



Universidade de Brasília

Introdução a Métodos Computacionais em Equações Diferenciais Ordinárias

Dr. Yuri Dumaresq Sobral e Caio Tomás de Paula

Departamento de Matemática
Universidade de Brasília

Conteúdo

1	Conceitos fundamentais e o método de Euler	I
1.1	O método de Euler	2
1.2	Métodos de Taylor	7
1.3	Formulação integral equivalente e métodos geométricos	8
1.3.1	Método de Euler revisitado	9
1.3.2	Regra do trapézio (Método de Crank-Nicolson)	10
1.3.3	Métodos θ	11
1.3.4	Regra do ponto médio	12
	Exercícios	14
2	Métodos de Passos Múltiplos	19
2.1	Polinômios Interpoladores	19
2.2	Métodos de Adams	24
2.2.1	Métodos de Adams-Bashforth	24
2.2.2	Métodos de Adams-Moulton	26
2.3	Fórmulas de Diferenças Atrasadas	27
2.4	Caso geral: ordem e convergência de métodos de passos múltiplos	28
2.5	Métodos Preditores-Corretores	34
	Exercícios	36
3	Métodos de Runge-Kutta	39
3.1	Introdução	39
3.2	Métodos de Quadratura	41
3.3	Métodos de Runge-Kutta explícitos	48
3.4	Métodos de Runge-Kutta implícitos	52
	Exercícios	54
4	Estabilidade de Métodos Numéricos	59
4.1	Rigidez e A-estabilidade	59
4.2	Resultados fundamentais	66
	Exercícios	69
5	Problemas de Valor de Contorno	73
5.1	Problemas lineares (2 pontos, EDOs de 2ª ordem)	75

5.2	Problemas não-lineares (2 pontos, EDOs de 2ª ordem)	77
5.3	Equações de ordem superior (2 pontos)	79
	Exercícios	82
Índice		87

CONCEITOS FUNDAMENTAIS E O MÉTODO DE EULER

Queremos resolver EDOs do tipo

$$F(t, y, y', y'', \dots, y^{(N)}) = 0.$$

Em Análise Numérica, preferimos a forma

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \mathbf{y} \in \mathbb{R}^N.$$

De fato, qualquer EDO de ordem N pode ser escrita como um sistema de N EDOs de 1ª ordem!

Exemplo 1.1. A EDO

$$y''' + 5y'' + 4y' + 3y = \sin t$$

pode ser escrita como o sistema

$$\begin{cases} y' = \omega \\ \omega' = z \\ z' = \sin t - 3y - 4\omega - 5z \end{cases}$$

e, portanto, na forma

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \mathbf{y} \in \mathbb{R}^N.$$

sendo

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y \\ \omega \\ z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \omega \\ z \\ \sin t - 3y - 4\omega - 5z \end{bmatrix}.$$

De agora em diante, usaremos $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ para representar um sistema de EDOs de 1ª ordem. Em nosso curso, estudaremos principalmente PVIIs que têm a forma

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), t > t_0 \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 \text{ (valor conhecido).} \end{cases} \quad (1.1)$$

Um outro tipo de problema é o PVC, que tem a forma

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), & t_0 < t < t_1 \\ \mathbf{y}|_{\partial\Omega} = \mathbf{y}_0(t). \end{cases}$$

Em geral, vamos pedir que f seja Lipschitz, ou seja, que dados quaisquer \mathbf{x}, \mathbf{y} no domínio de f , existe uma constante $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{x})\| \leq \lambda \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \quad (1.2)$$

A constante λ é chamada **constante de Lipschitz**.

Observação 1.1. Se f for contínua em t e Lipschitz contínua em \mathbf{y} , então o PVI (1.1) admite solução única em $[t_0, t_0 + T]$ para algum $T > t_0$.¹

1.1 O método de Euler

Suponha que temos o PVI (1.1). Como conhecemos a solução em $t = t_0$, podemos pensar em calcular uma aproximação para $\mathbf{y}(t)$ a partir de sua série de Taylor em t_0 :

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}(t_0) + \mathbf{y}'(t_0)(t - t_0) + \frac{\mathbf{y}''}{2}(t_0)(t - t_0)^2 + \dots$$

Vamos considerar apenas uma aproximação **linear** utilizando o resto de Lagrange:

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}(t_0) + \mathbf{y}'(t_0)(t - t_0) + \frac{\mathbf{y}''}{2}(\tau_0)(t - t_0)^2, \quad \tau_0 \in (t_0, t).$$

Uma aproximação para $\mathbf{y}(t_1)$, sendo $t_1 = t_0 + h$, é

$$\mathbf{y}(t_1) \approx \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}(t_0) + h\mathbf{y}'(t_0) = \mathbf{y}(t_0) + h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0).$$

Repetindo este processo para $t_k = t_0 + kh$, segue que

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n), \quad h = t_i - t_{i-1}, \quad (1.3)$$

que é chamado **método de Euler**.

Notação.

$\mathbf{y}(t_i)$ denota o valor exato da solução \mathbf{y} em $t = t_i$;

\mathbf{y}_i denota a aproximação da solução \mathbf{y} em $t = t_i$ calculada pelo método;

h denota o passo de tempo tomado no método.

Geometricamente, o método de Euler corresponde à seguinte situação.

¹Este resultado é conhecido como o Teorema de Picard-Lindelöf.

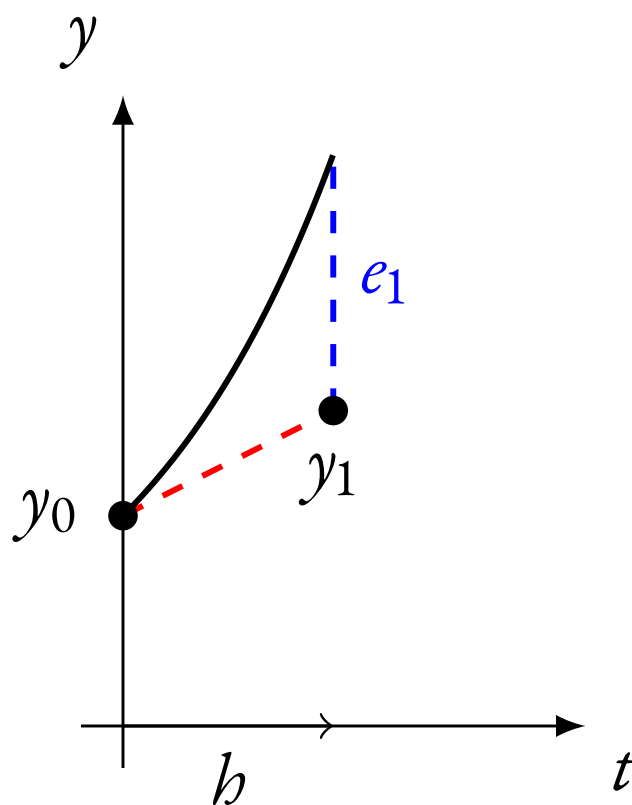


Figura 1.1 Geometria do método de Euler explícito.

O erro cometido a cada passo, e_i , inevitavelmente se acumula conforme avançamos. O que acontece é que a cada iteração do método de Euler nós vamos para o ponto certo da solução errada!

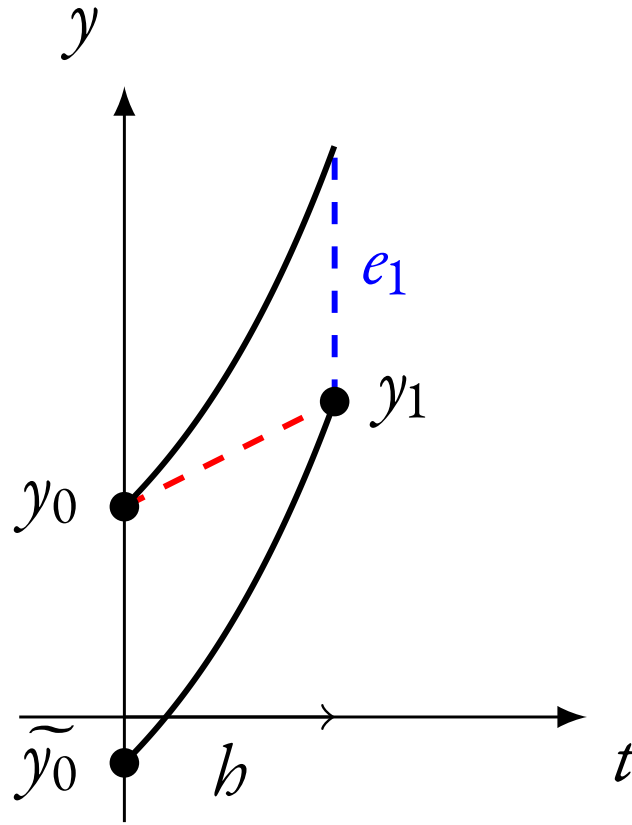


Figura 1.2 Aproximação (correta) para a solução (errada) do método de Euler explícito.

Para entendermos como a solução, isto é, o erro se comporta, precisamos analisar como ele evolui durante o processo iterativo. Temos dois tipos de erro:

Erro de truncamento local. Considere que um método seja dado por

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathcal{Y}(\mathbf{f}, h, \mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n),$$

um processo iterativo de ordem $n + 1$. Definimos o **erro de truncamento local** deste método por

$$\varepsilon_{n+1}^\ell = |\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathcal{Y}(\mathbf{f}, h, \mathbf{y}(t_0), \mathbf{y}(t_1), \dots, \mathbf{y}(t_n))|. \quad (1.4)$$

Ele representa o erro cometido exclusivamente pela aproximação que o método faz em determinar $\mathbf{y}(t_{n+1})$.

Exemplo 1.2. O erro de truncamento local do método de Euler é dado por

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1}^\ell &= |y(t_{n+1}) - y(t_n) - hf(t_n, y(t_n))| \\ &= \left| y(t_n) + hy'(t_n) + \frac{h^2}{2}y''(\tau_n) - y(t_n) - hf(t_n, y(t_n)) \right| \\ &= \left| \frac{h^2}{2}y''(\tau_n) \right|, \end{aligned}$$

ou seja, é o erro de Lagrange!

Definição 1.1. Dizemos que um método é **de ordem** p se o seu erro de truncamento local for $O(h^{p+1})$.

O método de Euler, por exemplo, é de ordem 1, pois $\varepsilon_{n+1}^\ell = O(h^2)$.

Definição 1.2. Dizemos que um método é **consistente** se sua ordem for pelo menos 1.

Um método consistente é aquele que sempre recupera a EDO original quando a aproximação é desfeita, isto é, quando h tende a 0. A definição acima é equivalente a dizer que $\varepsilon_{n+1}^\ell = o(h)$, onde $g = o(h)$ representa que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{g}{h} = 0.$$

Erro de truncamento global. Este é o erro “total” que verificamos em uma determinada iteração do método:

$$e_n = |y(t_n) - y_n|. \quad (1.5)$$

Definição 1.3. Dizemos que um método é **convergente** se, e só se,

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \max_n e_n = 0, \quad (1.6)$$

ou seja, só se a solução calculada tende à solução exata quando $h \rightarrow 0^+$.

Para que um método seja útil, ele precisa ser convergente! Além disso, na prática, o erro de truncamento global é desconhecido, porque em geral não conhecemos a solução exata do problema em questão. Por isso, provar a convergência de um método requer argumentos matemáticos, que podem ser, por vezes, delicados.

Teorema 1.1. O método de Euler é convergente.

Demonstração. Por definição,

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= |y(t_{n+1}) - y_{n+1}| = |y(t_{n+1}) - y_n - hf(t_n, y_n)| \\ &= \left| y(t_n) + hy'(t_n) + \frac{h^2}{2}y''(\tau_n) - y_n - hf(t_n, y_n) \right| \\ &\leq e_n + h\lambda |y(t_n) - y_n| + \left| \frac{h^2}{2}y''(\tau_n) \right|, \end{aligned}$$

onde a desigualdade segue do fato de f ser Lipschitz. Escolhendo M como o máximo do módulo de $y''(t)/2$ no intervalo de integração, temos

$$e_{n+1} \leq (1 + h\lambda)e_n + h^2M.$$

Daí, como $e_0 = 0$, segue que

$$e_n \leq h^2M \sum_{k=0}^{n-1} (1 + h\lambda)^k = \frac{Mh}{\lambda} [(1 + h\lambda)^n - 1].$$

Sendo T o comprimento do intervalo de integração, temos $h = T/n$ e, portanto, $(1 + h\lambda)^n = (1 + h\lambda)^{T/h} \xrightarrow{h \rightarrow 0^+} e^{\lambda T}$, ou seja,

$$e_n \xrightarrow{h \rightarrow 0^+} 0.$$

□

A definição de ordem que demos se baseia no erro de truncamento local, ε_{n+1}^ℓ , e pode ser estranho dizer que um método é de ordem p se o erro de truncamento local é de ordem $p + 1$. Não obstante, essa definição se justifica pelo fato de que $\varepsilon_{n+1}^\ell = O(h^{p+1})$ é equivalente a $e_{n+1} = O(h^p)$, ou seja, um método é de ordem p se o erro de truncamento global o é.

Com base no teorema acima, poder-se-ia pensar que, para resolver todo e qualquer problema de erro de soluções numéricas de EDOs, bastaria diminuir o passo h . Apesar de intuitivo, esta não é uma solução válida no mundo dos computadores reais, devido a erros de **arredondamento/ponto flutuante** que estes cometem e que se amplificam quando quantidades muito pequenas estão envolvidas nas contas. De fato, podemos escrever a representação computacional de y_0 como

$$\widetilde{y}_0 = y_0 + \widetilde{\delta}_0,$$

sendo $\widetilde{\delta}_0$ o erro de arredondamento neste passo inicial. Com esta representação, o método de Euler é dado por

$$\widetilde{y}_{n+1} = \widetilde{y}_n + hf(t_n, \widetilde{y}_n) + \widetilde{\delta}_n$$

e, seguindo os mesmos passos da demonstração da convergência deste método, o erro de truncamento global é dado por

$$e_{n+1} \leq (1 + h\lambda)e_n + h^2 M + \widetilde{\delta}_{n+1}.$$

Portanto,

$$e_n \leq Mb^2 \sum_{k=0}^{n-1} (1 + h\lambda)^i + \widetilde{\delta}_{\max} \sum_{k=0}^n (1 + h\lambda)^k,$$

sendo $\widetilde{\delta}_{\max} = \max_{k \in \{0, 1, \dots, n\}} \widetilde{\delta}_k$. Simplificando os somatórios, segue que

$$e_n \leq \left(\frac{Mb}{\lambda} + \frac{\widetilde{\delta}_{\max}}{h} \right) (e^{\lambda T} - 1) + \widetilde{\delta}_{\max} e^{\lambda T} \xrightarrow{h \rightarrow 0^+} +\infty.$$

Portanto, o erro de truncamento global diverge quando diminuirmos h arbitrariamente e não melhoramos a qualidade da solução numérica fazendo isso. Precisamos adotar outra abordagem, como buscar métodos de ordens maiores.

1.2 Métodos de Taylor

Uma maneira de criar métodos de ordem maior é olhar, novamente, para a série de Taylor de y . Considerando sua expansão em torno de $t_i = t - h$, temos

$$y(t) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!}y''(t_i) + \cdots + \frac{h^N}{N!}y^{(N)}(t_i) + \frac{h^{N+1}}{(N+1)!}y^{(N+1)}(\tau_i),$$

para $\tau_i \in (t_i, t)$. Vimos que o erro de truncamento local do método de Euler era precisamente o resto de Lagrange da série de Taylor usada para construí-lo. Portanto, podemos usar a série de Taylor como uma ferramenta para construir métodos de alta ordem, bastando considerar mais termos na série quanto maior for a ordem desejada!

Por exemplo, para construir um método de ordem 2, ou seja, com $\varepsilon_{n+1}^\ell = O(h^3)$, escrevemos

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!}y''(t_i) + O(h^3).$$

Sabemos, pelo PVI, que $y'(t_i) = f(t_i, y(t_i))$. Portanto, precisamos escrever $y''(t_i)$ em termos de f . Para tal, usamos a regra da cadeia:

$$\begin{aligned} y''(t) &= \frac{d}{dt}[y'(t)] = \frac{d}{dt}[f(t, y(t))] \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dt} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + f(t, y(t)) \frac{\partial f}{\partial y}. \end{aligned}$$

Logo,

$$y''(t_i) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{(t_i, y(t_i))} + f(t_i, y(t_i)) \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(t_i, y(t_i))}$$

e o método procurado é dado por

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} \left[\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{(t_n, y_n)} + f(t_n, y_n) \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(t_n, y_n)} \right], \quad (1.7)$$

chamado **método de Taylor de segunda ordem**.

Exemplo 1.3. O método de Taylor de segunda ordem para o PVI

$$y'(t) = \sin y + 3t^2, \quad y(0) = 0$$

é dado por

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} \left[\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{(t_n, y_n)} + f(t_n, y_n) \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{(t_n, y_n)} \right] \\ &= y_n + h(\sin y_n + 3t_n^2) + \frac{h^2}{2!} [6t_n + \cos y_n (\sin y_n + 3t_n^2)]. \end{aligned}$$

Fica claro que construir os métodos de Taylor fica bastante trabalhoso conforme a ordem desejada cresce. Por exemplo, o método de Taylor de ordem 3 é dado por

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!} y''(t_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(t_i),$$

sendo y'' como acima e

$$\begin{aligned} y'''(t) &= \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right] + f \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right] \\ &= \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + f \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial y} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial f}{\partial t} + \left[\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial t} + f \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \right] f. \end{aligned}$$

Fica evidente que os métodos de Taylor não são práticos (mas, na teoria, são os mais simples!). Soma-se à impraticidade desses métodos o fato de, em cada iteração, termos de realizar muitas operações, o que leva a um aumento significativo dos erros de arredondamento provenientes do computador. Portanto, temos de encontrar outras maneiras de construir métodos de alta ordem.

1.3 Formulação integral equivalente e métodos geométricos

Até agora, usamos apenas a série de Taylor para construir os nossos métodos numéricos de solução de EDOs. Para tanto, é necessário que y tenha tantas derivadas quanto a ordem do método exigir, o que não é um pedido trivial.

Uma forma alternativa de construir métodos e que evita essa restrição é obtida olhando para a **formulação integral equivalente** da EDO

$$y'(t) = f(t, y(t)) \iff \int_{t_0}^t y'(\tau) d\tau = \int_{t_0}^t f(\tau, y(\tau)) d\tau \iff y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t y'(\tau) d\tau. \quad (1.8)$$

Com essa formulação, transformamos o problema de encontrar y no problema de calcular a integral de f ! Isso é vantajoso porque exigir integrabilidade é um pedido muito mais humilde do que pedir por diferenciabilidade.

1.3.1 Método de Euler revisitado

Vamos reconstruir o método de Euler usando a formulação integral equivalente. Assumindo $f(\tau, y(\tau)) = f(t_0, y_0)$ em $[t_0, t]$, segue que

$$\int_{t_0}^t f(\tau, y(\tau)) d\tau \approx \int_{t_0}^t f(t_0, y_0) d\tau = (t - t_0)f(t_0, y_0).$$

Portanto, tomando $t_1 = t_0 + h$, $t_2 = t_1 + h, \dots$, segue que

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

que é o bom e velho método de Euler. A interpretação geométrica do método é simples.

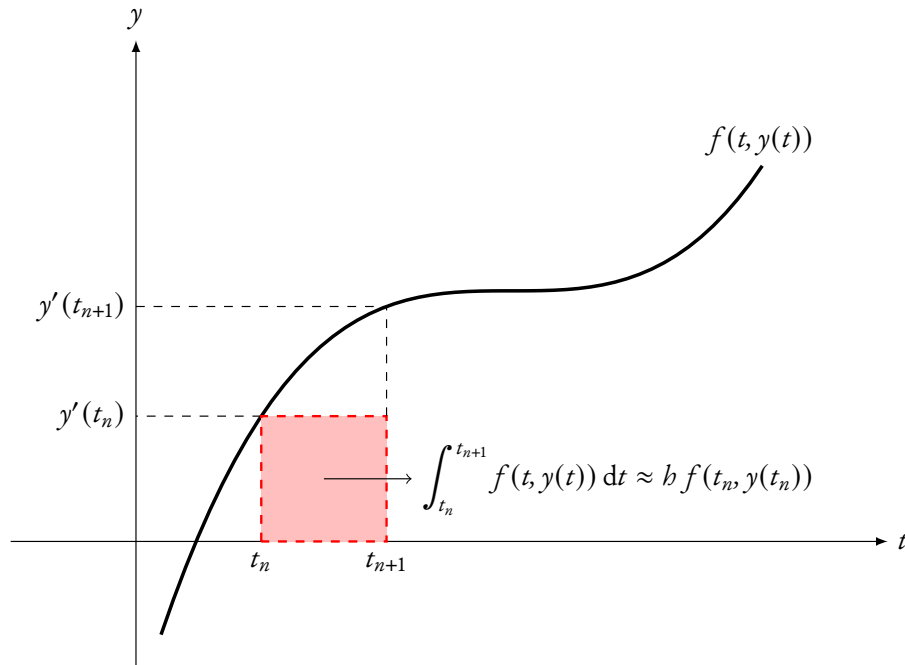


Figura 1.3 Aproximação da integral realizada pelo método de Euler explícito.

Ora, mas e se tivéssemos escolhido aproximar $f(\tau, y(\tau)) \approx f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))$? Neste caso, teríamos

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}), \quad (1.9)$$

que é chamado **método de Euler implícito**. Note que, a cada iteração, precisamos resolver uma equação algébrica (ou um sistema de equações algébricas)!

Definição 1.4. Dizemos que um método é **implícito** quando ele é dado por

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathcal{Y}(f, h, y_1, \dots, y_{n+1}), \quad (1.10)$$

ou seja, se o método define y_{n+1} implicitamente. Se um método é da forma

$$y_{n+1} = \mathcal{Y}(f, h, y_1, \dots, y_n), \quad (\text{I.II})$$

dizemos que ele é **explícito**.

Apesar do custo computacional extra por ser necessário resolver equações algébricas, os métodos implícitos têm propriedades que os tornam muito úteis (e, às vezes, a única opção) em certas situações. Vamos estudar tais propriedades mais à frente.

Note, também, que calcular a ordem de um método implícito não é tão direto quanto para métodos explícitos!

Teorema 1.2. O método de Euler implícito tem ordem 1.

Demonstração. O erro de truncamento local deste método é dado por

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1}^{\ell} &= |y(t_{n+1}) - y(t_n) - hf(t_{n+1}, y(t_{n+1}))| \\ &= |y(t_{n+1}) - y(t_n) - hy'(t_{n+1})| \\ &= |y(t_n) + hy'(t_n) + O(h^2) - y(t_n) - hy'(t_n) - h^2 y''(t_n) - O(h^3)| \\ &= O(h^2). \end{aligned}$$

□

É possível, ainda, mostrar que o método de Euler implícito é convergente.

1.3.2 Regra do trapézio (Método de Crank-Nicolson)

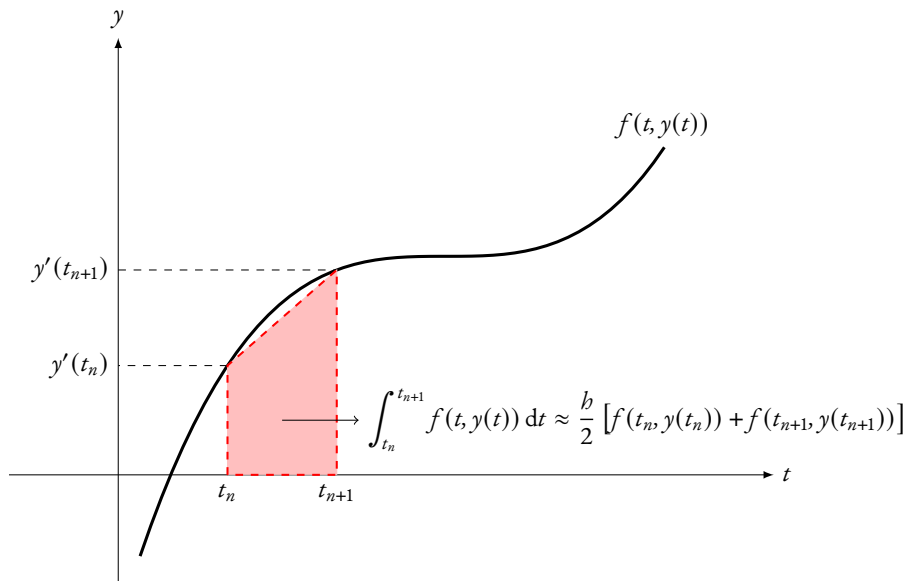


Figura 1.4 Aproximação da integral realizada pelo método do trapézio.

A regra do trapézio consiste em aproximar a integral pela área do trapézio acima, fornecendo o método

$$y_{n+1} = y_n + \frac{b}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})]. \quad (1.12)$$

Este método é implícito, de ordem 2 e convergente.

1.3.3 Métodos θ

Os métodos θ consistem em fazer uma ponderação entre $f(t_n, y_n)$ e $f(t_{n+1}, y_{n+1})$:

$$y_{n+1} = y_n + b [\theta f(t_n, y_n) + (1 - \theta)f(t_{n+1}, y_{n+1})], \quad \theta \in [0, 1]. \quad (1.13)$$

Eles englobam os três métodos que vimos até aqui: Euler explícito ($\theta = 1$), Euler implícito ($\theta = 0$) e trapézio ($\theta = 1/2$). Uma curiosidade acerca deles é a ordem.

Teorema 1.3. O método θ tem ordem 1 se $\theta \neq 1/2$ e 2 caso contrário.

Demonstração. A prova segue a mesma ideia das anteriores. Por definição e usando a série de Taylor de y , temos

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1}^\ell &= |y(t_{n+1}) - y(t_n) - b [\theta f(t_n, y(t_n)) + (1 - \theta)f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))]| \\ &= \left| y(t_n) + by'(t_n) + \frac{b^2}{2!}y''(t_n) + \frac{b^3}{3!}y'''(t_n) + O(b^4) \right. \\ &\quad \left. - y(t_n) - b\theta y'(t_n) - b(1 - \theta) \left[y'(t_n) + by''(t_n) + \frac{b^2}{2!}y'''(t_n) + O(b^3) \right] \right| \\ &= \left| \left(\theta - \frac{1}{2} \right) b^2 y''(t_n) + \left(\frac{\theta}{2} - \frac{1}{3} \right) b^3 y'''(t_n) + O(b^4) \right|. \end{aligned}$$

Portanto, se $\theta = 1/2$ então $\varepsilon_{n+1}^\ell = O(b^3)$ e, do contrário, $\varepsilon_{n+1}^\ell = O(b^2)$. \square

É evidente que o único método explícito se dá quando $\theta = 0$, e é possível mostrar que os métodos θ são todos convergentes.

O interessante nesses métodos é que podemos controlar o erro de truncamento local através da escolha de θ . Por exemplo, se quisermos que o erro não tenha termo em b^3 , basta tomar $\theta = 2/3$. Essa aniquilação cuidadosa de potências específicas de b pode ter relevância física, dependendo do problema trabalhado.

1.3.4 Regra do ponto médio

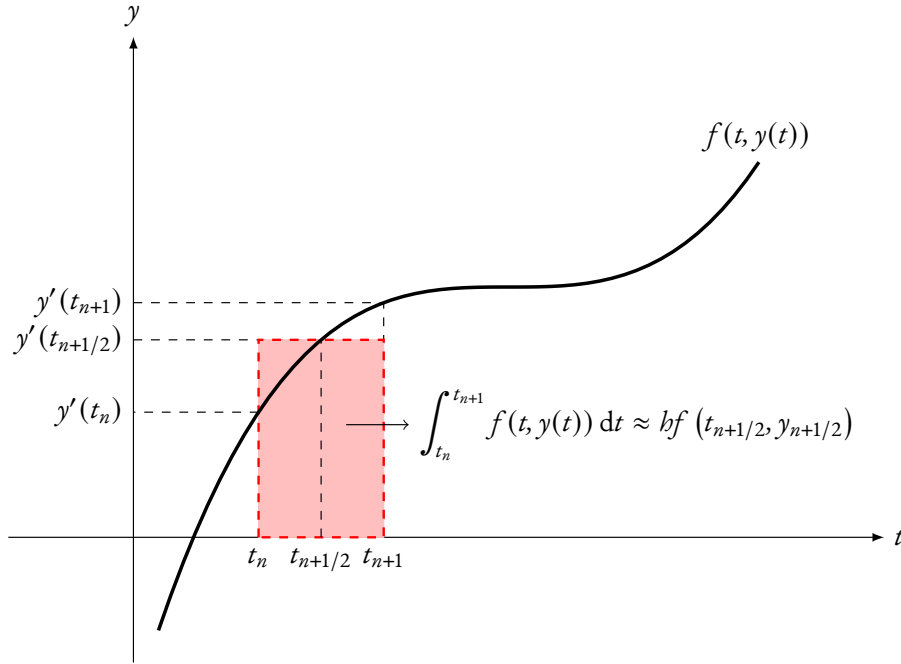


Figura 1.5 Aproximação da integral realizada pelo método do ponto médio.

A regra do ponto médio é dada por

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}), \quad (1.14)$$

sendo

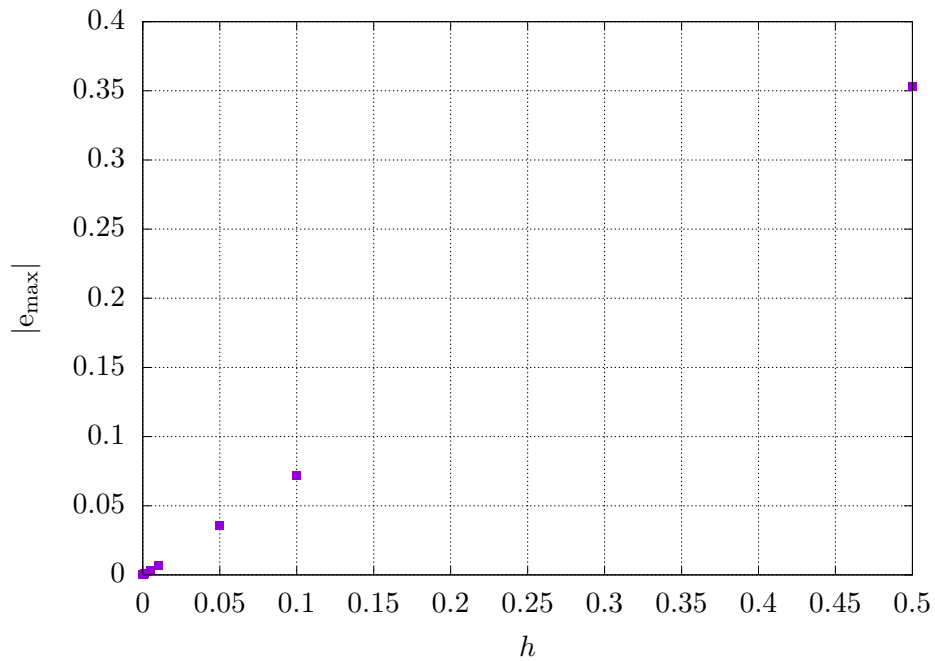
$$t_{n+1/2} = t_n + h/2, \quad y_{n+1/2} = \frac{y_n + y_{n+1}}{2}.$$

Este método é convergente, de ordem 2 e implícito.

Observação 1.2. (i) Cada método possui uma estrutura própria e, portanto, um comportamento único ao lidar com equações particulares. Por isto, buscamos construir novos métodos com ordens já obtidas por outros métodos: diferentes métodos de mesma ordem podem se comportar de maneiras diferentes numa mesma equação;

(ii) para verificar numericamente a ordem de um método, deve-se traçar o diagrama do erro global:

Figura 1.6 Uma diagrama de erro global.



Espera-se que, para valores pequenos de h (mas não pequenos demais!), o erro decaia segundo h^n , sendo n a ordem teórica do método implementado. Diferentes métodos darão origem a curvas de erro com diferentes inclinações.

- (iii) Os métodos θ mostram que podemos construir métodos novos a partir de ideias abstratas matematicamente consistentes, e não necessariamente baseados em aspectos geométricos. Vamos usar vários argumentos similares daqui em diante!

EXERCÍCIOS

MÉTODOS DE EULER, TAYLOR E OUTROS MÉTODOS ELEMENTARES

A. Considere a equação diferencial

$$\frac{df}{dt} = \lambda f, f(0) = 1,$$

que deve ser integrada no intervalo $[0, L]$.

1. Mostre que, se o método de Euler explícito com um passo h for aplicado para encontrar sua solução, a solução aproximada é dada por $f_k = (1 + h\lambda)^k$, em $t = t_k$.
2. Repita o procedimento para o método de Euler implícito e compare os resultados.
3. O que acontece com as duas soluções f_k acima quando $h \rightarrow 0$? Este resultado é compatível com o que você esperaria?
4. Suponha, agora, que $\lambda = 1$. Resolva esta equação no intervalo $[0, 2]$ com $h = 0.1$ e $h = 0.01$ para os dois métodos (Euler explícito e implícito) e compare seu resultado com a solução analítica.
5. Suponha, agora, que $\lambda = -10$ e repita o procedimento acima. O que acontece? Tente explicar o que está acontecendo a partir dos processos iterativos que você encontrou no começo deste exercício e de seus conhecimentos teóricos sobre o método de Euler.

B. Aplique o método do trapézio para a equação diferencial $u' = \left(1 - \frac{4}{3}t\right)u$, com passo h , e mostre que a solução em $t = t_{k+1}$ é dada por

$$u_{k+1} = \frac{1 + \frac{1}{2}h\left(1 - \frac{4}{3}t_k\right)}{1 - \frac{1}{2}h\left(1 - \frac{4}{3}t_{k+1}\right)} u_k.$$

Que tipo de método é este, implícito ou explícito? Por quê? Justifique claramente sua resposta. Posteriormente, trace um gráfico da solução para $h = 0.01$ e $u(0) = 1$.

C. Encontre o método de Taylor de terceira ordem para a equação autônoma $y' = \log y$ e, posteriormente, use-o para integrá-la no intervalo $[1, 5]$. Escolha uma condição inicial adequada. Verifique numericamente a ordem do algoritmo. Compare o resultado obtido pelo método de Euler para um mesmo h .

D. Mostre que o método

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(t_n + \frac{1}{2}h, \frac{y_n}{2} + \frac{y_{n+1}}{2}\right),$$

chamado de *regra do ponto médio*, é consistente. Sabendo que este método é convergente, o que você pode falar sobre sua ordem?

E. Considere o PVI

$$y' = \frac{50}{y} - 50y, \quad y(0) = \sqrt{2}, \quad t \in \left[0, \frac{1}{2}\right].$$

1. Resolva este problema com o método de Euler explícito, com $h = 0.05$ e compare seu resultado com sua solução analítica. Faça $h = 0.001$ e compare seu resultado com sua solução analítica.
2. Resolva este problema com os métodos de Euler implícito e do trapézio, com $h = 0.05$ e compare seu resultado com sua solução analítica.
3. Valide, numericamente, a ordem dos métodos utilizados neste exercício.

F. Considere as equações de Lotka-Volterra

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= 2u - uv \\ \frac{dv}{dt} &= -9v + 3uv \end{aligned}$$

com condições iniciais $u(0) = v(0) = 1.5$. A solução deste sistema de equações diferenciais não-lineares deve ser periódica e, portanto, no diagrama de fase $u \times v$ devemos ver esta solução como uma curva fechada. Um bom método numérico deve ser capaz de recuperar este comportamento da solução.

1. Resolva este sistema pelo método de Euler explícito, com $h = 0.01$, para $0 < t \leq 25$. Trace a solução obtida $u(t) \times t$ e $v(t) \times t$, e trace o diagrama de fase para esta solução. O que você observa? Repita o procedimento acima com $h = 0.001$ e compare os resultados obtidos.
2. Resolva, agora, o sistema com o método de Euler melhorado, com $h = 0.01$ e compare os resultados obtidos.
3. (*) Como você faria para resolver este PVI usando a regra do trapézio?

G. [Convergência do Método de Euler] Considere um PVI

$$y' = f(t, y), \quad y(0) = y_0,$$

com $y = y(t)$ e considere que queiramos integrá-lo com o método de Euler no intervalo $t \in [0, L]$ com passo h . Seja f tal que suas derivadas parciais de primeira ordem sejam contínuas numa região conveniente contida em \mathbb{R}^2 .

1. Mostre que o erro global e_{n+1} do método de Euler pode ser escrito como

$$e_{n+1} = e_n + h \left[f(t_n, y(t_n)) - f(t_n, y_n) \right] + \frac{h^2}{2!} y''(\xi_n),$$

com $\xi_n \in (t_n, t_{n+1})$.

2. Mostre que, pelas propriedades de f , podemos expandir $f(t_n, y(t_n))$ da seguinte maneira:

$$f(t_n, y(t_n)) = f(t_n, y_n) + f_y(t_n, \eta_n) e_n,$$

com $\eta_n \in (y(t_n), y_n)$.

3. Posteriormente, mostre que se existem $M, N \in \mathbb{R}$ tais que

$$\max_{t_n \leq \xi_n \leq t_{n+1}} \frac{y''(\xi_n)}{2!} = N \text{ e } \max_{\eta_n \in (y(t_n), y_n)} f_y(t_n, \eta_n) = M,$$

então

$$|e_{n+1}| \leq |e_n|(1 + hM) + h^2 N,$$

e, portanto, mostre que $|e_n| \rightarrow 0$ com $h \rightarrow 0$.

H. Considere o PVI

$$y' = t^{-2} - t^{-1}y - y^2, \quad y(1) = -1.$$

1. Mostre que a solução analítica do PVI é $y(t) = -t^{-1}$.
2. Resolva o PVI pelo método de Euler com $h = 0.05$ e compare o seu resultado com a solução analítica no intervalo $t \in [1, 5]$.
3. Repita o procedimento para o método do trapézio.
4. Repita o procedimento para o método de Taylor de ordem 2. Compare o seu resultado com o obtido pelo método do trapézio e compare os erros em cada caso. O que você observa?
5. O que acontece se aumentamos intervalo de integração para $[1, 10]$?

I. Considere o PVI dado por

$$y' = \frac{2y - 18t}{1 + t}, \quad y(0) = 4.$$

1. Integre este PVI no intervalo $[0, 2]$ usando o método de Euler com $h = 0.5$ e compare seu resultado com a solução analítica.
2. Trace, para cada um dos quatro pontos y_n obtidos, a solução *teórica* que passaria por este ponto. Para isto, você deve determinar $y(0)$ em cada caso considerando que a solução do PVI deve passar pelo ponto $(2, y_n)$, $n = 1, 2, 3, 4$. Trace estas quatro curvas num mesmo gráfico, juntamente com a solução analítica do PVI e a solução numérica. O que você observa?

3. Repita o procedimento acima para o PVI

$$y' = \frac{-2y - 18t}{1 + t}, \quad y(0) = 4,$$

e compare com a solução analítica. O que você observa?

4. Analise o erro global para cada uma das equações a partir dos resultados da questão **G**. Veja que há uma diferença importante entre os PVIs.
5. Para qual dos dois PVIs você recomendaria o uso do método de Euler? Como generalizar esta afirmação?

J. Resolva os PVIs abaixo usando o método- θ para três valores distintos de $\theta \neq 0, \frac{1}{2}, 1$. Analise seus resultados e compare seus resultados com a integração realizada com o Método de Euler.

$$1. y' = y^2 - \sin(t), \quad y(0) = 0 \quad 2^*. y'' + 9y = \cos t, y(0) = y'(0) = 0.$$

MÉTODOS DE PASSOS MÚLTIPLOS

Até o momento, construímos métodos para integrar o PVI

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

a partir de técnicas “elementares”, i.e., usando intuições geométricas do cálculo.

Em todos os métodos que construímos, os únicos valores utilizados em cada passo eram o valor anterior da função, y_n , e o valor a ser calculado, y_{n+1} . Podemos pensar que todos os valores já calculados em passos anteriores guardam informação relevante sobre a função incógnita $y(t)$ que **podem** nos ajudar a obter melhores estimativas para as integrais que precisamos calcular na formulação integral equivalente! Os **métodos de passos múltiplos** são construídos a partir do **polinômio interpolador** de $f(t, y(t))$ em valores já calculados de $y(t)$. A ideia, com este procedimento, é construir um método com melhores propriedades (como uma ordem maior).

Antes de começarmos, porém, precisamos entender um pouco mais sobre os polinômios interpoladores, objetos fundamentais da **Teoria de Aproximação**.

2.1 Polinômios Interpoladores

Vamos considerar que tenhamos $n + 1$ pontos (t_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n + 1$, e que queiramos encontrar um polinômio

$$\alpha_1 + \alpha_2 t + \dots + \alpha_{n+1} t^n$$

que passe por todos os pontos conhecidos. Para tanto, temos $n + 1$ equações:

$$y_i = \alpha_1 + \alpha_2 t_i + \dots + \alpha_{n+1} t_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, n + 1$$

e devemos resolver o sistema resultante para encontrar os coeficientes α_i . A matriz A que representa este sistema é uma **matriz de Vandermonde**, dada por

$$A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \dots & t_1^n \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \dots & t_2^n \\ 1 & t_3 & t_3^2 & \dots & t_3^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & t_{n+1} & t_{n+1}^2 & \dots & t_{n+1}^n \end{bmatrix}.$$

Daí, se tivermos $n+1$ pontos (t_i, y_i) com $t_i \neq t_j$ se $i \neq j$, então sempre será possível encontrar um **único** polinômio $y(t)$ de grau no máximo n tal que $y(t_i) = y_i$ para $i = 1, 2, \dots, n+1$. Um tal polinômio é dito **polinômio interpolador**. Observe que não se pode afirmar, *a priori*, que o grau do polinômio é n , pois podemos ter $\alpha_j = 0$ para algum j .

Como exemplo, vamos calcular o polinômio interpolador de $y(t) = e^t$ a partir dos pontos

$$\begin{array}{c|ccc} t & 0 & 0.5 & 1 \\ \hline y & 1 & \sqrt{e} & e \end{array}$$

O sistema a ser resolvido, neste caso, é

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0^2 \\ 1 & 0.5 & 0.5^2 \\ 1 & 1 & 1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{e} \\ e \end{bmatrix}.$$

Resolvendo-o, encontramos

$$\alpha_1 = 1, \quad \alpha_2 = 0.876603, \quad \alpha_3 = 0.841679.$$

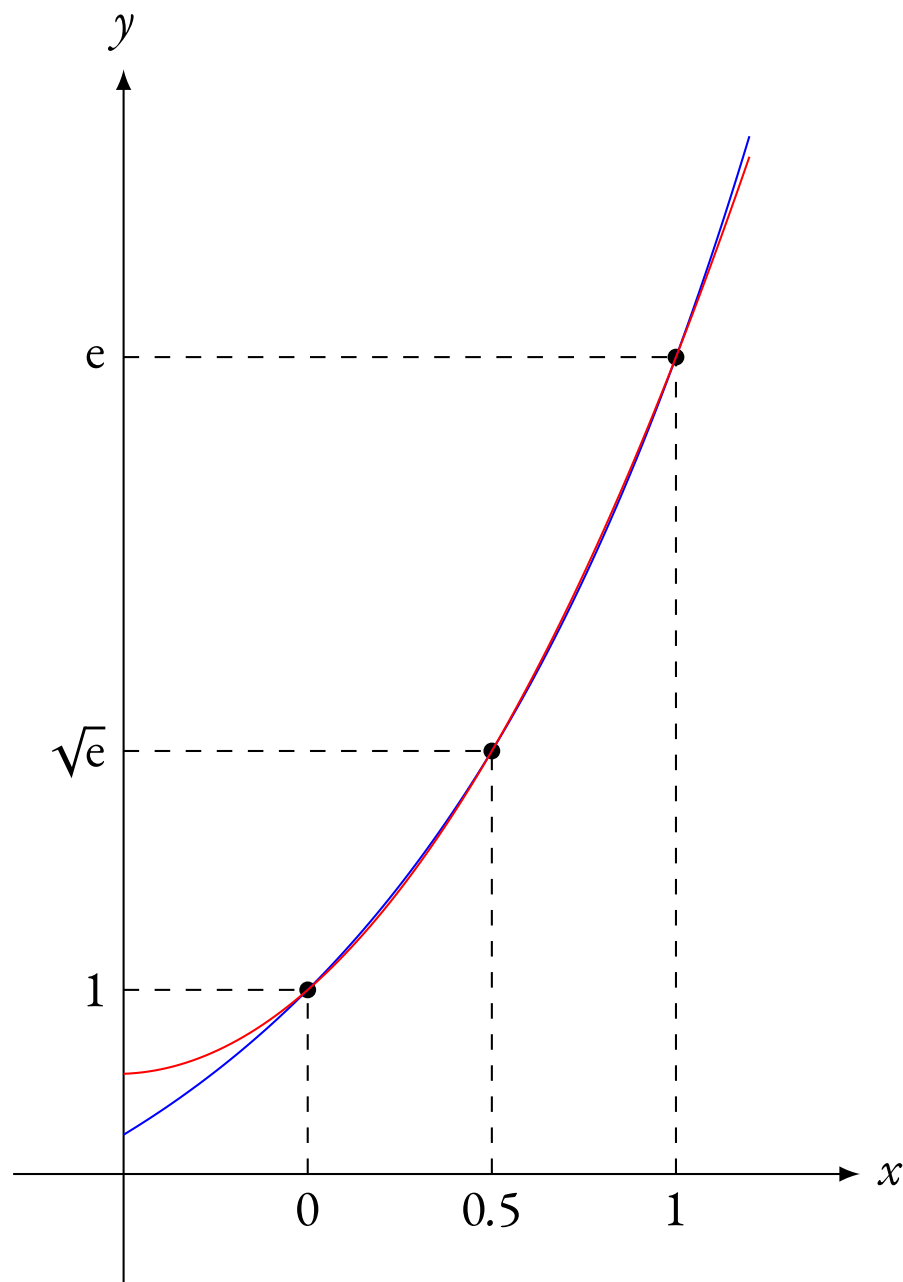


Figura 2.1 Polinômio interpolador de e^t com três pontos em $[0, 1]$

Observe que o polinômio interpolador representa a função bem nas vizinhanças dos pontos utilizados, mas não muito bem quando nos distanciamos deles.

Então, encontrar um polinômio interpolador se resume, *a priori*, a resolver um sistema linear. Não obstante, podemos evitar ter de resolver o sistema! De fato, para encontrar o polinômio interpolador

$$p(t) = \alpha_1 + \alpha_2 t + \cdots + \alpha_{n+1} t^n,$$

resolvemos o sistema

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^n \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^n \\ 1 & t_3 & t_3^2 & \cdots & t_3^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & t_{n+1} & t_{n+1}^2 & \cdots & t_{n+1}^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \\ \vdots \\ \gamma_{n+1} \end{bmatrix}.$$

Reescrevendo $\mathbf{b} = \sum_{j=1}^{n+1} \gamma_j \mathbf{e}_j$, resolver o sistema “completo” é resolver os $n + 1$ sistemas dados por

$$A\mathbf{x}_i = \mathbf{e}_i \iff \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^n \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^n \\ 1 & t_3 & t_3^2 & \cdots & t_3^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & t_{n+1} & t_{n+1}^2 & \cdots & t_{n+1}^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^{(i)} \\ \alpha_2^{(i)} \\ \alpha_3^{(i)} \\ \vdots \\ \alpha_{n+1}^{(i)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

sendo \mathbf{x}_i o vetor com os coeficientes do polinômio interpolador que “interpola” o i -ésimo vetor de base. Sendo assim, o polinômio interpolador do i -ésimo vetor de base é

$$p_i(t) = \alpha_1^{(i)} + \alpha_2^{(i)} t + \cdots + \alpha_{n+1}^{(i)} t^n.$$

Observando que

$$\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{n+1} \gamma_j \mathbf{x}_j,$$

segue que

$$p(t) = \sum_{j=1}^{n+1} \gamma_j p_j(t).$$

Aplicando a regra de Cramer, podemos encontrar cada um dos p_j :

$$p_j(t) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{n+1} \frac{t - t_k}{t_j - t_k} = \mathcal{L}_j(t), \quad j = 1, 2, \dots, n+1,$$

que são os chamados **polinômios de Lagrange**. Estes polinômios são a base da Teoria da Aproximação. De fato, o Teorema da Aproximação de Weierstrass diz que

Teorema 2.1 (da Aproximação de Weierstrass). Dados uma função f contínua em $[a, b]$ e $\varepsilon > 0$, existe um polinômio P tal que $|f(t) - P(t)| < \varepsilon$ para todo $t \in [a, b]$.

Este é um resultado fundamental, e a determinação de P em sua prova envolve os polinômios de Lagrange. Com eles, construímos o **polinômio interpolador de Lagrange**,

$$p(t) = y_1 \mathcal{L}_1(t) + y_2 \mathcal{L}_2(t) + \cdots + y_{n+1} \mathcal{L}_{n+1}(t).$$

Note, em particular, que

$$\mathcal{L}_i(t) = \begin{cases} 1, & t = t_i \\ 0, & t \neq t_i. \end{cases}$$

Portanto, os polinômios de Lagrange são similares aos vetores da base canônica de \mathbb{R}^{n+1} , e fica claro que $p(t_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, n+1$.

Agora, suponha que tenhamos uma função f da qual conhecemos apenas $n+1$ pontos em $[a, b]$. Podemos utilizar o polinômio interpolador de Lagrange para estimar f em valores que não conhecemos. De fato, pode-se mostrar que

$$f(t) = p(t) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(t))}{(n+1)!} (t - t_1)(t - t_2) \cdots (t - t_{n+1}), \quad \xi(t) \in (a, b).$$

Esta fórmula do erro da aproximação de f por p não tem utilidade prática, porque tanto f quando ξ são normalmente desconhecidas, mas fornece estimativas teóricas fundamentais. Uma consequência interessante dela é que se os $n+1$ pontos forem igualmente espaçados, $t_{i+1} = t_i + h$, então pode-se mostrar que

$$f(t) = p(t) + O(h^{n+1}).$$

Retornando ao exemplo da exponencial, temos

$$\mathcal{L}_1(t) = 2t^2 - 3t + 1, \quad \mathcal{L}_2(t) = -4t^2 + 4t, \quad \mathcal{L}_3(t) = 2t^2 - t.$$

Assim, o polinômio interpolador de e^t em $[0, 1]$ é

$$p(t) = 1(2t^2 - 3t + 1) + \sqrt{e}(-4t^2 + 4t) + e(2t^2 - t) = 1 + 0.876603t + 0.841679t^2,$$

como esperado. Pela fórmula, o erro da aproximação é

$$E(t) = \frac{e^{\xi(t)}}{3!} (t - 0)(t - 0.5)(t - 1) = \frac{e^{\xi(t)}}{3!} \left(t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{1}{2}t \right),$$

de modo que

$$\begin{aligned}
 |E(t)| &\leq \max_{t \in [0,1]} \left| \frac{e^{\xi(t)}}{3!} \left(t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{1}{2}t \right) \right| \\
 &\leq \max_{t \in [0,1]} \left| \frac{e^{\xi(t)}}{3!} \right| \max_{t \in [0,1]} \left| t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{1}{2}t \right| \\
 &\leq \frac{e}{6} \left[\left(\frac{3 - \sqrt{3}}{6} \right)^3 - \frac{3}{2} \left(\frac{3 - \sqrt{3}}{6} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{3 - \sqrt{3}}{6} \right) \right] \\
 &\approx 0.0218.
 \end{aligned}$$

Já conhecendo melhor o que são os polinômios interpoladores, vamos passar aos métodos de passos múltiplos. Existem várias famílias de tais métodos; em nosso curso, vamos focar em duas.

2.2 Métodos de Adams

Suponha que, ao tentarmos resolver o PVI, já conheçamos, além da condição inicial, os $n + s - 1$ primeiros valores da solução, ou seja, que conheçamos $y_i, i = 0, 1, \dots, n + s - 1$, com $s \geq 1$. Então, para determinar y_{n+s} , podemos usar a formulação integral equivalente como segue:

$$\begin{aligned}
 \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} y'(\tau) d\tau &= \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} f(\tau, y(\tau)) d\tau \\
 \iff \int_{y_{n+s-1}}^{y_{n+s}} dy &= \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} f(\tau, y(\tau)) d\tau \\
 \iff y_{n+s} &= y_{n+s-1} + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} f(\tau, y(\tau)) d\tau.
 \end{aligned}$$

Agora, para construir um polinômio interpolador para a integral, temos duas escolhas: usar os s pontos $y_i, i = 0, 1, \dots, s - 1$ ou usar os $s + 1$ pontos $y_i, i = 0, 1, \dots, s - 1, s$ para determinar o polinômio. No primeiro caso, os métodos resultantes serão **explícitos** e, no segundo, **implícitos**.

2.2.1 Métodos de Adams-Bashforth

Estes são os métodos obtidos tomando s pontos para escrever o polinômio interpolador

$$p(t) = \sum_{m=0}^{s-1} \mathcal{L}_m(t) f(t_{n+m}, y_{n+m}),$$

sendo

$$\mathcal{L}_m(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^{s-1} \frac{t - t_{n+l}}{t_{n+m} - t_{n+l}}$$

os s polinômios de Lagrange correspondentes. Voltando à integral, obtemos

$$\begin{aligned} y_{n+s} &= y_{n+s-1} + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} f(\tau, y(\tau)) \, d\tau \\ &= y_{n+s-1} + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} p(\tau) \, d\tau \\ &= y_{n+s-1} + \sum_{m=0}^{s-1} \left[f(t_{n+m}, y(t_{n+m})) \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathcal{L}_m(\tau) \, d\tau \right], \end{aligned}$$

ou seja,

$$y_{n+s} = y_{n+s-1} + b \sum_{m=0}^{s-1} b_m f(t_{n+m}, y_{n+m}), \quad (2.I)$$

sendo

$$b_m = \frac{1}{b} \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathcal{L}_m(t) \, dt.$$

Observação 2.1. Note que os b_m 's independem de n e de h , isto é, são constantes em cada método.

Vamos calcular alguns desses métodos.

$s = 1$. Neste caso, temos

$$y_{n+1} = y_n + hb_0 f(t_n, y_n),$$

sendo

$$b_0 = \frac{1}{b} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}_0(t) \, dt,$$

com

$$\mathcal{L}_0(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 0}}^{1-1} \frac{t - t_{n+l}}{t_n - t_{n+l}} = 1.$$

Logo, $b_0 = 1$ e reobtemos o método de Euler explícito.

$s = 2$. Neste caso, temos

$$y_{n+2} = y_{n+1} + b[b_0 f(t_n, y_n) + b_1 f(t_{n+1}, y_{n+1})].$$

Como

$$\mathcal{L}_0(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 0}}^1 \frac{t - t_{n+l}}{t_n - t_{n+l}} = \frac{t - t_{n+1}}{t_n - t_{n+1}}$$

e

$$\mathcal{L}_1(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 1}}^1 \frac{t - t_{n+l}}{t_n - t_{n+l}} = \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n},$$

segue que

$$b_0 = \frac{1}{h} \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} \frac{t - t_{n+1}}{t_n - t_{n+1}} dt = -\frac{1}{h^2} \left[\frac{t^2}{2} - t_{n+1}t \right] \Big|_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} = -\frac{1}{2}$$

e

$$b_1 = \frac{1}{h} \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n} dt = -\frac{1}{h^2} \left[\frac{t^2}{2} - t_n t \right] \Big|_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} = \frac{3}{2}.$$

Logo,

$$y_{n+2} = y_{n+1} + h \left[\frac{3}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{2} f(t_n, y_n) \right].$$

2.2.2 Métodos de Adams-Moulton

Podemos obter um segundo tipo de método de Adams quando usamos $s + 1$ pontos $y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+s}$ para calcular a integral na formulação integral equivalente. Assim, vamos usar o polinômio interpolador

$$p(t) = \sum_{m=0}^s \mathcal{L}_m(t) f(t_{n+m}, y(t_{n+m})),$$

sendo

$$\mathcal{L}_m(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^s \frac{t - t_{n+l}}{t_{n+m} - t_{n+l}}.$$

Portanto, integrando o PVI entre t_{n+s-1} e t_{n+s} , obtemos

$$y_{n+s} = y_{n+s-1} + h \sum_{m=0}^s b_m f(t_{n+m}, y_{n+m}), \quad (2.2)$$

sendo

$$b_m = \frac{1}{h} \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} \mathcal{L}_m(\tau) d\tau,$$

chamado **método de Adams-Moulton** de s passos.

Observe que esta é uma família de métodos implícitos, porque y_{n+s} é dado implicitamente. Para implementar este tipo de método numericamente, precisaremos acoplá-lo a um esquema de Newton-Raphson, por exemplo, para avançar o passo de tempo.

Para ilustrar, vamos calcular um método de Adams-Moulton.

$s = 1$. Neste caso, temos

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{m=0}^1 b_m f(t_{n+m}, y_{n+m}) = y_n + h [b_0 f(t_n, y_n) + b_1 f(t_{n+1}, y_{n+1})],$$

com

$$b_0 = \frac{1}{h} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}_0(\tau) d\tau, \quad b_1 = \frac{1}{h} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}_1(\tau) d\tau$$

$$\mathcal{L}_0(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 0}}^1 \frac{t - t_{n+l}}{t_n - t_{n+l}} = \frac{t - t_{n+1}}{t_n - t_{n+1}}, \quad \mathcal{L}_1(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 1}}^1 \frac{t - t_{n+l}}{t_{n+1} - t_{n+l}} = \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n}.$$

Daí, segue que

$$b_0 = 1/2 = b_1$$

e, portanto, o método de Adams-Moulton de um passo é dado por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})],$$

ou seja, nada mais é do que o método do trapézio!

2.3 Fórmulas de Diferenças Atrasadas

Como vimos, os métodos que compõem a família de Adams são obtidos a partir da aproximação, por polinômios interpoladores, do integrando na formulação integral equivalente do PVI. Uma maneira alternativa de construir métodos de passos múltiplos é usar polinômios interpoladores para aproximar a derivada $y'(t)$ na formulação original do PVI, ao invés da integral na formulação integral equivalente.

Conhecendo-se s pontos $y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+s-1}$, as fórmulas de diferenças atrasadas são construídas a partir de

$$y'(t_{n+s}) = f(t_{n+s}, y(t_{n+s})),$$

em que o polinômio interpolador de y é dado por

$$p(t) = \sum_{m=0}^s \mathcal{L}_m(t) y(t_{n+m}).$$

Derivando ambos os lados, temos

$$y'(t) \approx p'(t) = \sum_{m=0}^s \mathcal{L}'_m(t) y(t_{n+m}).$$

Portanto, as fórmulas de diferenças atrasadas são dadas por

$$\sum_{m=0}^s \mathcal{L}'_m(t_{n+s}) y_{n+m} = f(t_{n+s}, y_{n+s}). \quad (2.3)$$

Assim como foi o caso para os métodos de Adams-Moulton, todas as fórmulas de diferenças atrasadas são implícitas. Vamos calcular alguns exemplos.

$s = 1$. Neste caso, temos

$$\mathcal{L}'_0(t_{n+1})y_n + \mathcal{L}'_1(t_{n+1})y_{n+1} = f(t_{n+1}, y_{n+1}),$$

sendo

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_0(t) &= \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 0}}^1 \frac{t - t_{n+l}}{t_n - t_{n+l}} = \frac{t - t_{n+1}}{t_n - t_{n+1}}, & \mathcal{L}'_0(t_{n+1}) &= -\frac{1}{h} \\ \mathcal{L}_1(t) &= \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq 1}}^1 \frac{t - t_{n+l}}{t_n - t_{n+l}} = \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n}, & \mathcal{L}'_1(t_{n+1}) &= \frac{1}{h}.\end{aligned}$$

Portanto, a fórmula de diferenças atrasadas de um passo é dada por

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

que nada mais é do que o método de Euler implícito!

$s = 2$. Neste caso, temos

$$\mathcal{L}'_0(t_{n+2})y_n + \mathcal{L}'_1(t_{n+2})y_{n+1} + \mathcal{L}'_2(t_{n+2})y_{n+2} = f(t_{n+2}, y_{n+2}),$$

com

$$\mathcal{L}'_0(t_{n+2}) = \frac{1}{2h}, \quad \mathcal{L}'_1(t_{n+2}) = -\frac{2}{h}, \quad \mathcal{L}'_2(t_{n+2}) = \frac{3}{2h}.$$

Portanto, a fórmula de diferenças atrasadas de 2 passos é dada por

$$y_{n+2} = \frac{4}{3}y_{n+1} - \frac{1}{3}y_n + \frac{2}{3}hf(t_{n+2}, y_{n+2}).$$

2.4 Caso geral: ordem e convergência de métodos de passos múltiplos

Agora, consideremos o caso mais geral de um método de passos múltiplos:

$$\sum_{m=0}^s a_m y_{n+m} = h \sum_{m=0}^s b_m f(t_{n+m}, y_{n+m}),$$

com $a_m, b_m \in \mathbb{R}$, $m = 0, 1, \dots, s$. Em geral, é comum tomar a normalização $a_s = 1$. Observe que o método será explícito só se $b_s = 0$.

Antes de tratar sobre a ordem e convergência dos métodos de passos múltiplos, precisamos falar sobre um problema “prático” desse tipo de método: sua inicialização. Por exemplo, para começar o

processo iterativo do método de Adams-Bashfort de 2 passos precisamos de y_0 (conhecido!) e de y_1 , que é desconhecido! De maneira geral, nos s primeiros passos não temos informação sobre os valores anteriores de y_n ($1 \leq n \leq s-1$) que precisamos para fazer o método funcionar.

É necessário, portanto, usar outro método para construir os valores iniciais y_1, y_2, \dots, y_{s-1} necessários para dar início ao processo iterativo do método de passos múltiplos. O ideal é que este método tenha a mesma ordem que o método de passos múltiplos a ser utilizado, mas isto não é estritamente necessário.

Agora, queremos entender qual é a ordem dos métodos de passos múltiplos. Para tanto, observamos que o erro de truncamento local do método mais geral é dado por

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{n+s}^\ell &= \sum_{m=0}^s a_m y(t_{n+m}) - h \sum_{m=0}^s b_m f(t_{n+m}, y(t_{n+m})) \\
 &= \sum_{m=0}^s a_m y(t_{n+m}) - h \sum_{m=0}^s b_m y'(t_{n+m}) \\
 &= \sum_{m=0}^s a_m y(t_n + mh) - h \sum_{m=0}^s b_m y'(t_n + mh) \\
 &= \sum_{m=0}^s a_m \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} y^{(k)}(t_n) (mh)^k \right) - h \sum_{m=0}^s b_m \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} y^{(k+1)}(t_n) (mh)^k \right) \\
 &= \sum_{m=0}^s a_m y(t_n) + \sum_{m=0}^s a_m \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} y^{(k)}(t_n) (mh)^k \right) - h \sum_{m=0}^s b_m \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{k!} y^{(k)}(t_n) (mh)^{k-1} \right) \\
 &= y(t_n) \sum_{m=0}^s a_m + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} y^{(k)}(t_n) h^k \left(\sum_{m=0}^s a_m m^k - k \sum_{m=0}^s b_m m^{k-1} \right).
 \end{aligned}$$

Então, para que o erro de truncamento local seja $O(h^{p+1})$, devemos ter

$$\begin{aligned}
 \sum_{m=0}^s a_m &= 0 \\
 \sum_{m=0}^s a_m m^k - k \sum_{m=0}^s b_m m^{k-1} &\begin{cases} = 0, & k = 1, 2, \dots, p \\ \neq 0, & k = p. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Estas são chamadas **condições de ordem**, que devem ser satisfeitas para que o método tenha ordem p (observe que a primeira condição é necessária, mas não suficiente, para garantir a consistência).

Por exemplo, no método de Adams-Bashforth de 2 passos, temos

$$a_1 = -1, \quad a_2 = 1, \quad b_0 = -1/2, \quad b_1 = 3/2.$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\sum_{m=0}^2 a_m &= 0, \\ \sum_{m=0}^2 a_m m - \sum_{m=0}^2 b_m m^{1-1} &= 0, \\ \sum_{m=0}^2 a_m m^2 - 2 \sum_{m=0}^2 b_m m^1 &= 0, \\ \sum_{m=0}^2 a_m m^3 - 3 \sum_{m=0}^2 b_m m^2 &= 5/2 \neq 0.\end{aligned}$$

Logo, AB₂ é um método de ordem 2.

Além de servir para determinar a ordem de um método de passos múltiplos, estas relações de ordem nos dão uma ferramenta para construir métodos! De fato, podemos escrever um sistema linear para determinar a_m e b_m ao especificar a ordem do método!

Por exemplo, suponha que queiramos um método de 2 passos com ordem (pelo menos) 4. Ora, então escolhendo $a_2 = 1$, devemos ter

$$\begin{aligned}\sum_{m=0}^2 a_m &= 0 \iff a_0 + a_1 = -1 \\ \sum_{m=0}^2 a_m m - \sum_{m=0}^2 b_m &= 0 \iff a_1 - b_0 - b_1 - b_2 = -2 \\ \sum_{m=0}^2 a_m m^2 - 2 \sum_{m=0}^2 b_m m^1 &= 0 \iff a_1 - 2b_1 - 4b_2 = -4 \\ \sum_{m=0}^2 a_m m^3 - 3 \sum_{m=0}^2 b_m m^2 &= 0 \iff a_1 - 3b_1 - 12b_2 = -8 \\ \sum_{m=0}^2 a_m m^4 - 4 \sum_{m=0}^2 b_m m^3 &= 0 \iff a_1 - 4b_1 - 32b_2 = -16,\end{aligned}$$

ou seja, o sistema

$$\begin{cases} a_0 + a_1 = -1 \\ a_1 - b_0 - b_1 - b_2 = -2 \\ a_1 - 2b_1 - 4b_2 = -4 \\ a_1 - 3b_1 - 12b_2 = -8 \\ a_1 - 4b_1 - 32b_2 = -16 \end{cases}$$

deve ser satisfeito. Resolvendo-o, obtemos

$$a_0 = -1, a_1 = 0, b_0 = 1/3, b_1 = 4/3, b_2 = 1/3,$$

e o método procurado é dado por

$$y_{n+2} = y_n + h \left[\frac{1}{3} f(t_n, y_n) + \frac{4}{3} f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{1}{3} f(t_{n+2}, y_{n+2}) \right] \quad (2.4)$$

chamado **corretor de Milne**. Por construção, este método é implícito e de ordem (pelo menos) 4.

Observação 2.2. Precisamos fazer alguns comentários acerca desse processo de construção de métodos de passos múltiplos:

1. observe que o corretor de Milne não é nem um método de Adams (porque não usa y_{n+1}) e nem uma diferença atrasada (porque avalia f em vários pontos);
2. é possível obter diferentes métodos de s passos para uma mesma ordem ao fazer escolhas para os coeficientes (como $a_2 = 1$, no nosso caso);
3. note que o método construído é puramente abstrato: não temos nenhuma ideia do que ele representa geometricamente;
4. apesar de termos liberdade na construção destes métodos, não sabemos nada sobre sua convergência. É possível que alguns deles sejam divergentes (e muitos serão, como veremos). Ordem não é tudo!

Resta-nos, portanto, falar da convergência de um método de passos múltiplos. Para tal, vamos entender um pouco mais sobre a ordem de métodos de passos múltiplos considerando a EDO linear de primeira ordem¹ dada por

$$y' = \lambda y.$$

Resolvendo-a usando um método geral de passos múltiplos, teremos

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^s a_m y_{n+m} &= h \sum_{m=0}^s b_m \lambda y_{n+m} \\ \iff y_{n+s} + \sum_{m=0}^{s-1} a_m y_{n+m} &= h\lambda \left[b_s y_{n+s} + \sum_{m=0}^{s-1} b_m y_{n+m} \right] \\ \iff [1 - wb_s] y_{n+s} &= \sum_{m=0}^{s-1} [wb_m - a_m] y_{n+m}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

sendo $w = \lambda h$. A equação (2.5) é uma **equação de diferenças** em y . No processo iterativo linear $x_{n+1} = ax_n$, vimos uma equação similar: naquele caso, $x_n = a^n x_0$. Ora, então supondo que a solução

¹Esta equação é “modelo” para vários estudos de métodos, pois toda EDO $y' = f(t, y)$ pode ser aproximada por esta EDO linear, desde que f seja suficientemente bem comportada, i.e., tenha série de Taylor.

da equação (2.5) seja $y_{n+m} = r^{n+m}$, com $r \in \mathbb{R}$, obtemos

$$\begin{aligned} [1 - wb_s]r^{n+s} &= \sum_{m=0}^{s-1} [wb_m - a_m]r^{n+m} \\ \iff [a_0 + a_1r + \dots + a_{s-1}r^{s-1} + r^s] - w[b_0 + b_1r + \dots + b_{s-1}r^{s-1} + b_sr^s] &= 0, \end{aligned}$$

que é um polinômio definido pelas constantes do método, de modo que podemos utilizá-lo para caracterizar o método! De fato, definimos

$$C_w(r) = \sum_{m=0}^s a_m r^m - w \sum_{m=0}^s b_m r^m = \rho(r) - w\sigma(r), \quad (2.6)$$

chamado **polinômio característico** do método.

Observe que a discretização do método se faz presente na constante w : temos $C_0(r) = \rho(r)$ e, fazendo $b \rightarrow 0$, claramente $w \rightarrow 0$ e $C_w(r) \rightarrow \rho(r)$. Neste limite, podemos dizer que as raízes de $C_w(r)$ se aproximarão das raízes de $\rho(r)$. Além disso, note que $\rho(1) = 0$, já que

$$\rho(1) = \sum_{m=0}^s a_m = 0$$

é a primeira das relações de ordem! Isso significa que, se tomarmos $w > 0$ pequeno (que é o caso em aplicações reais), faz sentido perguntar: o quão longe $r = e^w$ está de 1, ou seja, o quão longe de 0 está

$$C_w(e^w) = \rho(e^w) - w\sigma(e^w)?$$

Para responder a essa pergunta, vamos substituir as expressões de ρ e σ e expandir a exponencial em sua série de Taylor:

$$\begin{aligned} C_w(e^w) &= \rho(e^w) - w\sigma(e^w) = \sum_{m=0}^s a_m e^{wm} - w \sum_{m=0}^s b_m e^{wm} \\ &= \sum_{m=0}^s a_m \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(wm)^k}{k!} \right] - w \sum_{m=0}^s b_m \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(wm)^k}{k!} \right] \\ &= \sum_{m=0}^s a_m \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(wm)^k}{k!} \right] - \sum_{m=0}^s b_m \left[\sum_{k=1}^{\infty} k \frac{w^k m^{k-1}}{k!} \right] \\ &= \sum_{m=0}^s a_m + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{w^k}{k!} \left[\sum_{m=0}^s a_m m^k - k \sum_{m=0}^s b_m m^{k-1} \right] \\ &= \sum_{k=p+1}^{\infty} \frac{w^k}{k!} \underbrace{\left[\sum_{m=0}^s a_m m^k - k \sum_{m=0}^s b_m m^{k-1} \right]}_{\neq 0, k=p+1} \\ &= O(w^{p+1}), \end{aligned}$$

onde utilizamos as relações de ordem nos dois últimos passos. Portanto, isto mostra que podemos estudar a ordem de métodos de passos múltiplos a partir dos polinômios ρ e σ ! De fato, escrevendo $w = \ln r$, podemos escrever

$$\rho(r) - \ln r \sigma(r) = \text{cte} \cdot |r - 1|^{p+1} + O(|r - 1|^{p+2}),$$

sendo p a ordem do método ou, ainda,

$$\rho(1 + \xi) - \ln(1 + \xi)\sigma(1 + \xi) = \text{cte} \cdot |\xi|^{p+1} + O(|\xi|^{p+2}),$$

que é uma forma um pouco mais conveniente, pois será necessário expandir \ln em série de Taylor.

Por exemplo, para o método de Adams-Bashforth de 2 passos, temos

$$\rho(r) = -r + r^2 = -(1 + \xi) + (1 + \xi)^2, \quad \sigma(r) = -1/2 + 3r/2 = -1/2 + 3(1 + \xi)/2,$$

de modo que

$$\begin{aligned} \rho(1 + \xi) - \ln(1 + \xi)\sigma(1 + \xi) &= \xi + \xi^2 - \ln(1 + \xi)(1 + 3\xi/2) \\ &= \xi + \xi^2 - \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \xi^k}{k} \right] (1 + 3\xi/2) \\ &= \xi + \xi^2 - \left(\xi - \xi^2/2 + \xi^3/3 + O(\xi^4) \right) (1 + 3\xi/2) \\ &= \xi + \xi^2 - \xi - 3\xi^2/2 + \xi^2/2 + 5\xi^3/12 + O(\xi^4) \\ &= 5\xi^3/12 + O(\xi^4) \end{aligned}$$

e, como esperado, o método de Adams-Bashforth de 2 passos tem ordem 2.

A convergência de métodos de passos múltiplos é um tema mais complicado e que requer técnicas de Análise Numérica mais sofisticadas. Para enunciar o principal resultado sobre convergência, precisamos da seguinte definição.

Definição 2.1 (Condição da raiz). Dizemos que um polinômio $p(t)$ satisfaz a **condição da raiz** se todos os seus zeros se encontram dentro do disco complexo unitário e se o único zero de módulo unitário é o 1 (com multiplicidade 1).

Teorema 2.2 (Teorema da Equivalência de Dahlquist). Suponha que o erro dos $s - 1$ valores iniciais y_1, y_2, \dots, y_{s-1} tenda a zero com $h \rightarrow 0$. Um método de passos múltiplos é convergente se, e somente se, ele for de ordem $p \geq 1$ (i.e., consistente) e o seu polinômio $\rho(r)$ satisfizer a condição da raiz.

Portanto, para determinarmos se um método de passos múltiplos converge, precisamos verificar se ele tem ordem $p \geq 1$ e se o seu polinômio $\rho(r)$ satisfaz a condição da raiz. Observe que esta última condição diz respeito ao comportamento das soluções do processo iterativo

$$y_{n+s} + a_{s-1}y_{n+s-1} + \dots + a_1y_{n+1} + a_0y_n = 0,$$

que são do tipo $y_n = r^n$. As s raízes r_i descreverão a solução do processo iterativo, i.e.,

$$y_n = c_1 r_1^n + c_2 r_2^n + \cdots + c_s r_s^n, \quad n \geq s.$$

Tomando $r_k = \rho_k e^{i\theta_k}$, segue que

$$y_n = c_1 \rho_1^n e^{in\theta_1} + c_2 \rho_2^n e^{in\theta_2} + \cdots + c_s \rho_s^n e^{in\theta_s}.$$

Daí, se a k -ésima raiz for simples de módulo 1, i.e., se $\rho_k = 1$ e $\theta_k = 0$, então $y_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c_k \in \mathbb{R}$, ou seja, a solução da EDO $y' = 0$ não diverge (o que aconteceria se tivéssemos algum $\rho_i > 1$ ou $\theta_i = \pi$) e será real (o que não aconteceria se houvesse uma raiz de módulo 1 imaginária).

Corolário 2.1. Todos os métodos da família de Adams são convergentes.

Demonstração. Os métodos da família de Adams são tais que

$$\rho(r) = -r^{s-1} + r^s = r^{s-1}(r - 1),$$

que satisfaz à condição da raiz. Como já vimos que essa família de métodos é consistente, segue o corolário. \square

Corolário 2.2. As fórmulas de diferenças atrasadas são convergentes se, e somente se, $1 \leq s \leq 6$.

Teorema 2.3 (Primeira Barreira de Dahlquist). A ordem máxima de um método implícito convergente de s passos é $2 \lfloor (s+2)/2 \rfloor$, e, para um método explícito convergente de s passos, apenas s .

Este teorema fornece um guia importante para construir métodos de passo múltiplos usando as relações de ordem! Não podemos, dado um número de passos, construir métodos convergentes de ordem arbitrária.

2.5 Métodos Preditores-Corretores

Já sabemos que precisamos resolver, a cada passo de tempo, um sistema de equação não-lineares quando implementamos um método implícito. Isto pode custar muito caro mas, às vezes, é necessário. Uma maneira de evitar a resolução do sistema não-linear é acoplar, ao método implícito, um passo prévio de um método explícito que forneça uma primeira aproximação para y_{n+s} a ser corrigida pelo método implícito.

Este método de **predição-correção** é bastante usado em algoritmos de passos múltiplos, mas pode ser construído para qualquer tipo de método. Por exemplo, considere um método de Adams-Bashforth de s passos:

$$\tilde{y}_{n+s} = y_{n+s-1} + h \sum_{m=0}^{s-1} b_m^B f(t_{n+m}, y_{n+m}).$$

Com este método explícito, construímos uma primeira aproximação \tilde{y}_{n+s} para y_{n+s} . Em seguida, consideramos um método de Adams-Moulton de s passos:

$$y_{n+s} = y_{n+s-1} + h \sum_{m=0}^{s-1} b_m^M f(t_{n+m}, y_{n+m}) + hb_s^M f(t_{n+s}, \tilde{y}_{n+s}).$$

Assim, podemos avançar o método de Adams-Moulton explicitamente com base na aproximação prévia \tilde{y}_{n+s} dada pelo método de Adams-Bashforth. Isso evita resolver um sistema não-linear e, ao mesmo tempo, usufrui “um pouco” das propriedades dos métodos implícitos.

A maneira que construímos o esquema preditor-corretor acima foi escolher um par de métodos de mesma quantidade de passos s . Neste caso, é possível que a ordem do método preditor-corretor resultante seja **menor** que a ordem do método implícito (que pode ser bem maior que s). É possível mostrar que se o método explícito tiver ordem uma unidade menor que a ordem do método implícito, então mantém-se a ordem do método implícito. Uma alternativa é usar um par de métodos de mesma ordem, o que normalmente implica que o método explícito (preditor) terá mais passos que o método implícito (corretor).

Por exemplo, tomando os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de um passo (ou seja, Euler explícito e trapézio), obtemos o método preditor-corretor

$$\begin{cases} \tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})], \end{cases}$$

ou, equivalentemente,

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_n + hf(t_n, y_n))],$$

que nada mais é do que o **Método de Euler Melhorado**, que tem ordem 2.

Construímos este exemplo com métodos de passos simples. O (grande) problema de inicializar o método para passos múltiplos permanece para os preditores-corretores. É comum utilizar a estimativa do preditor como chute inicial para um processo iterativo de ponto fixo para o corretor. Em geral, 3 ou 4 iterações são suficientes para se convergir com precisão de máquina. Esta abordagem, entretanto, depende de termos um chute inicial muito bom, o que nem sempre acontece.

EXERCÍCIOS

MÉTODOS DE PASSOS MÚLTIPLOS

A. Construa os métodos abaixo. Determine sua ordem e se são convergentes ou não.

1. Adams-Bashforth de três passos.
2. Adams-Moulton de três passos.
3. Fórmula de diferenças atrasadas, $s = 3$.
4. O método explícito para o qual $s = 2$ e $\rho(\omega) = \omega^2 - \omega$.

B. Determine, pelo Teorema de Equivalência de Dahlquist, se o método

$$y_{n+3} = -\frac{27}{11}y_{n+2} + \frac{27}{11}y_{n+1} + y_n + h \left[\frac{3}{11}f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \frac{27}{11}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{27}{11}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{3}{11}f(t_n, y_n) \right]$$

é convergente. Além disto, usando os polinômios $\rho(\omega)$ e $\sigma(\omega)$, determine sua ordem. Este método satisfaz a primeira barreira de Dahlquist?

C. Considere o método de passos múltiplos abaixo:

$$y_{n+2} - 3y_{n+1} + 2y_n = h \left[\frac{13}{12}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{5}{3}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{5}{12}f(t_n, y_n) \right].$$

1. Caracterize este método, isto é, se ele é implícito ou explícito, se é um método de Adams ou se é um método de diferenças atrasadas. Pelas relações de ordem, diga de que ordem é este método.
2. Determine os polinômios $\rho(r)$ e $\sigma(r)$ deste método e verifique a ordem encontrada acima.
3. Suponha que queiramos aplicar este método para integrar o PVI $y' = 0$, $y(0) = 1$. Mostre que a equação de diferenças que representa este método é dada por $y_{n+2} - 3y_{n+1} + 2y_n = 0$. Proponha uma solução do tipo $y_n = r^n$, $r \in \mathbb{R}$ e mostre que a solução obtida pelo método é dada por $y_n = 1 + 2^n(1 - \beta)$, com β uma constante. Qual deveria ser o valor de β para que esta solução fosse idêntica à solução analítica do PVI?
4. Suponha que queiramos integrar o PVI anterior no intervalo $[0, T]$, com T finito e com um h dado. Para isto, serão necessários N passos, isto é, $Nh = T$. Suponha que um outro método gere y_1 tal que $e_1 \neq 0$ (erro de arredondamento, por exemplo). Mostre, para este caso, o que acontece quando $h \rightarrow 0$ e compare com a solução analítica deste PVI. (Tente implementar este problema no computador!)
5. Aplique o teste da raiz para o método acima e explique o resultado do item anterior.

D. A partir do procedimento geral (relações de ordem), construa um método de 4 passos de ordem 3 implícito e determine se ele é convergente. Identifique os polinômios $\rho(r)$ e $\sigma(r)$ e verifique a condição da raiz. Comente sobre a primeira barreira de Dahlquist.

E. Vamos pensar numa outra maneira de construir um método de passos múltiplos a partir de seu polinômio característico.

1. Considere que queiramos construir um método explícito de s passos. Escolha um polinômio $\rho(w)$ que obedeça à condição da raiz e tal que $\rho(1) = 0$.

2. Use a relação

$$\sigma(w) = \frac{\rho(w)}{\ln(w)} + O(|w - 1|^p),$$

e, expandindo a fração em série de Taylor ao redor de $w = 1$, retenha os termos até grau $s - 1$, isto é, $p = s$, e determine o $\sigma(w)$ que caracteriza o seu método.

3. Apresente o seu método e caracterize-o, isto é, determine sua ordem e convergência.

F. Considere o método de passos múltiplos definido por

$$\sigma(w) = \beta w^s, \quad \rho(w) = \beta \sum_{m=1}^s \frac{1}{m} w^{s-m} (w-1)^m, \quad \beta = \left(\sum_{m=1}^s \frac{1}{m} \right)^{-1}.$$

Determine que métodos são estes e apresente sua fórmula para $s = 3$. Você consegue falar alguma coisa sobre sua ordem e convergência?

G. Considere o PVI $y' = t \exp(3t) - 2y$, $y(0) = 0$. Queremos integrá-lo no intervalo $[0, 1]$ usando o método de Adams-Bashforth de 3 passos (AB₃).

1. Construa o método de Taylor para esta equação que tenha a mesma ordem do método AB₃. Utilize-o para obter os valores necessários para iniciar o método AB₃. Use $h = 0.01$.
2. De posse destes valores, use o método AB₃ e integre o PVI no intervalo desejado com $h = 0.01$.
3. Use, agora, um método de Euler explícito para gerar os valores necessários para iniciar o método e repita o procedimento dos item anterior. Compare seus resultados. O que você observa?
4. Estude numericamente a ordem do método AB₃. Faça o estudo para a inicialização com o Método de Taylor e com o Método de Euler e explique seus resultados.

H. Considere o PVI dado por $y' = (y^2 + y)t^{-1}$, $y(1) = -2$, $t \in [1, 3]$.

1. Resolva este PVI usando o Método de Adams-Bashforth de 2 passos (AB₂). Use um método adequado para construir os valores necessários para inicializar os métodos e considere $h = 0.01$.

2. Use o método de Adams-Moulton de 1 passo (AM_1) para resolver este PVI com $h = 0.01$. Escolha adequadamente como inicializar este método. Compare seu resultado com o do item anterior.
3. Construa o método preditor-corretor AB_2-AM_1 , baseado nos métodos acima. Determine sua ordem e, posteriormente, aplique-o para resolver o PVI com $h = 0.01$. Compare seu resultado.
4. Construa, agora, o método preditor-corretor AB_2-AM_1 com um processo de iteração de ponto fixo no passo corretor. Compare seu resultado com os obtidos nos itens anteriores.

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

3.1 Introdução

A nossa busca por métodos de alta ordem nos levou dos métodos elementares, que tinham ordem no máximo 2, para os métodos de passos múltiplos com s passos, que podem ter ordem até s ou até $2\lfloor (s+2)/2 \rfloor$ caso sejam explícitos ou implícitos, respectivamente. Como vimos, entretanto, esta última classe de métodos tem como grande problema a inicialização: sempre será necessário usar outro método para determinar os $s - 1$ primeiros passos desconhecidos.

Nossos esforços, agora, se voltarão para encontrar métodos de passos simples com ordem alta. Até agora, a única maneira que conseguimos tal feito foi com os métodos de Taylor. Já sabemos que um dos principais problemas desta família de métodos é que precisamos fazer muitas contas (tanto na mão quanto no computador), o que é complicado e prejudica o resultado final. A pergunta que fazemos, então, é: será que é possível representar os termos do método de Taylor com uma única avaliação de f , i.e., será que é possível escrever

$$hf_n + \frac{h^2}{2} [f_t(t_n, y_n) + f_y(t_n, y_n)f(t_n, y_n)] = a_1 f(t_n + \alpha_1; y_n + \beta_1)$$

para alguma combinação de constantes $a_1, \alpha_1, \beta_1 \in \mathbb{R}$? Ora, se expandirmos o lado direito em série de Taylor em torno de (t_n, y_n) , temos

$$hf_n + \frac{h^2}{2} [f_t(t_n, y_n) + f_y(t_n, y_n)f(t_n, y_n)] = a_1 \left[f(t_n, y_n) + \alpha_1 \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_n + \beta_1 \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_n + \cdots \right].$$

Comparando termo a termo, para que a ideia funcione devemos ter

$$\alpha_1 = h/2, \beta_1 = hf_n/2, a_1 = h$$

e, daí, obtemos o método

$$y_{n+1} = y_n + hf \left(t_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{h}{2} f(t_n, y_n) \right), \quad (3.1)$$

chamado **método do ponto médio explícito**. De fato, podemos escrever este método na forma

$$\begin{cases} \xi_1 = y_n \\ \xi_2 = y_n + \frac{h}{2}f(t_n, \xi_1) \\ y_{n+1} = y_n + hf(t_n + h/2; \xi_2). \end{cases}$$

É imediato que este método tem ordem, haja vista que ele foi construído a partir de um método de Taylor de segunda ordem. Note, ainda, que esta não é a única maneira de construir um método a partir do método de Taylor. Podemos pensar em

$$\begin{cases} \xi_1 = y_n \\ \xi_2 = y_n + \beta_1 f(t_n, \xi_1) \\ y_{n+1} = y_n + a_1 f(t_n, \xi_1) + a_2 f(t_n + \alpha_1, \xi_2), \end{cases}$$

isto é,

$$y_{n+1} = y_n + a_1 f(t_n, y_n) + a_2 f(t_n + \alpha_1, y_n + \beta_1 f(t_n, y_n)).$$

Expandindo a terceira parcela em série de Taylor, temos

$$a_2 f(t_n + \alpha_1, y_n + \beta_1 f(t_n, y_n)) = a_2 f(t_n, y_n) + a_2 \alpha_1 f_t(t_n, y_n) + a_2 \beta_1 f(t_n, y_n) f_y(t_n, y_n) + \dots$$

comparando termo a termo novamente, geramos o sistema subdeterminado

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = h \\ a_2 \alpha_1 = h^2/2 \\ a_2 \beta_1 = h^2/2. \end{cases}$$

Seria necessário fazer uma escolha para um dos coeficientes para poder encontrar um tal método. Alguns exemplos são:

i) escolhendo $a_1 = h/2$, segue que $a_2 = h/2$, $\alpha_1 = h = \beta_1$ e temos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_n + h, y_n + h f(t_n, y_n))],$$

nosso Euler melhorado!

ii) escolhendo $a_1 = 0$, segue que $a_2 = h$, $\alpha_1 = h/2 = \beta_1$ e temos

$$y_{n+1} = y_n + h f(t_n + h/2, y_n + h/2 f(t_n, y_n)),$$

nosso método do ponto médio explícito!

Todos estes métodos, por construção, são de ordem 2. Os métodos desta família, obtidos por comparação com os métodos de Taylor, são chamados **métodos de Runge-Kutta**.

Podemos realizar este procedimento para qualquer ordem, mas as contas podem ficar muito complicadas! A forma geral destes métodos é

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(t_{j,n}; \xi_j),$$

com $t_n \leq t_{n,j} \leq t_{n+1}$ e ξ_j sendo aproximações da solução em $t_{j,n}$.

Como é razoável de se esperar, a grande dificuldade em determinar os métodos de Runge-Kutta desta forma está em resolver o sistema não-linear que surge ao comparar os coeficientes com o método de Taylor, além do fato de que determinar os métodos de Taylor em si é uma tarefa que demanda um certo esforço. Vamos precisar entender melhor o que a equação (3.1) representa e como podemos construí-la de maneira mais fácil. Ademais, queremos também maximizar a ordem do método tomando o menor ν que pudermos.

Para atingir estes objetivos, vamos usar a forma integral equivalente para associar o somatório à integral

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tau, y(\tau)) d\tau.$$

Nos métodos de Adams, aproximávamos o integrando por um polinômio interpolador construído a partir de valores conhecidos de $y(t)$. Agora, vamos construir uma aproximação para a integral usando valores intermediários, no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$, que são desconhecidos, usando métodos de **quadratura**!

3.2 Métodos de Quadratura

Suponha que queiramos calcular numericamente a integral

$$\int_a^b f(t) dt,$$

com f uma função qualquer ou, ainda, que queiramos calcular numericamente

$$\int_a^b f(t)\omega(t) dt,$$

para uma função peso ω tal que

$$0 < \int_a^b \omega(t) dt < \infty, \quad \left| \int_a^b t^j \omega(t) dt \right| < \infty, \quad j = 1, 2, 3, \dots$$

O procedimento de **quadratura** consiste em aproximar a integral por uma soma finita, ou seja,

$$\int_a^b f(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j),$$

em que os b_j são chamados **pesos da quadratura** e os c_j são os **nós da quadratura**. Tanto os pesos quanto os nós da quadratura independem de f : ele são funções de a , b e ω .

Esta quadratura produzirá um erro na estimativa da integral, que pode ser determinado usando o **Teorema do Kernel de Peano**. Este resultado diz que, para uma f suave com p derivadas suaves, vale

$$\left| \int_a^b f(t)\omega(t) dt - \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j) \right| \leq c \max_{t \in [a,b]} |f^{(p)}(t)|,$$

sendo $c > 0$ independente de f . Neste caso, a quadratura é dita de ordem p . Observe, em particular, que se f tiver derivada p -ésima nula, então a quadratura será uma representação exata da integral! Uma função polinomial de grau $p - 1$ é um exemplo de tal f .

Podemos pensar, novamente, em aproximar a função f por um polinômio interpolador a partir dos ν pontos nos quais a quadratura é calculada, isto é,

$$f(t) \approx p(t) = \sum_{j=1}^{\nu} f(t_j) \mathcal{L}_j(t) = \sum_{j=1}^{\nu} f(c_j) \mathcal{L}_j(t),$$

sendo

$$\mathcal{L}_j(t) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{\nu} \frac{t - t_k}{t_j - t_k}.$$

Substituindo na integral, obtemos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t)\omega(t) dt &= \int_a^b \left[\sum_{j=1}^{\nu} f(c_j) \mathcal{L}_j(t) \right] \omega(t) dt \\ &= \sum_{j=1}^{\nu} f(c_j) \left[\int_a^b \mathcal{L}_j(t) \omega(t) dt \right] \\ &= \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j), \end{aligned}$$

ou seja, os pesos da quadratura são dados por

$$b_j = \int_a^b \mathcal{L}_j(t) \omega(t) dt, \quad j = 1, 2, \dots, \nu.$$

Quadraturas construídas desta forma são chamadas **fórmulas de Newton-Côtes**.

Tomando ν nós para a quadratura, como podemos determinar sua ordem? Uma maneira é escolher ν funções conhecidas, para as quais podemos determinar a integral analiticamente, e construir ν equações em termos dos nós. Um exemplo bastante comum é tomar os polinômios $1, t, t^2, \dots, t^{\nu-1}$. Observe que todos eles têm derivada ν -ésima nula, ou seja, a nossa quadratura de ν nós será exata para cada um deles. Assim, temos

$$\int_a^b t^m \omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j c_j^m, \quad m = 0, 1, \dots, \nu-1,$$

que nos dá o sistema

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 + \dots + b_{\nu} &= \int_a^b \omega(t) dt = A_0 \\ b_1 c_1 + b_2 c_2 + \dots + b_{\nu} c_{\nu} &= \int_a^b t \omega(t) dt = A_1 \\ &\vdots \\ b_1 c_1^{\nu-1} + b_2 c_2^{\nu-1} + \dots + b_{\nu} c_{\nu}^{\nu-1} &= \int_a^b t^{\nu-1} \omega(t) dt = A_{\nu-1} \end{aligned}$$

isto é,

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ c_1 & c_2 & c_3 & \dots & c_{\nu} \\ c_1^2 & c_2^2 & c_3^2 & \dots & c_{\nu}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1^{\nu-1} & c_2^{\nu-1} & c_3^{\nu-1} & \dots & c_{\nu}^{\nu-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{\nu} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_{\nu-1} \end{bmatrix}.$$

Como a matriz deste sistema é uma matriz de Vandermonde, segue que ele admite solução única e, portanto, a quadratura tem ordem $p \geq \nu$. Diremos que uma quadratura é de ordem p se ela integrar exatamente polinômios de grau $p-1$.

Observe que, até agora, os nós da quadratura são escolhidos. Vamos, agora, escolher estes nós de maneira a melhorar a ordem da quadratura, nos aproveitando da função peso ω . Para tal suponha que f seja um polinômio de grau menor que ν , de modo que a quadratura

$$\int_a^b f(t) \omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j),$$

com

$$b_j = \int_a^b \mathcal{L}_j(t) \omega(t) dt,$$

é exata. Para outras funções quaisquer, esta quadratura tem ordem ν , ou seja, o erro vai com $\max_{[a,b]} |f^{(\nu)}(t)|$.

Agora, suponha que f seja um polinômio de grau menor que 2ν . Daí, ao dividir f por um polinômio P_{ν} de grau ν , obtemos

$$f(t) = Q(t)P_{\nu}(t) + R(t),$$

onde o quociente, Q , e o resto R , são polinômios de grau menor que ν . Ora, mas se P_ν tiver os nós da quadratura como raízes, então

$$f(c_j) = Q(c_j)P_\nu(c_j) + R(c_j) = R(c_j).$$

Usando este fato, segue que

$$\int_a^b f(t)\omega(t) dt = \int_a^b Q(t)P_\nu(t)\omega(t) dt + \int_a^b R(t)\omega(t) dt,$$

com

$$\int_a^b R(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j R(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j).$$

Portanto, a integral

$$\int_a^b Q(t)P_\nu(t)\omega(t) dt$$

nada mais é do que o erro cometido pela quadratura. E podemos zerá-lo! De fato, basta escolhermos P_ν tal que

$$\int_a^b Q(t)P_\nu(t)\omega(t) dt = 0, \quad \forall Q \text{ de grau menor que } \nu.$$

Escolhido P_ν desta forma, a quadratura obtida terá ordem (pelo menos) 2ν .

Definição 3.1. Dizemos que um polinômio P_k de grau k é **ortogonal** com relação a ω se

$$\int_a^b p(t)P_k(t)\omega(t) dt = 0$$

para todo polinômio p de grau menor que k .

É possível mostrar que, escolhido um peso ω , os polinômios ortogonais mônicos são únicos. De fato, suponha que p_1 e p_2 são dois polinômios ortogonais mônicos de grau m com relação a ω . Ora, então $p_1 - p_2$ tem grau $m - 1$ e, portanto,

$$\langle p_1, p_1 - p_2 \rangle = 0 = \langle p_2, p_1 - p_2 \rangle.$$

Pela linearidade do produto interno, segue que

$$\langle p_1 - p_2, p_1 - p_2 \rangle = 0 \iff p_1 = p_2.$$

Alguns exemplos:

- i) escolhendo o intervalo $[a, b] = [-1, 1]$ e o peso $\omega(t) = (1-t)^\alpha(1+t)^\beta$, com $\alpha, \beta > -1$, obtemos os polinômios ortogonais

$$P_\nu(t) = p_\nu^{(\alpha, \beta)}(t),$$

chamados **polinômios de Jacobi**. Em particular,

(a) se $\alpha = 0 = \beta$, ou seja, $\omega(t) = 1$, então os P_ν são chamados **polinômios de Legendre** :

$$P_0(t) = 1, P_1(t) = t, P_2(t) = t^2 - 1/3, P_3(t) = t^3 - 3t/5, \dots$$

Eles serão os mais utilizados neste texto.

(b) se $\alpha = -1/2 = \beta$, os P_ν são chamados **polinômios de Chebyshev**, normalmente denotados T_ν .

ii) escolhendo o intervalo $[a, b] = [0, \infty)$ e o peso $\omega(t) = t^\alpha e^{-t}$ com $\alpha > -1$, obtemos os chamados **polinômios de Laguerre**, comumente denotados L_ν^α .

iii) escolhendo o intervalo $[a, b] = (-\infty, \infty)$ e o peso $\omega(t) = e^{-t^2}$, obtemos os chamados **polinômios de Hermite**, comumente denotados H_ν .

Agora, tendo os polinômios, basta escolhermos os nós da quadratura como os seus zeros. O resultado abaixo nos ajuda um pouco nessa tarefa.

Teorema 3.1. Todos os zeros de um polinômio ortogonal em $[a, b]$ são simples e se encontram no intervalo $[a, b]$.

Demonstração. Seja p_m um polinômio ortogonal qualquer com respeito a ω . Como

$$\int_a^b p_m(t) \omega(t) dt = \langle p_m, 1 \rangle = 0$$

e $\omega \geq 0$, segue que p_m muda de sinal pelo menos uma vez em (a, b) . Sejam x_1, x_2, \dots, x_k todos os pontos de (a, b) em que p_m muda de sinal. Pelo exposto acima, sabemos que $k \geq 1$. Suponha que $k \leq m - 1$ e defina

$$q(t) = \prod_{j=1}^k (t - x_j) = \sum_{i=0}^k q_i t^i.$$

Portanto, p_m e q mudam de sinal nos mesmos pontos de (a, b) , e o produto $p_m q$ não muda de sinal em $[a, b]$. Novamente, como $\omega \geq 0$ deduzimos que

$$\int_a^b p_m(t) q(t) \omega(t) dt \neq 0.$$

Por outro lado, a definição de ortogonalidade e a linearidade do produto interno implicam que

$$\int_a^b p_m(t) q(t) \omega(t) dt = \sum_{i=0}^k q_i \langle p_m, t^i \rangle = 0,$$

porque $k \leq m - 1$. Isto é uma contradição e, portanto, $k \geq m$. Como cada mudança de sinal é um zero de p_m , que tem m zeros em \mathbb{C} , segue que p_m tem m zeros simples em (a, b) . \square

Ademais, escolhendo os nós da quadratura como os zeros dos polinômios ortogonais, temos o seguinte resultado.

Teorema 3.2. Se c_1, c_2, \dots, c_ν são os zeros de um polinômio ortogonal P_ν e b_1, b_2, \dots, b_ν são os pesos das fórmulas de Newton-Côtes, então a quadratura

$$\int_a^b f(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(c_j)$$

é de ordem 2ν e nenhuma outra quadratura excede esta ordem. Estas quadraturas são chamadas **quadraturas Gaussianas**.

Demonstração. Seja \hat{p} um polinômio de grau $\leq 2\nu - 1$. Aplicando o algoritmo da divisão para \hat{p} e P_ν , segue que existem q, r de grau $\leq \nu - 1$ tais que

$$\hat{p} = P_\nu q + r.$$

Portanto,

$$\int_a^b \hat{p}(t)\omega(t) dt = \langle P_\nu, q \rangle + \int_a^b r(t)\omega(t) dt = \int_a^b r(t)\omega(t) dt.$$

Ademais,

$$\sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{p}(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j P_\nu(c_j) q(c_j) + \sum_{j=1}^{\nu} b_j r(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j r(c_j),$$

porque $P_\nu(c_j) = 0, j = 1, 2, \dots, \nu$. Como r tem grau $\leq \nu - 1$, segue que

$$\int_a^b r(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j r(c_j).$$

Portanto,

$$\int_a^b \hat{p}(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{p}(c_j),$$

ou seja, a quadratura tem ordem $\geq 2\nu$. Para mostrar que nenhuma quadratura excede esta ordem (e, também, que esta ordem é exatamente 2ν), assumamos que, para alguma escolha de pesos b_1, b_2, \dots, b_ν e nós c_1, c_2, \dots, c_ν , a quadratura tem ordem $p \geq 2\nu + 1$. Em particular, ela integraria exatamente o polinômio de grau 2ν dado por

$$\hat{p}(t) = \prod_{i=1}^{\nu} (t - c_i)^2.$$

Ora, mas isso é impossível porque por um lado

$$\int_a^b \hat{p}(t)\omega(t) dt = \int_a^b \left[\prod_{i=1}^{\nu} (t - c_i)^2 \right] \omega(t) dt > 0,$$

enquanto que

$$\sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{p}(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \prod_{i=1}^{\nu} (c_j - c_i)^2 = 0.$$

□

Este resultado pode ser generalizado para o seguinte.

Teorema 3.3. Seja R um polinômio que satisfaz as condições de ortogonalidade para todo polinômio de grau até $m - 1$, com $m \in \{1, 2, \dots, \nu\}$. Tomando os nós c_1, c_2, \dots, c_ν como as raízes de R e b_1, b_2, \dots, b_ν pelas fórmulas de Newton-Côtes, a quadratura terá ordem $\nu + m$.

Demonstração. Seja \hat{p} um polinômio de grau $\leq \nu + m - 1$. Podemos escrevê-lo como

$$\hat{p} = Rq + \hat{r},$$

com q e \hat{r} polinômios de grau $\leq m - 1$. Daí, segue que

$$\int_a^b \hat{p}(t)\omega(t) dt = \langle R, q \rangle + \int_a^b \hat{r}(t)\omega(t) dt = \int_a^b \hat{r}(t)\omega(t) dt$$

e também

$$\sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{p}(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{r}(c_j).$$

Como \hat{r} tem grau no máximo $m - 1$, segue que a quadratura o integra exatamente e, portanto,

$$\int_a^b \hat{p}(t)\omega(t) dt = \int_a^b \hat{r}(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{r}(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{p}(c_j),$$

ou seja, a quadratura tem ordem pelo menos $\nu + m$. Suponha que a quadratura tem ordem $\geq \nu + m + 1$ e considere o polinômio de grau $\nu + m$ dado por

$$\hat{p}(t) = \prod_{i=1}^m (t - c_i)^2 \prod_{k=m+1}^{\nu} (t - c_k).$$

Por um lado,

$$\sum_{j=1}^{\nu} b_j \hat{p}(c_j) = \sum_{j=1}^{\nu} b_j \prod_{i=1}^m (c_j - c_i)^2 \prod_{k=m+1}^{\nu} (c_j - c_k) = 0.$$

Por outro lado,

$$\int_a^b \hat{p}(t)\omega(t) dt = \int_a^b \left[\prod_{i=1}^m (t - c_i)^2 \prod_{k=m+1}^{\nu} (t - c_k) \right] \omega(t) dt > 0,$$

o que é absurdo. Portanto, a ordem da quadratura é exatamente $\nu + m$.

□

3.3 Métodos de Runge-Kutta explícitos

Vamos, agora, construir os métodos de Runge-Kutta a partir das técnicas de quadratura discutidas previamente. Partindo da formulação integral equivalente da EDO, temos

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tau, y(\tau)) d\tau = y_n + \sum_{j=1}^{\nu} \tilde{b}_j f(t_{j,n}, \xi_j), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

com

$$t_{j,n} = t_n + c_j h, \quad \xi_j = y(t_n + c_j h).$$

Precisamos, então, encontrar valores para \tilde{b}_j , c_j e ξ_j para que possamos construir os métodos. Como vimos anteriormente, ao escolher os valores de c_j encontramos uma maneira de determinar os \tilde{b}_j . O problema, então, está em construir as aproximações para ξ_j a partir dos c_j escolhidos.

Para obtermos essas estimativas, vamos dizer que cada valor ξ_j será dado por uma combinação linear do tipo

$$\begin{aligned} \xi_1 &= y_n + \sum_{i=1}^{\nu} \tilde{a}_{1i} f(t_n + c_i h, \xi_i) \\ \xi_2 &= y_n + \sum_{i=1}^{\nu} \tilde{a}_{2i} f(t_n + c_i h, \xi_i) \\ &\vdots \\ \xi_{\nu} &= y_n + \sum_{i=1}^{\nu} \tilde{a}_{\nu i} f(t_n + c_i h, \xi_i). \end{aligned}$$

Note que as expressões nesta forma geral nos dariam métodos implícitos, porque todos os ξ_i dependeriam de todos os ξ_i . Portanto, para que os métodos sejam explícitos devemos ter a seguinte estrutura, com $\tilde{a}_{ij} = h a_{ij}$:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= y_n \\ \xi_2 &= y_n + h[a_{21} f(t_n, \xi_1)] \\ \xi_3 &= y_n + h[a_{31} f(t_n, \xi_1) + a_{32} f(t_n + c_2 h, \xi_2)] \\ \xi_4 &= y_n + h[a_{41} f(t_n, \xi_1) + a_{42} f(t_n + c_2 h, \xi_2) + a_{43} f(t_n + c_3 h, \xi_3)] \\ &\vdots \\ \xi_{\nu} &= y_n + h \sum_{i=1}^{\nu-1} a_{\nu i} f(t_n + c_i h, \xi_i), \end{aligned}$$

onde escolhemos $c_1 = 0$. Com isso, o método é explícito e podemos escrever

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(t_n + c_j h, \xi_j), \quad (3.2)$$

onde $\tilde{b}_j = hb_j$. Este é chamado **método de Runge-Kutta explícito** de ν estágios.

Vemos, portanto, que o método de Runge-Kutta explícito de ν estágios pode ser definido em termos de três conjuntos de constantes:

i) as constantes a_{ij} , que podem ser organizadas na matriz

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{\nu 1} & a_{\nu 2} & a_{\nu 3} & a_{\nu 4} & \cdots & a_{\nu-1, \nu} & 0 \end{bmatrix},$$

chamada **matriz de Runge-Kutta**. Para que um método de Runge-Kutta seja explícito, sua matriz deve ser estritamente triangular inferior.

ii) as constantes b_j , que são os **pesos de Runge-Kutta** e que podem ser representadas por um vetor

$$\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3, \dots, b_\nu).$$

iii) as constantes c_j , que são os **nós de Runge-Kutta** e que podem ser representadas por um vetor

$$\mathbf{c} = (0, c_2, c_3, \dots, c_\nu).$$

Podemos, portanto, identificar um método de Runge-Kutta a partir destes objetos utilizando a chamada **tabela de Butcher**:

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c}^T & A \\ \hline & \mathbf{b} \end{array},$$

Por exemplo, o método dado por

$$\begin{cases} \xi_1 = y_n \\ \xi_2 = y_n + ha_{21}f(t_n, \xi_1) \\ y_{n+1} = y_n + hb_1f(t_n, \xi_1) + hb_2f(t_n + c_2h, \xi_2) \end{cases}$$

pode ser representado pela tabela de Butcher

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ c_2 & a_{21} & 0 \\ \hline & b_1 & b_2 \end{array}$$

Se estivéssemos com um problema em que avaliássemos exatamente o integrando, já sabemos que podemos escolher os nós c_j e, assim, encontraríamos os b_j necessários para que a quadratura tivesse ordem ν (a quantidade de pontos no intervalo $[a, b]$). Porém, no caso dos métodos de Runge-Kutta, a

avaliação aproximada de

$$y'(t_n + c_j h) \approx f(t_n + c_j h, \xi_j)$$

exige que as constantes do método sejam determinadas por comparação com o método de Taylor para que possamos garantir a ordem da aproximação. Este é um procedimento complicado e extremamente tedioso para métodos de alta ordem.

Para métodos de ordem no máximo 3, felizmente, podemos construir métodos de Runge-Kutta gerais tomando apenas sistemas autônomos, i.e., $f(t, y) = f(y)$. Por exemplo, considere o método de Runge-Kutta de 3 estágios:

$$\begin{cases} \xi_1 = y_n \\ \xi_2 = y_n + h a_{21} f(\xi_1) \\ \xi_3 = y_n + h a_{31} f(\xi_1) + h a_{32} f(\xi_2) \\ y_{n+1} = y_n + h b_1 f(\xi_1) + h b_2 f(\xi_2) + h b_3 f(\xi_3). \end{cases}$$

Expandindo cada estágio, temos

$$\begin{cases} \xi_1 = y_n \\ \xi_2 = y_n + h a_{21} f(y_n) \\ \xi_3 = y_n + h [a_{31} + a_{32}] f(y_n) + h^2 a_{32} a_{21} f(y_n) f_y(y_n) + \frac{h^3}{2} a_{32} a_{21}^2 f^2(y_n) f_{yy}(y_n) + \dots \end{cases}$$

Denotando $f(y_n) = f$, $f_y(y_n) = f_y$ e assim por diante, temos

$$\begin{aligned} f(\xi_2) &= f + h a_{21} f f_y + \frac{h^2}{2} a_{21}^2 f^2 f_{yy} + O(h^3) \\ f(\xi_3) &= f + [a_{32} + a_{31}] f f_y + h^2 \left[a_{32} a_{21} f f_y^2 + \frac{f_{yy}}{2} (a_{31} + a_{32})^2 f^2 \right] + O(h^3). \end{aligned}$$

Retornando ao passo de avanço, obtemos

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h f [b_1 + b_2 + b_3] + h^2 [b_2 a_{21} f f_y + b_3 (a_{31} + a_{32}) f f_y] \\ &\quad + h^3 \left[\frac{b_2 a_{21}^2}{2} + \frac{b_3}{2} (a_{31} + a_{32})^2 + a_{32} a_{21} b_3 f f_y^2 \right] + O(h^4). \end{aligned}$$

Comparando este método com o método de Taylor de ordem 3,

$$y_{n+1} = y_n + h f + \frac{1}{2} h^2 f f_y + \frac{1}{6} h^3 (f_{yy} f^2 + f f_y^2) + O(h^4),$$

obtemos

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 = 1 \\ b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32}) = 1/2 \\ b_2^2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2 = 1/3 \\ a_{32} a_{21} b_3 = 1/6. \end{cases}$$

Este sistema tem infinitas soluções, ou seja, temos mais de um método de Runge-Kutta de 3 estágios! Além disso, observe que este sistema não envolve os nós da quadratura, que são necessários para que possamos construir os métodos. Como fizemos as contas para o caso autônomo, os c_j não apareceram. Fazendo as contas para $f = f(t, y)$, encontraríamos que

$$\sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} = c_j, \quad j = 2, 3, \dots, \nu,$$

que é chamada **condição de consistência** dos métodos de Runge-Kutta.

Dois exemplos famosos de métodos de Runge-Kutta de terceira ordem são o **método de Runge-Kutta clássico**, dado por

0			
1/2	1/2		
1	-1	2	
<hr/>			
	1/6	2/3	1/6

e o **método de Nystrom**, dado por

0			
2/3	2/3		
2/3	0	2/3	
<hr/>			
	1/4	3/8	3/8

Para métodos de ordem maior ou igual a 4, as contas se complicam de maneira extraordinária e, além disso, não podemos construir métodos a partir de equações autônomas. A maneira usual de construir métodos de Runge-Kutta explícitos de alta ordem é usar teoria combinatória dos grafos para determinar os termos do operador

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial y} \right)^n.$$

O leitor interessado é convidado a conferir o Capítulo 3 de [6]. O método de Runge-Kutta explícito mais famoso talvez seja o de quarta ordem dado por

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
<hr/>				
	1/6	1/3	1/3	1/6

Este método tem 4 estágios, e pode ser encontrado na forma

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, y_n) \\ k_2 &= f(t_n + h/2, y_n + hk_1/2) \\ k_3 &= f(t_n + h/2, y_n + hk_2/2) \\ k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \end{aligned}$$

É possível mostrar, infelizmente, que métodos de Runge-Kutta explícitos de ν estágios com ordem ν só existem para $\nu \leq 4$. Para obter métodos explícitos de ordens mais altas, precisamos de mais estágios.

A análise da convergência dos métodos de Runge-Kutta explícitos é bastante complicada também. Vamos comentar sobre isto um pouco mais adiante, quando tratarmos do teorema da equivalência de Lax.

3.4 Métodos de Runge-Kutta implícitos

Os métodos de Runge-Kutta implícitos são definidos a partir das seguintes expressões:

$$\begin{cases} \xi_j = y_n + h \sum_{i=1}^{\nu} a_{ji} f(t_n + c_j h, \xi_i), j = 1, 2, \dots, \nu \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{\nu} b_j f(t_n + c_j h, \xi_j). \end{cases}$$

Portanto, todos os estágios podem intervir no cálculo de todos os estágios. Estes métodos geram um sistema não-linear de ν equações para os estágios ξ_j e, por isso, seu custo pode ser proibitivo em algumas aplicações.

A grande vantagem deste tipo de método, como já vimos, é sua ordem elevada com poucos estágios, porque eles podem ser basear em quadraturas gaussianas e ter ordem até 2ν com apenas ν estágios.

Para tanto, vamos escolher os nós de Runge-Kutta como sendo os zeros dos polinômios de Legendre (adaptados para o intervalo $[0, 1]$):

$$\tilde{P}_\nu(t) = \frac{(\nu!)^2}{(2\nu)!} \sum_{k=0}^{\nu} (-1)^{\nu-k} \binom{\nu}{k} \binom{\nu+k}{k} t^k.$$

Por exemplo, temos $\tilde{P}_1(t) = t - 1/2$, de modo que $c_1 = 1/2$ e podemos construir o método de Runge-Kutta implícito de 1 estágio dado por

$$\begin{cases} \xi_1 = y_n + \frac{h}{2} f(t + h/2, \xi_1) \\ y_{n+1} = y_n + h f(t + h/2, \xi_1). \end{cases}$$

Observe que $y_{n+1} - y_n = hf(t + b/2, \xi_1)$ e, portanto, $\xi_1 = (y_{n+1} + y_n)/2$, de modo que

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n + b/2, (y_{n+1} + y_n)/2),$$

que nada mais é do que o método do ponto médio (implícito)! Sabemos que este método tem ordem 2.

Costuma-se usar métodos de Runge-Kutta implícitos de até 3 estágios (de ordem 6) em aplicações que realmente necessitam de alta precisão e que não podem ser resolvidas por outros métodos. Um exemplo é o método dado por

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$	$\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$

Os métodos de Runge-Kutta implícitos construídos a partir dos polinômios de Legendre são chamados **métodos de Runge-Kutta de Gauss-Legendre**.

EXERCÍCIOS

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

A. Considere determinar a integral de uma função no intervalo $[0, 1]$ com peso $w(t) \equiv 1$, isto é, determinar

$$I = \int_0^1 f(t) dt.$$

1. Considere os nós $c_1 = \frac{1}{4}$, $c_2 = \frac{1}{2}$, $c_3 = \frac{3}{4}$. Determine a quadratura resultante e sua ordem.
2. Compare o seu resultado anterior com a quadratura obtida para $c_1 = 0$, $c_2 = \frac{1}{2}$, $c_3 = 1$.
3. Determine, agora, a quadratura Gaussiana de ordem 4 para determinar I .

B. Considere construir um método explícito de Runge-Kutta de 3 passos para resolver um PVI do tipo $y' = f(y)$, $y(t_0) = y_0$.

1. Escreva explicitamente este método, com todos os seus estágios e, posteriormente, monte a tabela de Runge-Kutta associada a ele.
2. Expanda cada um de seus estágios mantendo os termos até $O(h^2)$. Atenção nas contas.
3. Comparando com o método de Taylor com $\tau_n = O(h^4)$, mostre que o sistema a ser resolvido é dado por:

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 = 1 \\ b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32}) = \frac{1}{2} \\ b_2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2 = \frac{1}{3} \\ a_{32} a_{21} b_3 = \frac{1}{6} \end{cases}$$

Note que o sistema não-linear acima é composto por 4 equações e 6 incógnitas.

4. Veja que o sistema acima envolve nenhum dos nós. Por que isto acontece? Assuma, então, que

$$c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}, \quad i = 2, 3, \dots, \nu$$

e reescreva o sistema envolvendo os nós.

5. Note que, se escolhermos deixar c_2 e c_3 como parâmetros a serem escolhidos, podemos encontrar todos as demais constantes que definem o método. Apresente a solução do sistema em termos de c_2 e c_3 . É verdade que não podemos ter *nunca* $c_2 = c_3$?

6. Escolhendo $c_1 = 0, c_2 = 2/5$ e $c_3 = 4/5$, mostre que o método de RK-DS tem como tabela:

0			
$2/5$	$2/5$		
$4/5$	$-6/5$	2	
	$3/8$	$5/24$	$5/12$

C. Considere o método de Runge-Kutta implícito de dois estágios:

$$\begin{aligned}\xi_1 &= y_n + \frac{h}{4} \left[f(t_n, \xi_1) - f\left(t_n + \frac{2}{3}h, \xi_2\right) \right] \\ \xi_2 &= y_n + \frac{h}{12} \left[3f(t_n, \xi_1) + 5f\left(t_n + \frac{2}{3}h, \xi_2\right) \right] \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{4} \left[f(t_n, \xi_1) + 3f\left(t_n + \frac{2}{3}h, \xi_2\right) \right]\end{aligned}$$

1. Escreva este método na forma da Tabela de Runge-Kutta.
2. Considerando a equação $y' = y$, mostre que este método é $O(h^3)$.
3. Apresente, para a mesma equação anterior, o sistema a ser resolvido a cada passo para se determinar y_{n+1} e, se possível, resolva-o analiticamente, apresentando o processo iterativo resultante. Compare-o com o resultado obtido pelo Método de Euler.

D. Considere o sistema de equações dado por $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$, $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$.

1. Escreva o método geral explícito de Runge-Kutta de ν estágios aplicado a este sistema, usando a notação padrão. Note que, agora, que algumas de suas quantidades são *vetores*. Escreva explicitamente, em particular, o método clássico de Runge-Kutta 4ª ordem para este sistema.
2. Considere, agora, que o sistema acima seja dado explicitamente pelas equações abaixo:

$$\begin{cases} y' = f(t, y, z), & y(0) = y_0 \\ z' = g(t, y, z), & z(0) = z_0 \end{cases}$$

Repita o procedimento do item anterior para este caso particular e mostre que:

$$\begin{aligned}
 \xi_1 &= y_n & , \quad \psi_1 &= z_n \\
 \xi_2 &= y_n + a_{21}hf(t, \xi_1, \psi_1) & , \quad \psi_2 &= z_n + a_{21}hg(t, \xi_1, \psi_1) \\
 \xi_3 &= y_n + h \sum_{k=1}^2 a_{3k}f(t + c_k h, \xi_k, \psi_k) & , \quad \psi_2 &= z_n + h \sum_{k=1}^2 a_{3k}g(t + c_k h, \xi_k, \psi_k) \\
 &\vdots & & \vdots \\
 \xi_\nu &= y_n + h \sum_{k=1}^{\nu-1} a_{\nu k}f(t + c_k h, \xi_k, \psi_k) & , \quad \psi_\nu &= z_n + h \sum_{k=1}^{\nu-1} a_{\nu k}g(t + c_k h, \xi_k, \psi_k) \\
 y_{n+1} &= y_n + h \sum_{k=1}^{\nu} b_k f(t + c_k h, \xi_k, \psi_k) & , \quad z_{n+1} &= z_n + h \sum_{k=1}^{\nu} b_k g(t + c_k h, \xi_k, \psi_k)
 \end{aligned}$$

3. Resolva o sistema de equações abaixo usando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem e faça um estudo da ordem deste método.

$$\begin{cases} y' = y - z, & y(0) = 1 \\ z' = y^2 + z, & z(0) = 1 \end{cases}$$

E. Considere o PVI $y' + y + \sin(y)^2 + \cos(t) = 0$, $y(0) = \frac{1}{4}$.

1. Resolva este problema com os métodos de Runge-Kutta explícito de 2a., 3a. e 4a. ordem, com $h = 0.001$, $h = 0.01$ e $h = 0.1$, e $0 < t \leq 25$. Trace suas soluções e o diagrama de fase $y' \times y$.
2. Repita o procedimento do item 1 para os métodos de Euler implícito, do trapézio e de Runge-Kutta de Gauss-Legendre de 3 estágios. Use o método de Newton para encontrar numericamente as raízes da equação algébrica resultante.
3. Compare o tempo de simulação gasto pelo método de Runge-Kutta de Gauss-Legendre com o método de Runge-Kutta explícito de 4a. ordem.
4. Valide, numericamente, a ordem dos métodos utilizados neste exercício.

F. Os métodos de Runge-Kutta são construídos a partir de quadraturas aplicadas à integral do lado direito de

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt.$$

Considere o método clássico de Runge-Kutta de quarta-ordem dado pela seguinte tabela de Butcher,

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	0	0	1	0
	1/6	1/3	1/3	1/6

Mostre que quando este método é aplicado à equação $y' = f(t)$, caso especial em que $a = 0$, obtém-se

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} \left[f(t_n) + 4f\left(t_n + \frac{h}{2}\right) + f(t_n + h) \right].$$

Compare seu resultado com a Regra de Simpson, uma clássica fórmula de Newton-Côtes para cálculo de integrais.

G. Considere o método do ponto médio explícito,

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}f(t_n, y_n)\right),$$

e o método de Euler melhorado,

$$\begin{cases} \tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \left[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \tilde{y}_{n+1}) \right] \end{cases}.$$

Mostre que estes dois métodos são métodos de Runge-Kutta de ordem 2. Para tal, mostre que é possível escrevê-los na forma de estágios e construa a tabela de Butcher de cada um deles. Posteriormente, resolva o PVI

$$y' = 1 + t - y, \quad y(0) = 1, \quad t \in [0, 1],$$

para $h = 0.01$. Compare seus resultados. Mostre, analiticamente, que, para este PVI em particular, os dois métodos dão resultados idênticos para qualquer h . Tente explicar o porquê.

ESTABILIDADE DE MÉTODOS NUMÉRICOS

4.1 Rigidez e A-estabilidade

Até agora, estudamos a fundo diferentes métodos construídos a partir de diferentes técnicas. Sempre tínhamos como objetivo construir métodos melhores, isto é, métodos que convergiam com ordem alta para as soluções das EDOs. Entretanto, nessa nossa busca acabamos deixando de lado uma importante peça na tarefa de integrar EDOs: as próprias EDOs! De fato, a convergência de alguns métodos dependerá da equação a ser resolvida.

Vamos considerar a equação linear “bem simples”

$$y' = \lambda y, \lambda < 0, y(0) = y_0$$

e vamos tentar resolvê-la pelo método de Euler:

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n = (1 + h\lambda)y_n.$$

Pelo PVI, segue que

$$y_n = (1 + h\lambda)^n y_0, n \geq 0.$$

A solução exata do PVI, como sabemos, é $y(t) = y_0 e^{\lambda t}$, $t \geq 0$, que claramente vai a 0 quando $t \rightarrow \infty$, porque $\lambda < 0$. Entretanto, $y_n \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$ só se $|1 + h\lambda| < 1$! Dito de outro modo, não podemos escolher h de maneira arbitrária, pois

$$|1 + h\lambda| < 1 \iff 0 < h < \frac{2}{|\lambda|}.$$

Portanto, o método de Euler só convergirá para a solução do PVI se impusermos uma restrição no passo de tempo, que depende da própria EDO (via λ).

Para entender o que está acontecendo mais a fundo, considere a EDO mais geral

$$y'(t) = \Phi(t) + Ay(t), y(0) = y_0,$$

com $\Phi(t)$ um vetor de funções de t , chamado de não-homogeneidade, e A uma matriz quadrada de ordem m com entradas reais. A solução geral deste sistema é dada por

$$y(t) = y_p(t) + y_h(t),$$

sendo $y_b(t)$ solução geral da equação homogênea, isto é,

$$y'_b(t) = Ay_b(t),$$

e $y_p(t)$ uma solução particular associada à não-homogeneidade $\Phi(t)$. A solução homogênea pode ser encontrada fazendo $y_b(t) = \alpha e^{\lambda t}$, sendo α um vetor de dimensão m :

$$\lambda \alpha e^{\lambda t} = A \alpha e^{\lambda t} \iff \lambda \alpha = A \alpha.$$

Portanto,

$$y(t) = \sum_{k=1}^m c_k e^{\lambda_k t} \alpha_k + y_p(t),$$

sendo λ_k os autovalores de A e α_k os autovetores correspondentes (vamos assumir que A é completa). As constantes c_k dependerão do PVI em questão. Aplicando o método de Euler para este problema, obtemos

$$y_n = (I + hA)^n y_0 + h \sum_{j=1}^n (I + hA)^{j-1} \Phi(t_{n-j}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Como A é completa, podemos escrever $A = VDV^{-1}$, sendo $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$ e $V = [\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m]$ a matriz dos autovetores. Daí,

$$(I + hA)^n = (VV^{-1} + hVDV^{-1})^n = (V(I + hD)V^{-1})^n = V(I + hD)^n V^{-1}$$

ou seja,

$$(I + hA)^n = V \begin{bmatrix} (1 + h\lambda_1)^n & & & \\ & (1 + h\lambda_2)^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & (1 + h\lambda_m)^n \end{bmatrix} V^{-1}.$$

Portanto, a solução numérica depende dos $(1 + h\lambda_k)^n$ e a teórica depende dos $e^{\lambda_k t}$. Observe que os λ_k podem, *a priori*, ser imaginários. Se $\text{Re}(\lambda_k) > 0$ para algum k , então $y(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty$ e, portanto, a solução numérica y_n diverge para qualquer h . Se $\text{Re}(\lambda_k) < 0$ para todo k , então a solução homogênea deve tender a zero, i.e.

$$y(t) = \sum_{k=1}^m c_k e^{\lambda_k t} \alpha_k + y_p(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} y_p(t).$$

A parte homogênea é chamada de **solução transiente**, e a solução particular é a solução **permanente**.

Neste tipo de problema, queremos computar a solução permanente da EDO, mas precisamos evoluir a solução a partir da condição inicial até alcançar y_p , e este é o grande problema.

De fato, note que podemos encontrar λ_{\max} e λ_{\min} tais que

$$|\text{Re}(\lambda_{\min})| \leq |\text{Re}(\lambda_k)| \leq |\text{Re}(\lambda_{\max})|, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Então, precisamos respeitar a parte lenta da solução ($\text{Re}(\lambda_{\min})$) e integrar a EDO até que a parte homogênea não seja mais importante ($\text{Re}(\lambda_{\max})$). Quanto menor for $|\text{Re}(\lambda_{\min})|$, maior deverá ser o intervalo de integração. Entretanto, para que o método de Euler convirja, precisamos impor uma restrição no passo de tempo, associada aos $(1 + h\lambda_k)^n$. A restrição mais severa vem justamente do raio espectral de A , $\rho(A)$, pois $\rho(A) \geq |\text{Re}(\lambda_{\max})|$. Logo,

$$h < \frac{2}{\rho(A)}.$$

Isto é um grande problema: um autovalor determina o intervalo de integração e outro determina o passo de tempo!

Por exemplo, considere

$$A = \begin{bmatrix} -100 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{10} \end{bmatrix}.$$

A solução do sistema de EDOs é dada por

$$y(t) = c_1 e^{-100t} \alpha_1 + c_2 e^{-t/10} \alpha_2.$$

Claramente, para todas as utilidades físicas a solução da EDO é $\approx c_2 e^{-t/10} \alpha_2$, porque $e^{-100} \approx 10^{-44}$. Entretanto, o método de Euler aplicado a este sistema converge só se $h < 0.02$!

Observação 4.1. O caso $\lambda_k = 0$ (soluções oscilatórias) é mais complicado.

Definição 4.1. O sistema de EDOs linear

$$y'(t) = \Phi(t) + Ay(t)$$

é dito **rígido** se

- i) $\text{Re}(\lambda_k) < 0$, $k = 1, 2, \dots, m$;
- ii) $\max_{1 \leq k \leq m} \{|\text{Re}(\lambda_k)|\} \gg \min_{1 \leq k \leq m} \{|\text{Re}(\lambda_k)|\}$, $k = 1, 2, \dots, m$.

Dizemos que

$$\square = \frac{\max_{1 \leq k \leq m} \{|\text{Re}(\lambda_k)|\}}{\min_{1 \leq k \leq m} \{|\text{Re}(\lambda_k)|\}}$$

é a **razão de rigidez** do sistema. Quanto maior a razão de rigidez do sistema, mais difícil é resolvê-lo.

Observação 4.2. Para o sistema não-linear $y' = f(t, y)$, a rigidez do sistema virá dada pelos autovalores do jacobiano de f e, portanto, dependerá fortemente da estrutura de f e da variável independente t . A rigidez da EDO pode, por exemplo, estar limitada a um intervalo. O sistema não-homogêneo que estudamos acima pode ser visto como uma linearização do sistema não-linear em torno de algum y_0 , por exemplo. Isto mostra que o problema de rigidez nasce de diferentes escalas de tempo da equação, que devem produzir comportamentos exponencialmente decrescentes na solução.

Portanto, a pergunta que resta é: como resolver problemas rígidos? O ideal seria ter métodos cujo passo de tempo independe da EDO para que a convergência seja alcançada.

Vamos voltar ao método de Euler e à EDO “modelo” $y' = \lambda y$. Já sabemos que

$$y_n = (1 + h\lambda)^n y_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Como $\lambda \in \mathbb{C}$ em geral, podemos fazer $z = h\lambda$ e escrever a condição de estabilidade do método para o caso $\text{Re}(\lambda) < 0$ como

$$|1 + z| < 1, \quad z \in \mathbb{C}.$$

Esta desigualdade define uma região no plano complexo: o interior do disco de raio 1 e centro em $(-1, 0)$.

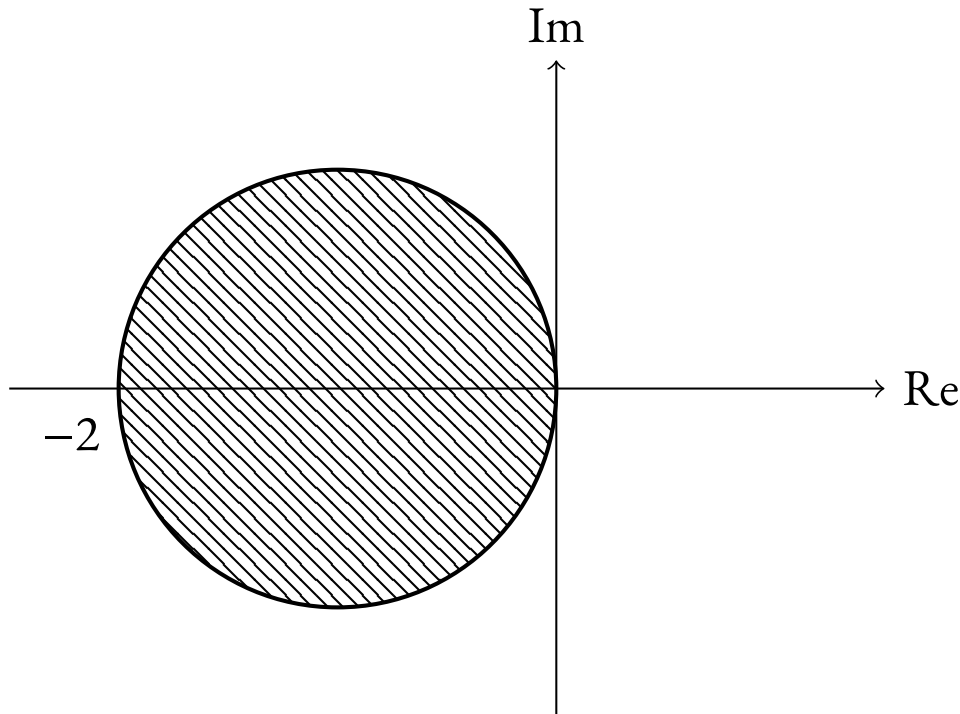


Figura 4.1 Domínio de estabilidade (linear) do método de Euler explícito.

Dentro desta região, chamada **domínio de estabilidade** do método, o método é estável!

Qualquer valor de $z = h\lambda$ fora desta região fará com que o método divirja e não encontre a solução $y_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. Note que se $\lambda \in \mathbb{R}$, claramente o critério de estabilidade para o método de Euler é $-2 < h\lambda < 0$, como vimos anteriormente.

Cada método terá um domínio de estabilidade, que será sua “marca registrada”. Dependendo do método em questão, calcular estas regiões pode ser complicado.

Vamos ver como o método de AB2 se comporta com relação à EDO $y' = \lambda y$. Aplicando o método, temos

$$\begin{aligned} y_{n+2} &= y_{n+1} + h \left[\frac{3}{2} \lambda y_{n+1} - \frac{1}{2} \lambda y_n \right] \\ y_{n+2} &= \left[1 + \frac{3}{2} h \lambda \right] y_{n+1} - \frac{1}{2} \lambda y_n \\ y_{n+2} - \left[1 + \frac{3}{2} h \lambda \right] y_{n+1} + \frac{1}{2} \lambda y_n &= 0. \end{aligned}$$

Esta é uma equação de diferenças, cuja solução é do tipo $y_n = r^k$:

$$r^2 - \left(1 + \frac{3}{2} h \lambda \right) r + \frac{1}{2} h \lambda = 0.$$

As raízes são

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{1 + 3h\lambda/2 + \sqrt{(1 + 3h\lambda/2)^2 - 2h\lambda}}{2} \\ r_2 &= \frac{1 + 3h\lambda/2 - \sqrt{(1 + 3h\lambda/2)^2 - 2h\lambda}}{2} \end{aligned}$$

e, assim, a solução do processo iterativo será

$$y_n = c_1 \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} h \lambda + \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 + \frac{3}{2} h \lambda \right)^2 - 2h\lambda} \right]^n + c_2 \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{4} h \lambda - \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 + \frac{3}{2} h \lambda \right)^2 - 2h\lambda} \right]^n.$$

Portanto, precisamos impor simultaneamente que $|r_1| < 1$ e $|r_2| < 1$, o que nos dá a seguinte região de estabilidade.

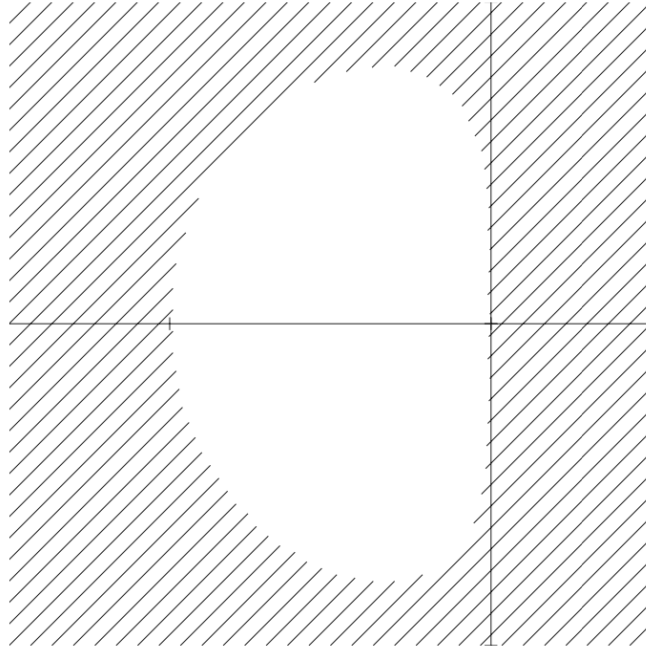


Figura 4.2 Domínio de estabilidade linear do método de Adams-Bashforth de 2 passos. Figura extraída de [11].

Observe que a região de estabilidade de AB2 é menor que a do método de Euler! Isto significa que AB2 exigirá maiores reduções no passo de tempo para problemas rígidos do que o método de Euler. Note que estabilidade não tem correlação alguma com ordem!

Para entender o motivo pelo qual AB2 se sai pior que Euler em equações rígidas, vamos voltar para r_1 e r_2 e expandi-las em torno de $h = 0$:

$$\begin{aligned}
 r_1 &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4}b\lambda + \frac{1}{2} \left(1 + 3b\lambda + \frac{9}{4}b^2\lambda^2 - 2b\lambda \right)^{1/2} \\
 &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4}b\lambda + \frac{1}{2} \left(1 + b\lambda + \frac{9}{4}b^2\lambda^2 \right)^{1/2} \\
 &\approx \frac{1}{2} + \frac{3}{4}b\lambda + \frac{1}{2} (1 + b\lambda + O(b^2)) \\
 &= 1 + b\lambda + O(b^2) \\
 r_2 &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4}b\lambda - \frac{1}{2} \left(1 + 3b\lambda + \frac{9}{4}b^2\lambda^2 - 2b\lambda \right)^{1/2} \\
 &\approx \frac{1}{2} + \frac{3}{4}b\lambda - \frac{1}{2} (1 + b\lambda + O(b^2)) \\
 &= \frac{1}{2}b\lambda + O(b^2).
 \end{aligned}$$

Portanto, a solução do processo iterativo será

$$y_n \approx c_1(1 + b\lambda)^n + c_2 \frac{1}{2}b\lambda.$$

A primeira parte converge para a soluções esperada, mas a segunda parcela é uma solução parasita, que não deveria aparecer. Para que a solução parasita não “prosperar”, precisamos impor que $|h\lambda/2| < 1$ além da restrição $|1 + h\lambda| < 1$. Isto reduz a região de estabilidade do método! Infelizmente, métodos de passos múltiplos são vítimas das soluções parasitas: quanto maior a ordem do método, mais soluções parasitas aparecem e mais restrições para $h\lambda$ precisam ser feitas.

Vamos olhar, então, para um outro velho conhecido:

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

Aplicando-o à equação modelo, temos

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1} \iff y_{n+1} = \frac{1}{1 - h\lambda} y_n$$

e, portanto, o processo iterativo da solução será

$$y_n = \left(\frac{1}{1 - h\lambda} \right)^n y_0.$$

Assim, para termos o comportamento correto da solução do processo iterativo com $\lambda < 0$, devemos impor

$$\left| \frac{1}{1 - h\lambda} \right| < 1 \iff 1 < |1 - h\lambda| \iff |1 - z| > 1,$$

que a região exterior ao disco de raio 1 e centro em (1, 0)! Esta região de estabilidade é muito grande e, mais importante, contém todo o semi-plano $\text{Re}(z) < 0$.

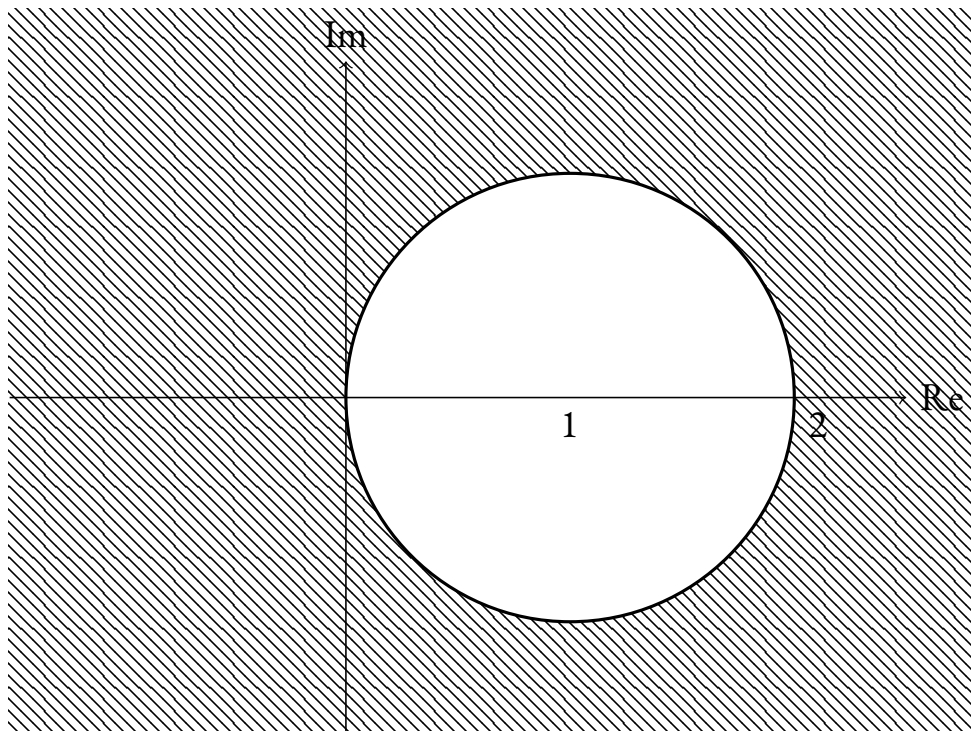


Figura 4.3 Domínio de estabilidade (linear) do método de Euler implícito.

Isto quer dizer que o método é estável para todo $h\lambda$ com $\lambda < 0$ (ou $\text{Re}(\lambda) < 0$) e, portanto, o método não precisa de reduções de passo de tempo para lidar com sistemas rígidos!

Definição 4.2 (A-estabilidade). Se o domínio de estabilidade de um método contiver o semi-plano $\text{Re}(z) < 0$, dizemos que o método é **absolutamente estável** ou, simplesmente, **A-estável**.

4.2 Resultados fundamentais

A solução para resolver problemas rígidos é usar métodos implícitos! Eles sempre se saem melhor nestes tipos de problemas. Outro exemplo de método A-estável é o método do trapézio, mas cuidado: nem todo método implícito é A-estável.

A seguir, listamos alguns resultados acerca da estabilidade de métodos.

Teorema 4.1. Nenhum método de Runge-Kutta explícito é A-estável. Os métodos de Runge-Kutta de Gauss-Legendre são A-estáveis para $\nu \geq 1$.

Teorema 4.2 (Segunda barreira de Dahlquist). A maior ordem de um método de passos múltiplos A-estável é 2, e o método deve ser implícito.

Observação 4.3. Precisamos fazer algumas observações:

- i) apesar de não serem A-estáveis, os métodos de passos múltiplos podem ser úteis para resolver problemas rígidos. As fórmulas de diferenças atrasadas, convergentes para $2 \leq p \leq 6$, têm domínios de estabilidade que englobam quase todo o semi-plano negativo.

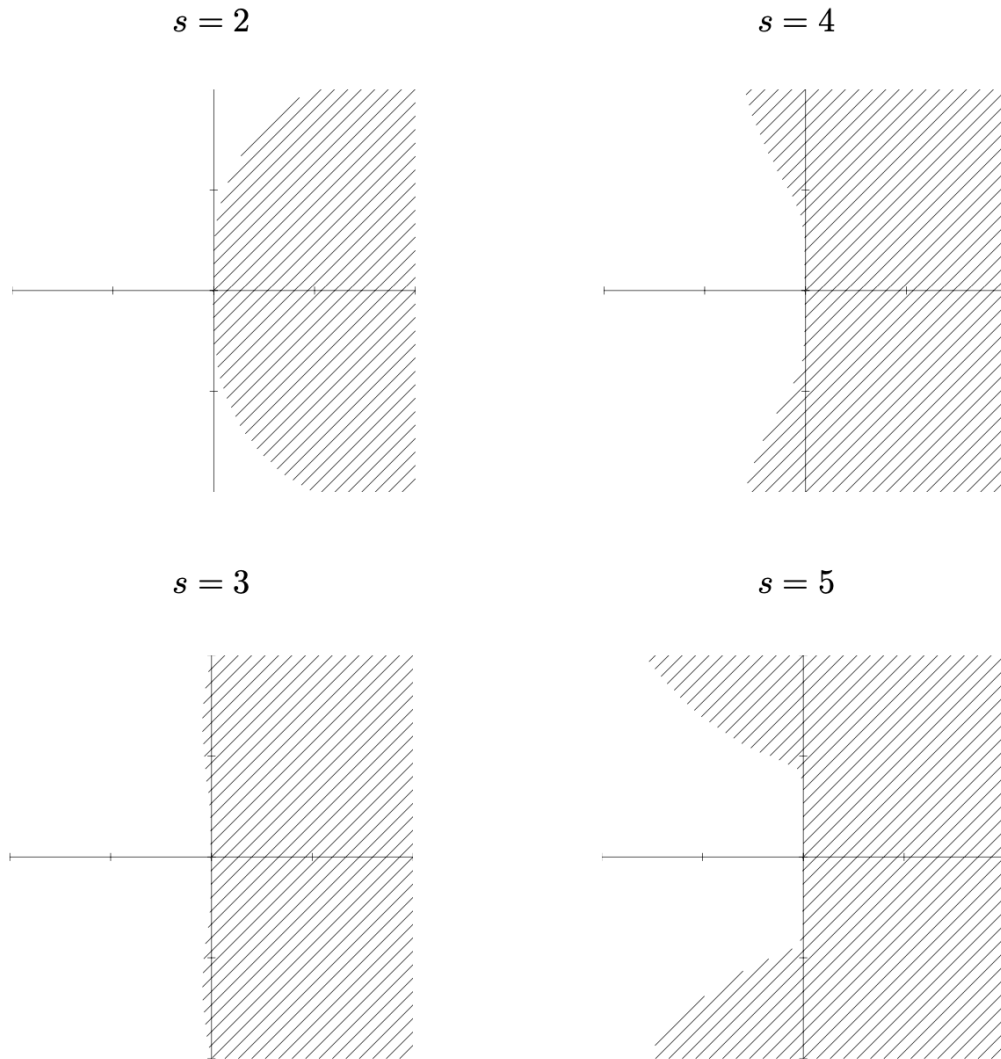


Figura 4.4 Domínios de estabilidade linear para alguns métodos de diferenças atrasadas. Figura extraída de [II].

A única fórmula de diferenças atrasadas que é A-estável é obtida para $p = 2$. As outras, porém, têm regiões de estabilidade muito grandes e, se os autovalores da equação estiverem nesta região, a integração pode ser conduzida sem problemas;

- ii) os métodos de Adams-Moulton não são A-estáveis, mas se comportam melhor em comparação aos métodos de Adams-Bashforth: seus domínios de estabilidade são maiores;
- iii) os métodos θ são A-estáveis para $0 \leq \theta \leq 1/2$;
- iv) note que construímos as regiões de estabilidade do método usando a equação linear $y' = \lambda y$. Comumente, esta região é chamada domínio de estabilidade **linear** do método. Para equações não-lineares, este é ainda um problema em aberto. Algumas ideias novas, como estabilidade algébrica, métodos simpléticos, etc. estão surgindo para atacá-lo (e a “nova” equação modelo parece ser $y'' + \omega^2 \sin y = 0$).

De toda forma, a estabilidade linear nos permite ter uma noção do comportamento dos métodos em um caso particular e nos permite compará-los. Praticamente todos os problemas mais sérios “corriqueiros” de estabilidade numérica são resolvidos com conceitos de estabilidade linear.

Por fim, o conceito de estabilidade de um método numérico é muito útil como ferramenta para estudar a convergência, devido ao seguinte teorema.

Teorema 4.3 (Teorema da Equivalência de Lax). Um método é convergente se, e somente se, ele for consistente e estável.

A semelhança deste teorema com o Teorema da Equivalência de Dahlquist não é mera coincidência: a condição da raiz nada mais é do que uma condição de estabilidade para métodos de passos múltiplos! Além disso, este teorema, que na verdade é uma família de teoremas válidos para EDOs, EDPs, PVIIs e PIVCs, é uma das *masterpieces* da análise numérica. Uma ideia bem grosseira da prova é a seguinte:

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} |y(t_n) - y_n| &= \lim_{h \rightarrow 0} |y(t_n) - \mathcal{Y}_{\text{mét.}} + \mathcal{Y}_{\text{mét.}} - y_n| \\ &\leq \lim_{h \rightarrow 0} |y(t_n) - \mathcal{Y}_{\text{mét.}}| + \lim_{h \rightarrow 0} |\mathcal{Y}_{\text{mét.}} - y_n| \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \varepsilon_n^\ell + \lim_{h \rightarrow 0} |\mathcal{Y}_{\text{mét.}} - y_n| \end{aligned}$$

e ambos os limites irem a zero significa que o método converge, o que é equivalente a pedir que o erro de truncamento local vá a zero (primeiro limite) e que o método seja estável (segundo limite).

EXERCÍCIOS

ESTABILIDADE DE MÉTODOS COMPUTACIONAIS

A. Considere o PVI para a equação linear de primeira ordem $u' = -250u$, $u(0) = 1$, $t \in [0, 1]$.

1. Use método de Runge-Kutta de 4ª ordem com $h = 0.1$ e compare seu resultado com a solução analítica.
2. Use novamente o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, agora com $h = 0.001$ e compare seu resultado com o anterior. O que aconteceu?
3. Use a regra do trapézio com $h = 0.1$. Para tal, use o método de Newton para resolver a equação algébrica resultante. Compare seus resultados.

B. Calcule as regiões de estabilidade linear para os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de 2 passos. Qual destes dois métodos é mais adequado para resolver equações rígidas?

C. Considere o método de Runge-Kutta de 4ª ordem clássico para resolver a equação modelo para estudos de estabilidade de métodos. Mostre que o critério de estabilidade linear para este método é dado por

$$\left| \sum_{k=0}^4 \frac{b^k \lambda^k}{k!} \right| < 1.$$

Posteriormente, mostre que, para $\lambda \in \mathbb{R}$, este critério é equivalente a $-2.79 < h\lambda < 0$ (você vai precisar usar um método de Newton-Raphson para encontrar este resultado). Este método é melhor ou pior que o método de Euler explícito para lidar com equações rígidas?

D. Considere o PVI: $y' = \frac{50}{y} - 50y$, $y(0) = \sqrt{2}$, $t \in \left[0, \frac{1}{2}\right]$.

1. Resolva este problema com o método de Euler explícito, com $h = 0.05$ e compare seu resultado com sua solução analítica. Faça $h = 0.001$ e compare seu resultado com sua solução analítica.
2. Resolva este problema com os métodos de Euler implícito e do trapézio, com $h = 0.05$ e compare seu resultado com sua solução analítica.
3. Valide, numericamente, a ordem dos métodos implícitos utilizados neste exercício.

E. Considere o método de passos múltiplos dado pelo esquema abaixo:

$$y_{n+3} = -\frac{3}{2}y_{n+2} + 3y_{n+1} - \frac{1}{2}y_n + 3hf(t_{n+2}, y_{n+2}).$$

Sem fazer contas, determine se este método pode ser A-estável? Este método é estável? Determine a ordem deste método. Este método é convergente? De que maneiras você pode atestar a sua convergência?

F. [A verdade sobre métodos implícitos.] Considere o PVI dado por

$$y'' + 4y = 0, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0,$$

no intervalo $t \in [0, 2]$. A solução exata deste PVI é $y(t) = \cos(2t)$. Vamos tentar entender um pouco mais por quê métodos implícitos se saem melhor quando lidam com problemas que podem ser potencialmente instáveis numericamente. Note que a equação acima não é rígida, mas é um bom exemplo para evidenciar o *modus operandi* dos métodos implícitos.

1. Resolva a equação acima usando o Método de Euler implícito com $h = 0.01$. Compare seu resultado com a solução analítica e observe que a amplitude do movimento decai significativamente à medida em que t aumenta.
2. Escreva o Método de Euler implícito aplicado a esta equação e obtenha que

$$\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_n \\ z_n \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} z_{n+1} \\ -4y_{n+1} \end{bmatrix}.$$

3. Agora, usando uma série de Taylor centrada em t_n , expanda os termos em t_{n+1} que aparecem do lado direito da expressão acima. Retenha apenas os termos lineares e mostre que:

$$\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_n \\ z_n \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} z_n - 4hy_n \\ -4y_{n+1} - 4hz_n \end{bmatrix}.$$

4. Identificando os termos entre os segundos parênteses do lado direito como as componentes da função $f(t, y)$ de um PVI, mostre que a expressão acima é equivalente a se usar o Método de Euler explícito para resolver o problema

$$y'' + 4hy' + 4y = 0, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0.$$

Note, portanto, que podemos interpretar isto como o Método de Euler implícito *introduzindo* no Método de Euler explícito um *amortecimento numérico*, que depende de h . Este amortecimento ajuda a combater as potenciais instabilidades que podem aparecer em algumas equações. Portanto, sempre que usar um método implícito, você deve se lembrar que há um amortecimento natural da solução trazido pelo método e, para encontrar bons resultados, talvez seja necessário escolher h pequenos, mas não tão pequenos quanto os impostos pela instabilidade numérica!

5. Resolva o PVI *amortecido* acima usando o Método de Euler explícito e veja que os resultados são idênticos aos obtidos pelo Método de Euler implícito. Compare, igualmente, seus resultados

com a solução exata deste PVI amortecido,

$$y(t) = e^{-2bt} \cos\left(t\sqrt{4 - b^2}\right).$$

6. Resolva o PVI original com o Método de Euler implícito para $h = 0.001$ e veja o que acontece quando o passo de tempo é diminuído. Era o que você esperaria?

PROBLEMAS DE VALOR DE CONTORNO

Até o momento, estudamos métodos numéricos para problemas de valor inicial (PVI): dada uma equação $y' = f(t, y(t))$, uma condição $y(t_0) = y_0$ era conhecida e a integração da EDO era feita a partir deste ponto em diante, ou seja, para $t \geq t_0$. Agora, vamos estudar um método numérico para outro tipo de problema: dada uma equação $y'(x) = f(x, y(x))$, temos um conjunto de n condições impostas em m pontos do intervalo $[a, b]$, isto é

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) \\ g(y(x_1), y(x_2), \dots, y(x_m)) = 0. \end{cases}$$

Este será o nosso PVC (problema de valor de contorno) mais geral. Cada uma das n condições pode ser uma função não-linear envolvendo os valores de y em até m pontos $x_i \in [a, b]$, $i = 1, 2, \dots, m$. O caso mais comum de PVC é o problema de dois pontos, $m = 2$, como, por exemplo, o problema de uma viga em flexão ou de um cabo elétrico em suspensão.

Se o sistema for composto por n equações, então teremos n constantes de integração e, portanto, precisamos especificar n condições de contorno. Se um número menor que n de condições for especifica, o problema é subdeterminado e precisamos formular mais condições para completar as n condições de contorno; se um número maior que n de condições for especificado, o problema é sobre-determinado e só encontraremos solução se o modelo físico no qual o problema se baseia for consistente, ou seja, algumas condições precisam ser redundantes.

Ao contrários dos PVI, a questão de existência e unicidade de soluções para PVCs é bem mais delicada e, em geral, depende das especificidades das equações. É relativamente comum que problemas não tenham soluções, e é mais comum ainda que as soluções não sejam únicas. Assim, as questões de existência e unicidade são normalmente tratadas *a posteriori*, uma vez determinadas (ou não) as soluções.

Vamos abordar apenas PVCs de 2 pontos devido a sua relevância física. Uma maneira visual de identificar as condições contorno é utilizar uma **tabela de ocorrência**: considere um PVC de 2 pontos com condições de contorno associadas aos pontos $x_1 = a$ e $x_2 = b$. Portanto, nas n relações $g(y_1(a), y_1(b), y_2(a), y_2(b), \dots, y_n(a), y_n(b)) = 0$, temos

Tabela 5.1 Tabela de ocorrência de um PVC.

	$y_1(a)$	$y_2(a)$	$y_3(a)$	\cdots	$y_n(a)$	$y_1(b)$	$y_2(b)$	$y_3(b)$	\cdots	$y_n(b)$
g_1	\times	\times			\times					
g_2		\times	\times			\times				\times
g_3	\times		\times		\times	\times	\times	\times	\cdots	\times
\vdots										
g_n							\times	\times		

O \times representa que a condição g_i envolve o valor $y_k(a)$ ou $y_l(b)$. Veja que esta tabela pode também representar um PVI se ela for, por exemplo, da forma

Tabela 5.2 Tabela de ocorrência de um PVI.

\times									
	\times								
		\times							
			\times						
				\times					

Em cada uma das 5 condições, apenas $y_i(a)$ aparece! Este é o PVI clássico (se as relações forem lineares). De maneira geral, um PVI pode ter a tabela

Tabela 5.3 Tabela de ocorrência de um PVI generalizado.

\times	\times	\times	\times	\times					
\times	\times	\times	\times	\times					
\times	\times	\times	\times	\times					
\times	\times	\times	\times	\times					
\times	\times	\times	\times	\times					

Neste caso, as condições iniciais devem ser determinadas resolvendo um sistema (não-linear) antes de iniciar a integração das EDOs.

Na Tabela 5.1, as condições g_2 e g_3 são chamadas **mistas** e não são muito comuns em problemas práticos. As condições g_1 e g_n são tidas **separadas**. Vamos focar apenas em problemas com condições separadas.

Dizemos que um problema com condições separadas no ponto $x = a$ é de ordem p quando neste ponto faltarem p condições que dependam $y(a)$. Um problema de ordem p em $x = a$ gera um problema de ordem $n - p$ em $x = b$.

Por exemplo, considere o PVC descrito pela seguinte tabela de ocorrência.

X		X		X															
	X	X	X																
X						X													
X		X		X															
							X	X					X						
									X	X				X					

Em $x = a$, temos um problema de ordem 2 porque faltam duas equações envolvendo $y(a)$. Por outro lado, o problema é de ordem 4 em $x = b$ porque faltam 4 equações envolvendo $y(b)$.

A ordem do problema em cada ponto será crucial para determinarmos quantas condições precisaremos “chutar” para converter o PVC em um PVI (e poder integrá-lo como fizemos até o momento).

Existem várias técnicas para integrar PVCs numericamente. A técnica mais comum talvez seja a de diferenças finitas, em que as derivadas aparecendo na EDO são discretizadas usando diferenças finitas. Este procedimento transforma o problema diferencial em um sistema (não-) linear a ser resolvido. Métodos variacionais (como o método de Rayleigh-Ritz ou de Galerkin) também podem ser usados: neste caso o problema é reformulado de maneira a minimizar um funcional e o aspecto numérico aparece na construção da solução a partir de combinações lineares de funções “base”. Um terceiro método é o uso de soluções fundamentais (funções de Green) para construir a solução “interna” a partir das fronteiras. No nosso caso, vamos usar uma técnica que se baseia nos métodos que vimos para PVIs: o **método do tiro**. Este método consiste em transformar o PVC em um PVI e, de maneira iterativa, ajustar o PVI para que as condições de contorno (e, portanto, o PVC) sejam satisfeitas.

5.1 Problemas lineares (2 pontos, EDOs de 2ª ordem)

Suponha que tenhamos uma EDO linear de 2ª ordem

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta.$$

Este tipo de equação aparece bastante em aplicações: problemas potenciais, cálculo de vigas, etc. Por isso, vamos dedicar uma atenção especial a ele. Apesar de ser linear, não é possível garantir existência e unicidade de soluções no caso geral. Sabemos que para p, q, r contínuas em $[a, b]$ e $q > 0$ em $[a, b]$, a solução existe e é única. Do contrário, precisamos fazer um estudo caso a caso (em geral, *a posteriori*).

Vamos nos utilizar da linearidade desta equação para resolver este PVC. Suponha que y_p seja uma solução do problema para um determinado PVI e que y_h seja solução do problema homogêneo (i.e., $r \equiv 0$) para o mesmo PVI. Assim,

$$y(x) = \lambda_1 y_h(x) + \lambda_2 y_p(x), \quad \lambda_{1,2} \in \mathbb{R}$$

é solução da EDO para um outro PVI. De fato, substituindo na equação obtemos

$$\lambda_1 (y_h'' - p y_h' - q y_h) + \lambda_2 (y_p'' - p y_p' - q y_p) = r \iff \lambda_2 (y_p'' - p y_p' - q y_p) = r \iff \lambda_2 = 1.$$

Então, com $\lambda_2 = 1$ podemos construir uma solução de um PVI de modo que ela também seja solução do PVC original. Para tanto, devemos escolher adequadamente λ_1 e os PVI's de cada uma das equações. Suponha que, para o problema não-homogêneo, tenhamos

$$y_p'' = py_p' + qy_p + r, y_p(a) = \alpha, y_p'(a) = 0.$$

Daí, $y(x) = \lambda_1 y_b(x) + y_p(x)$ é tal que $y(a) = \alpha$ só se $y_b(a) = 0$ (com $\lambda_1 \neq 0$). Agora, impondo $y(b) = \beta$, segue que

$$\lambda_1 = \frac{\beta - y_p(b)}{y_b(b)}.$$

Com isso, a combinação

$$y(x) = y_p(x) + \frac{\beta - y_p(b)}{y_b(b)} y_b(x)$$

satisfaz o PVC original! Observe que esta solução foi construída a partir dos PVI's

$$\begin{aligned} y_p'' &= py_p' + qy_p + r, y_p(a) = \alpha, y_p'(a) = 0 \\ y_b'' &= py_b' + qy_b, y_b(a) = 0, y_b'(a) = \text{qualquer!} \end{aligned}$$

Portanto, o valor de y_b' não intervém na solução do PVC e podemos chutar qualquer valor (não-nulo) para ele! Assim, nosso “algoritmo” para resolver um PVC linear é

1. Dado

$$y'' = py' + qy + r, y(a) = \alpha, y(b) = \beta,$$

construir os PVI's auxiliares

$$\begin{aligned} y_p'' &= py_p' + qy_p + r, y_p(a) = \alpha, y_p'(a) = 0 \\ y_b'' &= py_b' + qy_b, y_b(a) = 0, y_b'(a) = \eta \neq 0; \end{aligned}$$

2. integrar os dois PVI's em $[a, b]$;

3. construir a solução final do PVC como

$$y(x) = y_p(x) + \frac{\beta - y_p(b)}{y_b(b)} y_b(x).$$

Observação 5.1. É importante ressaltar que

1. temos de resolver dois PVI's para encontrar a solução do PVC original, o que é mais custoso!
2. se o PVC original for homogêneo, é necessário usar um PVI não-homogêneo qualquer para ser resolvido pelo algoritmo (por exemplo, com $r \equiv 1$).

3. o cálculo de λ_1 pode ser problemático se $|\beta| \ll |\gamma_p(b)|$, porque neste caso

$$\frac{\beta - \gamma_p(b)}{\gamma_b(b)} \approx -\frac{\gamma_p(b)}{\gamma_b(b)}.$$

Esta situação pode aparecer em equações cujas soluções tenham forte crescimento de a até b . Uma maneira de remediar este problema é reescrever o algoritmo para que a integração seja feita de b até a , usando $b < 0$. Se isto não resolver o problema, é necessário usar outra técnica!

4. Este método encontra a solução do PVC em uma tentativa: não há processo iterativo para encontrarmos os PVIs adequados. Isto é uma consequência direta da linearidade da equação, e não se mantém para PVC não-lineares, como veremos adiante.

5.2 Problemas não-lineares (2 pontos, EDOs de 2ª ordem)

Vamos resolver o problema não-linear geral dado por

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ \alpha_0 y(a) + \beta_0 y'(a) = \gamma_0 \\ \alpha_1 y(b) + \beta_1 y'(b) = \gamma_1 \end{cases} \iff \begin{cases} y' = z, \alpha_0 y(a) + \beta_0 z(a) = \gamma_0 \\ z' = f(x, y, z), \alpha_1 y(b) + \beta_1 z(b) = \gamma_1. \end{cases}$$

Para transformar este problema em um PVI, precisamos chutar uma condição em a . Podemos tomar

$$y(a) = \eta \implies z(a) = \frac{\gamma_0 - \alpha_0 \eta}{\beta_0}.$$

Com isso, já temos todas as condições para resolver o PVI acima. Daí, usando qualquer um dos métodos que vimos, integramos este PVI em $[a, b]$ e obtemos $y(b, \eta)$ e $z(b, \eta)$, que dependerão da escolha de η . Como η foi um chute, certamente cometeremos erros nos valores de y e z em $x = b$, que pode ser quantificado pelo **resíduo**

$$\varphi(\eta) = \alpha_1 y(b, \eta) + \beta_1 z(b, \eta) - \gamma_1.$$

Queremos, então, encontrar η^* tal que $\varphi(\eta^*) = 0$, ou seja, encontrar a raiz de $\varphi(\eta)$! Uma primeira opção, que tem garantia de sucesso, é usar o método da bisseção. Uma segunda opção, mais atraente no caso da computação de f ser muito cara, é usar o método de Newton-Raphson:

$$\eta_{k+1} = \eta_k - \frac{\varphi(\eta_k)}{\varphi'(\eta_k)}.$$

Precisamos, então, determinar φ' de alguma forma. Observe que como a solução da EDO depende de y , podemos dizer que $y = f(x, y, y', \eta)$ e, daí, temos

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{d^2 y}{dx^2} \right) = \frac{\partial f}{\partial \eta} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial f}{\partial y'} \cdot \frac{\partial y'}{\partial \eta},$$

ou seja,

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial f}{\partial y'} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right).$$

Chamando $P = \partial y / \partial \eta$, segue que

$$P'' = f_y P + f_{y'} P'.$$

Podemos construir um PVI para esta EDO notando que

$$P(a, \eta) = \left. \frac{\partial y}{\partial \eta} \right|_{x=a} = \frac{\partial \eta}{\partial \eta} = 1$$

$$P'(a, \eta) = \left. \frac{d}{dx} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right|_{x=a} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\gamma_0 - \alpha_0 \eta}{\beta_0} \right) = -\frac{\alpha_0}{\beta_0}.$$

Agora, olhamos para a derivada do resíduo:

$$\phi'(\eta) = \alpha_1 \left. \frac{\partial y}{\partial \eta} \right|_{x=b} + \beta_1 \left. \frac{d}{dx} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right|_{x=b} - \gamma_1 = \alpha_1 P(b, \eta) + \beta_1 P'(b, \eta).$$

Desta forma, conhecendo P podemos determinar ϕ' e usar o método de Newton-Raphson para encontrar a raiz do resíduo.

Algoritmo 1 Método do Tiro

```

1:  $k \leftarrow 0$ 
2:  $y(a) \leftarrow \eta^0$  ▷ chute inicial
3:  $TOL \leftarrow r$  ▷ tolerância (e.g.,  $10^{-6}$ )
4:  $erro \leftarrow E$  ▷ erro inicial (e.g.,  $10^3$ )
5: enquanto  $erro > TOL$  faça
6:    $y'(a) \leftarrow \frac{\gamma_0 - \alpha_0 \eta^k}{\beta_0}$ 
7:   resolva o PVI  $y'' = f(x, y, y')$ 
8:   resolva o PVI  $P'' = f_y P + f_{y'} P'$ 
9:   calcule  $\phi(\eta^k) = \alpha_1 y(b, \eta^k) + \beta_1 y'(b, \eta^k)$ 
10:  calcule  $\phi'(\eta^k) = \alpha_1 P(b, \eta^k) + \beta_1 P'(b, \eta^k)$ 
11:   $\eta^{k+1} \leftarrow \eta^k - \frac{\phi(\eta^k)}{\phi'(\eta^k)}$ 
12:   $erro \leftarrow \left| \phi(\eta(b, \eta^k)) \right|$ 
13:   $k \leftarrow k + 1$ 
14: fim enquanto
  
```

Observação 5.2. Note que

1. usar o método de Newton-Raphson para encontrar a raiz do resíduo é mais indicado para problemas em que as integrações dos PVI's sejam caras e se deseje minimizar a quantidade de iterações do método. Deve-se tomar cuidado no chute $y(a) = \eta$!

2. o caso mais comum destes problemas é ter condições de contorno mais simples, do tipo $y(a) = \gamma_0$, $y(b) = \gamma_1$. Neste caso, não é necessário chutar $y(a)$; chutamos apenas $y'(a) = \eta$. Daí, as condições iniciais para o problema em P são $P(a, \eta) = 0$ e $P'(a, \eta) = 1$.
3. o nome do método vem do tipo de problema citado no item anterior: conhecidos os “níveis” $y(a) = \gamma_0$ e $y(b) = \gamma_1$, precisamos escolher adequadamente a inclinação do “canhão” para que o tiro atinja $y(b) = \gamma_1$.

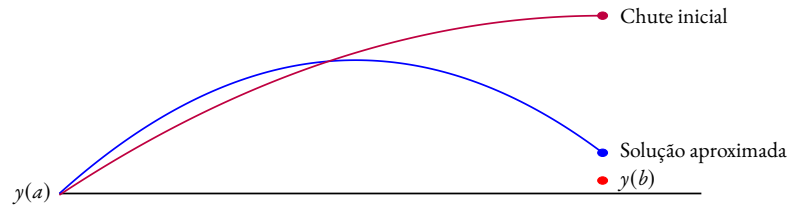


Figura 5.1 Ilustração do método do tiro.

4. é de suma importância verificar o sentido da integração da equação, pois é possível que em uma das direções haja instabilidade (principalmente se houver exponenciais na solução).

5.3 Equações de ordem superior (2 pontos)

Neste caso, vamos considerar o sistema de EDOs

$$y'_i = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

com as condições de contorno

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} y_j(a) = c_i, \quad i = 1, 2, \dots, r,$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} y_j(b) = d_i, \quad i = 1, 2, \dots, n - r.$$

Observe que temos um total de n condições de contorno (separadas) para um sistema de n equações. Para transformar este PVC em um PVI, precisamos de n condições iniciais em $x = a$. Como temos r condições em $x = a$, precisamos chutar $n - r$ condições:

$$y_1(a) = \eta_1, \quad y_2(a) = \eta_2, \quad \dots, \quad y_{n-r}(a) = \eta_{n-r}$$

e, com isto, podemos voltar às r condições de contorno em $x = a$:

$$\begin{cases} a_{11}\eta_1 + a_{12}\eta_2 + \cdots + a_{1,n-r}\eta_{n-r} + a_{1,n-r+1}y_{n-r+1}(a) + \cdots + a_{1n}y_n(a) = c_1 \\ a_{21}\eta_1 + a_{22}\eta_2 + \cdots + a_{2,n-r}\eta_{n-r} + a_{2,n-r+1}y_{n-r+1}(a) + \cdots + a_{2n}y_n(a) = c_2 \\ \vdots \\ a_{r1}\eta_1 + a_{r2}\eta_2 + \cdots + a_{r,n-r}\eta_{n-r} + a_{r,n-r+1}y_{n-r+1}(a) + \cdots + a_{rn}y_n(a) = c_r \end{cases}$$

Portanto, resolvendo estas r equações obtemos as r condições iniciais que faltavam em $x = a$. Um problema bem-posto deve sempre levar a um sistema possível e determinado. Caso haja problemas, escolher outros y_i pode resolver o problema.

Integrando o PVI em $[a, b]$, podemos construir $n - r$ resíduos a partir das soluções $y_i(b, \eta)$ e das condições de contorno em $x = b$:

$$\varphi_i(\eta) = \sum_{j=1}^n b_{ij}y_j(b, \eta) - d_i, \quad i = 1, 2, \dots, n - r.$$

Para encontrarmos o zero η^* desta equação, podemos usar o método de Newton-Raphson para sistemas:

$$\eta_{m+1} = \eta_m - [\nabla \varphi(\eta_m)]^{-1} \varphi(\eta_m),$$

sendo $\nabla \varphi$ o jacobiano dos resíduos:

$$\nabla \varphi = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \eta_1} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial \eta_{n-r}} \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial \eta_1} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial \varphi_2}{\partial \eta_{n-r}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \varphi_{n-r}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial \varphi_{n-r}}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial \varphi_{n-r}}{\partial \eta_{n-r}} \end{bmatrix}$$

Para construir este jacobiano, vamos seguir a mesma estratégia da seção anterior:

$$\begin{aligned} y'_i = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n) &\iff \frac{\partial y'_i}{\partial \eta_k} = \frac{\partial f}{\partial \eta_k} \\ &\iff \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial y_i}{\partial \eta_k} \right) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial y_j} \cdot \frac{\partial y_j}{\partial \eta_k} \\ &\iff P'_{ik} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial y_j} P_{kj}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad k = 1, 2, \dots, n - r. \end{aligned}$$

As condições iniciais para este sistema de $n(n - r)$ equações são

$$P_{ik}(a) = \delta_{ik}, \quad i, k = 1, 2, \dots, n - r$$

para as $(n - r)^2$ condições que foram chutadas. As demais $r(n - r)$ condições devem ser encontradas do sistema que determinará as r condições iniciais que faltam:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_k} [a_{l,n-r+1}y_{n-r+1}(a) + a_{l,n-r+2}y_{n-r+2}(a) + \cdots + a_{ln}y_n(a)] = \frac{\partial}{\partial \eta_k} \left[c_k - \sum_l \right]$$

$$\iff a_{l,n-r+1}P_{n-r+1,k}(a) + a_{l,n-r+2}P_{n-r+2,k}(a) + \cdots + a_{ln}P_{n,k}(a) = -\frac{\partial \sum_l}{\partial \eta_k},$$

com $l = 1, 2, \dots, r, k = 1, 2, \dots, n - r$ e $\frac{\partial \sum_l}{\partial \eta_k} = a_{lk}$. Portanto, agora temos um sistema com $r(n - r)$ equações e $r(n - r)$ incógnitas P_{jk} a resolver.

Integrando as equações para os P 's, podemos determinar $P_{jk}(b)$ e, assim,

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta_k} = \sum_{j=1}^n b_{ij}P_{jk}(b)$$

e conseguimos construir o jacobiano dos resíduos. Assim, o algoritmo para resolver o PVC neste caso é

Algoritmo 2 Método do Tiro

- 1: $m \leftarrow 0$
 - 2: chute $n - r$ condições iniciais η ▷ chute inicial
 - 3: $\text{TOL} \leftarrow r$ ▷ tolerância (e.g., 10^{-6})
 - 4: erro $\leftarrow E$ ▷ erro inicial (e.g., 10^3)
 - 5: **enquanto** erro > TOL **faça**
 - 6: encontre r condições iniciais restantes ▷ sistema linear
 - 7: determine as $(n - r)^2$ condições iniciais $P_{ik}(a) = \delta_{ik}$
 - 8: encontre as $r(n - r)$ condições iniciais restantes $P_{ik}(a)$ ▷ sistema linear
 - 9: resolva o PVI $y'_i = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n), i = 1, 2, \dots, n$
 - 10: resolva o PVI $P'_{ik} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial y_j} P_{kj}, i = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots, n - r$
 - 11: construa os resíduos $\varphi_i(\eta_m)$ e o jacobiano $\partial \varphi_i / \partial \eta_k = \sum_{j=1}^n b_{ij}P_{jk}(b, \eta_m)$
 - 12: encontre a solução de $\nabla \varphi(\eta_m) \Psi_m = \varphi(\eta_m)$ ▷ sistema linear
 - 13: $\eta_{m+1} \leftarrow \eta_m - \Psi_m$
 - 14: erro $\leftarrow |\varphi(y(b, \eta_m))|$
 - 15: $m \leftarrow m + 1$
 - 16: **fim enquanto**
-

EXERCÍCIOS

MÉTODO DO TIRO PARA PVC

A. O problema de valor de contorno

$$y'' = 4(y - x), \quad y(0) = 0, \quad y(1) = 2, \quad x \in [0, 1],$$

tem solução exata dada por $y(x) = x + e^2(e^4 - 1)^{-1}(e^{2x} - e^{-2x})$. Use o método do tiro linear com o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem para resolver este problema com $h = 0.1$ e $h = 0.01$. Compare seu resultado com a solução exata. O que aconteceria se você usasse o Método de Euler?

B. Considere o problema de valor de contorno

$$y'' = 100y, \quad y(0) = 0, \quad y(1) = e^{-10}, \quad x \in [0, 1].$$

Note que este é um problema homogêneo. Use o método do tiro linear com o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem para resolver este problema com $h = 0.1$ e $h = 0.01$. Resolva este problema escolhendo, para construir um PVI auxiliar não-homogêneo, $r(x) = 1$ e $r(x) = x$. Compare seus resultados com a solução exata do PVC (encontre-a!). O que acontece?

C. Resolva o PVC não-linear

$$y'' + y'^2 + y = \log(x), \quad y(1) = 0, \quad y(2) = \log(2), \quad x \in [1, 2],$$

usando o método do tiro com o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem. A solução exata deste problema é $y(x) = \log(x)$. Compare seus resultados numéricos com a solução exata.

D. Considere a equação

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = y \exp \left[\frac{\gamma \beta (1 - y)}{1 + \beta (1 - y)} \right],$$

para a qual o seguinte PVC é formulado:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad y(1) = 1.$$

1. Mostre que o PVI auxiliar a ser resolvido é dado por:

$$F'' = F \exp \left[\frac{\gamma \beta (1 - y)}{1 + \beta (1 - y)} \right] \left[1 - \frac{\gamma \beta y}{[1 + \beta (1 - y)]^2} \right], \quad F(0) = 1, \quad F'(0) = 0.$$

2. Para $\gamma = 20$ e $\beta = 0.1$, mostre que $y(0) = 0.374533$.

E*. Considere o seguinte problema de valor de contorno dado pelas equações diferenciais

$$y''' = -1.55yy'' + 0.1y'^2 + 1 - z^2 + 0.2y' \quad z'' = -1.55yz' + 1.1y'z + 0.2(z - 1),$$

e pelas condições de contorno

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 0, \quad z(0) = 0, \quad y'(\infty) = 0, \quad z(\infty) = 1.$$

Estas equações modelam o perfil de velocidade em uma camada limite hidrodinâmica em escoamentos rotativos na presença de campos magnéticos (maiores detalhes podem ser encontrados no link <https://sci-hub.se/https://doi.org/10.1063/1.1711073>). Vamos usar o método do tiro para problemas de ordem superior para encontrar a solução deste PVC.

1. Mostre que este problema pode ser escrito como um sistema de 5 equações de primeira ordem.
2. Construa a tabela de ocorrência das condições de contorno e verifique que elas são todas separadas. Identifique a ordem do problema em cada uma das *extremidades* do intervalo de interesse.
3. Identifique as equações para os resíduos que serão utilizadas para o controle da convergência da solução.
4. Quantos PVI's auxiliares serão necessários para resolver este problema?
5. Usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem para integrar os PVI's associados e o Método de Newton-Raphson para resolver o sistema não-linear resultante, determine a solução deste PVC. Faça um estudo da convergência da solução em termos de todos os parâmetros numéricos que forem necessários. Atenção: um parâmetro crucial de sua solução numérica será determinar o valor de x_∞ tal que as condições de contorno

$$y'(\infty) \approx y'(x_\infty) = 0, \quad z(\infty) \approx z(x_\infty) = 1.$$

Como sugestão, teste valores entre $5 \leq x_\infty \leq 30$.

Bibliografia

- [1] George B. Arfken e Hans J. Weber. *Física Matemática*. 6ª ed. California: Elsevier, 2005. ISBN: 978-04-711-9826-0.
- [2] Mary L. Boas. *Mathematical Methods in the Physical Sciences*. 3ª ed. Massachusetts: John Wiley & Sons, 2006. ISBN: 978-04-711-9826-0.
- [3] William E. Boyce e Richard C. DiPrima. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. 11ª ed. Massachusetts: John Wiley & Sons, 2017. ISBN: 978-11-192-5600-7.
- [4] James W. Brown e Ruel V. Churchill. *Fourier Series and Boundary Value Problems*. 8ª ed. McGraw-Hill Companies, 2011. ISBN: 978-00-780-3597-5.
- [5] Richard L. Burden, J. Douglas Faires e Albert C. Reynolds. *Numerical analysis*. Prindle, Weber & Schmidt, Boston, Mass., 1978, pp. ix+579. ISBN: 0-87150-243-7.
- [6] John C. Butcher. *Numerical methods for ordinary differential equations*. 2nd ed. Wiley, 2008. ISBN: 0470723351; 9780470723357; 9780470753750; 0470753757. URL: libgen.li/file.php?.
- [7] Brice Carnahan, H. A. Luther e James O. Wilkes. *Applied Numerical Methods*. Second. Krieger Pub Co, 1990, p. 604. ISBN: 978-0894644863.
- [8] Lawrence Evan. *Partial Differential Equations*. Vol. 19. American Mathematical Society, 1998. ISBN: 978-08-218-0772-9.
- [9] Djairo Guedes de Figueiredo. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais*. 5ª ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2018. ISBN: 978-85-244-0428-3.
- [10] Juan López Gondar e Rolci Cipolatti. *Iniciação à Física Matemática*. 2ª ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2016. ISBN: 978-85-244-0287-6.
- [11] Arieh Iserles. *A first course in the numerical analysis of differential equations*. Second. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2009, pp. xx+459. ISBN: 978-0-521-73490-5.
- [12] Erwin Kreyszig. *Matemática Superior para Engenharia*. 10ª ed. LTC, 2019.
- [13] Peter J. Olver. *Lecture Notes on Numerical Analysis*. Mai. de 2008.
- [14] James Smith. «Article title». Em: *Journal* 14.6 (mar. de 2013), pp. 1–8.
- [15] Walter Strauss. *Partial Differential Equations: An Introduction*. 2ª ed. John Wiley & Sons, 2007. ISBN: 978-04-700-5456-7.

Índice

- condição da raiz, 33
- condições de ordem, 29
- consistência de um método, 5
- constante de Lipschitz, 2
- convergência de um método, 5
- corretor de Milne, 31
- domínio de estabilidade, 62
- equação
 - de diferenças, 31
- erro
 - de arredondamento, 6
 - de truncamento global, 5
 - de truncamento local, 4
- formulação integral equivalente, 8
- função Lipschitz, 2
- Fórmula
 - de Newton-Côtes, 42
- Fórmulas
 - de Diferenças Atrasadas, 27
- matriz de Runge-Kutta, 49
- matriz de Vandermonde, 19
- Método
 - θ , 11
 - absolutamente estável, 66
 - de Adams, 24
 - Bashforth, 24
 - Bashforth de dois passos, 26
 - Moulton, 26
 - de Crank-Nicolson, 11
 - de Euler, 2
 - implícito, 9
 - melhorado, 35
 - de Nystrom, 51
 - de passos múltiplos, 19
 - de quadratura, 41
 - de Runge-Kutta, 41
 - clássico, 51
 - de Gauss-Legendre, 53
 - explícito, 49
 - implícito, 52
 - de Taylor, 7
 - de segunda ordem, 7
 - do ponto médio, 12
 - explícito, 40
 - do Tiro, 75
 - do trapézio, 11
 - explícito, 10
 - implícito, 9
 - Preditor-Corretor, 34
 - ordem de um método, 5
 - Polinômio
 - Característico, 32
 - de Chebyshev, 45
 - de Hermite, 45
 - de Jacobi, 44
 - de Lagrange, 22
 - de Laguerre, 45
 - de Legendre, 45
 - Interpolador, 20
 - interpolador, 19
 - Primeira barreira de Dahlquist, 34
 - Quadratura
 - Gaussiana, 46
 - razão de rigidez, 61

Segunda barreira de Dahlquist, 66

sistema rígido, 61

tabela de Butcher, 49

tabela de ocorrência, 73

Teorema

da Aproximação de Weierstrass, 22

da Equivalência de Dahlquist, 33

da Equivalência de Lax, 68

de Picard-Lindelöf, 2

do Kernel de Peano, 42

Teoria

de Aproximação, 19