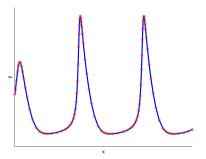
Métodos adaptativos

Relembremos que, para o Método de Euler, o erro de discretização local satisfaz

$$|\mathcal{L}_h(x_{k+1})| \le \frac{h^2}{2} M,$$

onde
$$M = \max_{a \le x \le b} |y''(x)|$$
.

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 (ver exercício),

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

Processo 2

Usar 2 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 (ver exercício),

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

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).

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

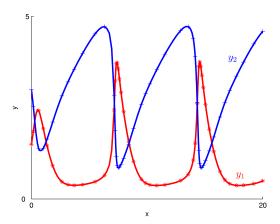
Este método precisa de 4 passos (3 avaliações da função, se o passo for aceite). Fehlberg (1979) desenvolveu o popular método F(4,5) que envolve apenas 6 passos (ver Pina, pag. 532). A função ode45 do Matlab é baseada no algoritmo de 7 passos de Dormand e Prince (1980) DOPRI5. O passo adicional é usado para melhorar a fórmula.

Exemplo: Resolver o sistema

$$\begin{cases} y_1' = 1 + y_1^2 y_2 - 4y_1, & y_1(0) = 1.5 \\ y_2' = 3y_1 - y_1^2 y_2, & y_2(0) = 3 \end{cases}$$

usando a função ode 45 do Matlab.

```
\Rightarrow f=0 (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')
```



PROBLEMAS DE VALORES DE FRONTEIRA

Diferenças finitas para aproximar derivadas

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

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(\xi), \quad \xi \in (x, x+h)$$
 (1)

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

De (1) decorre de imediato que

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

¹No que se segue, admitimos sempre que a função em causa tem tantas derivadas contínuas quanto necessário.

Temos, então

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - \frac{h}{2}y''(\xi) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} + \mathcal{O}(h).$$
(3)

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

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h}. (4)$$

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

$$\frac{y(x) - y(x - h)}{h},\tag{5}$$

tendo-se, naturalmente,

$$y'(x) = \frac{y(x) - y(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h). \tag{6}$$

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

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

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):

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}y'''(\xi)$$
$$= \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \tag{7}$$

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):

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$
 (8)

Problemas de Valores de Fronteira (PVF)

Consideremos, agora, uma equação diferencial de $2^{\underline{a}}$ ordem linear da forma

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), x \in [a, b],$$
(9)

com p,q e r funções contínuas em [a,b], sujeita a condições de fronteira do tipo²

$$y(a) = \alpha, \qquad y(b) = \beta. \tag{10}$$

As equações (9) e (10) definem um **problema de valores de fronteira (PVF)** para a função incógnita y, para a qual se pretende obter uma solução aproximada, numericamente.

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

²Condições de fronteira mais gerais serão consideradas posteriormente.

Método de diferenças finitas

O método que vamos descrever para a resolução do PVF (9)-(10) é chamado um **método de diferenças finitas**, pois baseia-se no uso de fórmulas de diferenças finitas para aproximar as derivadas envolvidas em (9).

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

$$x_k = a + (k-1)h; k = 1, \dots, N+1; h = \frac{b-a}{N}.$$
 (11)

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

$$y''(x_k) + p(x_k)y'(x_k) + q(x_k)y(x_k) = r(x_k); \ k = 2, \dots, N.$$
(12)

Se substituirmos as derivadas envolvidas na equação anterior por fórmulas de diferenças centradas (de $2^{\underline{a}}$ ordem), vem

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

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

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} + p(x_k) \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h} + q(x_k)y_k = r(x_k);$$

$$k = 2, \dots, N,$$
(13)

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

$$y_1 = y(x_1) = \alpha, \quad y_{N+1} = y(x_{N+1}) = \beta.$$
 (14)

As equações (13) podem reescrever-se como

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

$$k = 2, \dots, N. \quad (15)$$

Estas equações, juntamente com (14), constituem um sistema linear de N-1 equações nas N-1 incógnitas y_2,\ldots,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

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

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

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

Exemplo: Considere-se o seguinte PVF

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

Vamos determinar a solução numérica para este problema, usando o método das diferenças finitas de $2^{\underline{a}}$ ordem, com passo h=0.25.

Tem-se, neste caso, p(x)=1, q(x)=-x e $r(x)=-xe^{2-x}$. Então, as três equações correspondentes aos nós interiores são

$$(1 - \frac{h}{2})y_{k-1} + (-2 - h^2x_k)y_k + (1 + \frac{h}{2})y_{k+1} = -h^2(x_ke^{2-x_k}); k = 2, 3, 4,$$

ou seja, são, atendendo a que $x_2 = 1.25, x_3 = 1.5, x_4 = 1.75$ e h = 0.25:

Por uma questão de simplicidade, trabalharemos com 4 c.d.

$$\begin{cases} 0.8750y_1 - 2.0781y_2 + 1.1250y_3 = -0.1654 \\ 0.8750y_2 - 2.0938y_3 + 1.1250y_4 = -0.1546 \\ 0.8750y_3 - 2.1094y_4 + 1.1250y_5 = -0.1404 \end{cases}$$

Substituindo $y_1=2.7183$ (aproximação para $y(1)=e \ {\rm com} \ 4 \ {\rm c.d.}$ de precisão) na primeira equação e $y_5=1$ na terceira, obtém-se o seguinte sistema nas incógnitas

$$y_2, y_3, y_4$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -2.0781y_2 + 1.1250y_3 = -2.5439 \\ 0.8750y_2 - 2.0938y_3 + 1.1250y_4 = -0.1546 \\ 0.8750y_3 - 2.1094y_4 = -1.2654 \end{array} \right. ,$$

o qual pode escrever-se matricialmente como $T\mathbf{y} = \mathbf{b}$, onde

$$T = \begin{pmatrix} -2.0781 & 1.1250 & 0\\ 0.8750 & -2.0938 & 1.1250\\ 0 & 0.8750 & -2.1094 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{y} = (y_2, y_3, y_4)^{\mathrm{T}} \mathbf{e} \mathbf{b} = (-2.5439, -0.1546, -1.2654)^{\mathrm{T}}.$$

Resolvendo o sistema anterior, obtém-se

$$\mathbf{y} = (2.1162, 1.6478, 1.2834)^{\mathrm{T}}.$$

A solução analítica do problema é $y(x)=e^{2-x}$, pelo que, nos pontos considerados, tem-se (com 4 c.d.):

$$\mathbf{y}_{\text{exato}} = (2.1170, 1.6487, 1.2840)^{\text{T}}.$$

Exemplo: [Resolução em Matlab]

Apresenta-se de seguida uma sequência de instruções em Matlab para resolver o problema anterior (a qual poderá adaptar-se facilmente para a resolução de problemas análogos).

```
>> p = @(x) 1; q = @(x) -x; r = @(x) -x.*exp(2-x);
>> h = 0.25;
>> x = 1:h:2; N = length(x)-1;
>> alfa = exp(1); beta = 1;
>> a=zeros(size(x));
>> b=a; c=a;d=a;
```

```
>> for k=2:N
a(k) = 1 - (h/2) *p(x(k));
d(k) = -2+h^2*q(x(k));
c(k) = 1 + (h/2) *p(x(k));
b(k) = h^2*r(x(k));
end
>> av = a(3:N); dv = d(2:N); cv = c(2:N-1);
>> T=diag(dv)+diag(av,-1)+diag(cv,1)
T =
-2.0781 1.1250
                  0
0.8750 -2.0938 1.1250
        0.8750 -2.1094
```

```
>> b(2) = b(2) -a(2)*alfa;
>> b(N) = b(N) - c(N) * beta;
>> bv=b(2:N)'
bv =
-2.5439
-0.1546
-1.2654
>> v=(T\bv)'
y=
2.1162
      1.6478 1.2834
>>  yanal=@(x) exp(2-x);
>> yexato=yanal(x(2:N))
vexato= =
2.1170
      1.6487 1.2840
```

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 (10), 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 (15) 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 (15), permitirá determinar as N incógnitas y_1,\dots,y_N .

Note-se, no entanto, que

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

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 $2^{\underline{a}}$ 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

$$y_2 - y_0 = 2h\gamma, \tag{16}$$

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

Uma equação adicional para (juntamente com as N-1 equações (15) e a equação (16)) 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

$$\underbrace{(1 - \frac{h}{2}p(x_1))}_{a_1} y_0 + \underbrace{(-2 + h^2q(x_1))}_{d_1} y_1 + \underbrace{(1 + \frac{h}{2}p(x_1))}_{c_1} y_2 = \underbrace{h^2r(x_1)}_{b_1}$$
(17)

Exemplo: Considere-se agora o seguinte PVF, análogo ao anterior, mas em que a condição de fronteira no ponto x=1 envolve o valor de y':

$$\begin{cases} y''(x) + y'(x) - xy(x) = -xe^{2-x}, & x \in [1, 2], \\ \frac{y'(1) = -e}{y(2) = 1}. \end{cases}$$

Determinemos a solução numérica para este problema, usando novamente o método das diferenças finitas de $2^{\underline{a}}$ ordem, com passo h=0.25.

Temos as mesmas equações resultantes dos nós interiores

$$\begin{cases} 0.8750y_1 - 2.0781y_2 + 1.1250y_3 = -0.1654 \\ 0.8750y_2 - 2.0938y_3 + 1.1250y_4 = -0.1546 \\ 0.8750y_3 - 2.1094y_4 + 1.1250y_5 = -0.1404 \end{cases} .$$

Substituindo $y_5=1$ na última equação, obtém-se

$$0.875y_3 - 2.1094y_4 = -1.2654.$$

Da condição de fronteira em x = 1, vem

$$\frac{y_2 - y_0}{2h} = -2.7183 \iff y_2 - y_0 = -1.3591.$$

Além disso, a equação relativa a x_1 é:

$$0.8750y_0 - 2.0625y_1 + 1.1250y_2 = -0.1699.$$

Tem-se, então, o sistema $T\mathbf{y} = \mathbf{b}$, onde $\mathbf{y} = (y_0, y_1, \dots, y_4)^T$,

$$T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0.8750 & -2.0625 & 1.1250 & 0 & 0 \\ 0 & 0.8750 & -2.0781 & 1.1250 & 0 \\ 0 & 0 & 0.8750 & -2.0938 & 1.1250 \\ 0 & 0 & 0 & 0.8750 & -2.1094 \end{pmatrix}$$

е

$$\mathbf{b} = (-1.3591, -0.1699, -0.1654, -0.1546, -1.2654)^{\mathrm{T}}.$$

Resolvendo esse sistema, obtém-se

$$\mathbf{y} = (3.4651, 2.7011, 2.1060, 1.6423, 1.2811)^{\mathrm{T}}.$$

A solução analítica do problema é a mesma do problema anterior,ou seja, é $y(x)=e^{2-x}$, pelo que, nos pontos considerados, tem-se (com 4 c.d.):

$$\mathbf{y}_{\text{exato}} = (3.4903, 2.7183, 2.1170, 1.6487, 1.2840)^{\mathrm{T}}.$$

Exemplo: [Resolução em Matlab]

```
>> p = @(x) 1; q = @(x) -x; r = @(x) -x.*exp(2-x);
>> h = 0.25; x = 1:h:2; N = length(x)-1;
>> gama = -exp(1); beta = 1;
>> a = zeros(size(x));
>> b=a;c=a;d=a;
>> for k = 1:N % Note-se que aqui k começa em 1
a(k) = 1 - (h/2) *p(x(k));
d(k) = -2+h^2*q(x(k));
c(k) = 1 + (h/2) *p(x(k));
b(k) = h^2*r(x(k));
end
```

```
>> av = a(2:N); % Notar que os indices vão de 2 a N
>> dv = d(1:N); % Notar que os indices vão de 1 a N
>> cv = c(1:N-1); % Notar que os indices vão de 1 a N-1
>> T = zeros(5):
>> ST = diag(dv)+diag(av,-1)+diag(cv,1); % Submatriz de T
>> T(2:end,2:end)=ST;
>> T(1,1) = 1; T(1,3) = -1; T(2,1) = a(1);
>> T
T =
1.0000
       0 -1.0000
                          0
0.8750
      -2.0625 1.1250
0
        0.8750 -2.0781 1.1250
                0.8750 -2.0938 1.1250
Ω
                        0.8750
                                  -2.1094
                 0
```

```
>> b(N) = b(N) - c(N) * beta;
>> bv = b(1:N)';
>> bv = [2*h*qama;bv]
bv =
-1.3591
-0.1699
-0.1654
-0.1546
-1.2654
>> v=(T\bv)'
3.4651 2.7012 2.1060 1.6423 1.2812
>> vanal = @(x) \exp(2-x);
>> xExt = [1-h, x(1:end-1)];
>> vexato = vanal(xExt)
vexato =
3.4903
        2.7183 2.1170 1.6487 1.2840
```