Métodos Computacionais para Equações Diferenciais

Aula 2

Prof.ª Dr.ª Analice Costacurta Brandi

Optativa - Tópicos de Matemática Aplicada
Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"

Sumário

1. Problema de Valor Inicial

2. Solução Numérica de PVI's

3. Estimativas de Erro e Convergência

Problema de Valor Inicial

Um problema de valor inicial (PVI) é um problema de evolução, no qual a informação inicial (conhecida) é propagada para o interior do domínio. Matematicamente, o mais simples dos problemas de valor inicial pode ser apresentado na forma

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

onde $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ é uma função contínua. A função $y = y(x)$ é uma função incógnita e α é o seu valor inicial no ponto a.

Considere o PVI de ordem n

$$\begin{cases} y^{(n)} = f\left(x, y, y', \cdots, y^{(n-1)}\right) \\ y(a) = \alpha_1 \\ y'(a) = \alpha_2 \\ \vdots \\ y^{(n-1)}(a) = \alpha_n \end{cases} . \tag{1.1}$$

Para resolver (1.1), efetiva-se a mudança de variáveis

$$\begin{cases} y_1 = y \\ y_2 = y' \\ \quad \vdots \\ y_n = y^{(n-1)} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = y_3 \\ \quad \vdots \\ y_n' = f\left(x, y, y', \cdots, y^{(n-1)}\right) \end{cases}$$

Fazendo,

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ f\left(x, y, y', \cdots, y^{(n-1)}\right) \end{bmatrix}.$$

Temos: $y' = F$.

$$y(a) = y_a = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}.$$

Note que um ponto importante é a questão da existência e unicidade de solução do PVI para uma equação diferencial, visto que só faz sentido buscar sua solução numérica, ou aproximada, se antes estiver garantida a existência e unicidade de sua solução. No caso de PVI para EDO's esta questão está bem resolvida.

Existência e Unicidade

Condição de Lipschitz

Seja $f(x, y)$ satisfazendo:

1. $f : E \to \mathbb{R}^n$ é contínua, onde $E = \{(x, y) : x \in [a, b], y \in \mathbb{R}^n\}$;
2. $\exists\, L > 0$ tal que $\forall\, x \in [a, b]$ e $y, y^* \in \mathbb{R}^n$, tem-se:

$$|f(x, y) - f(x, y^*)| \leq L\,|y - y^*|.$$

Então $f(x, y)$ é Lipschitz na variável y.

Teorema de Existência e Unicidade

Seja f uma função Lipschitziana em y e α um vetor dado. Então $\exists!\ y(x)$ satisfazendo

i) $y = y(x)$ é contínua e diferenciável em $[a, b]$;

ii) $y'(x) = f(x, y(x))$, $x \in [a, b]$;

iii) $y(a) = \alpha$.

- **Definição (Passo simples):** Um método é de passo simples quando a aproximação y_{i+1} for calculada somente a partir do valor y_i do passo anterior. Sendo ϕ a função incremento. Um método de passo simples é definido na forma

$$y_{i+1} = y_i + h\,\phi(x_i, y_i, h).$$

- **Definição (Passo múltiplo):** Sejam os p valores y_i, y_{i-1}, y_{i-2}, ..., y_{i-p+1} previamente calculados por algum método. Um método é de passo múltiplo se estes p valores $y_i, y_{i-1}, y_{i-2}, \ldots, y_{i-p+1}$ forem utilizados para calcular y_{i+1}, para $i = p-1, p, p+1$, ..., $m-1$.

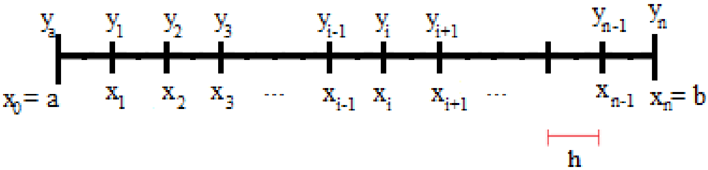
- **Definição (Erro local):** Supondo que o valor calculado por um método de passo k seja exato, isto é, $y_{i+j} = y(x_{i+j})$ para $j = 0, 1, \ldots, k-1$, então o erro local em x_{i+k} é definido como

$$e_{i+k} = y(x_{i+k}) - y_{i+k}.$$

Considere o PVI

$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(a) = y_a \end{cases} \quad \text{“}f \text{ não linear em geral e } x \in [a,b]\text{”} \qquad (2.1)$$

O primeiro passo é dividir o intervalo $[a, b]$ em N subintervalos iguais, cada um de comprimento h, definindo uma malha.



$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \cdots, N, \text{ onde } h = \frac{b-a}{N}.$$

O primeiro método para solução aproximada de PVI's que trataremos é o método de Euler Explícito que utiliza como base a fórmula progressiva para aproximação da primeira derivada.

Sejam $y_i \approx y(x_i)$ aproximações para $y(x_i)$, $i = 0, 1, \cdots, N$. Em cada um dos pontos aproximamos a equação diferencial (2.1) como abaixo

- **Diferença Avançada:**

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad f(x_i, y_i) = f_i, \quad ELT = -\frac{h}{2} y''(\xi_i),$$

sendo que $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$. Substituindo na EDO, temos

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f_i \quad \Rightarrow \quad \underbrace{y_{i+1} = y_i + hf_i,}_{\textbf{Euler Explícito}} \quad i = 0, 1, \cdots, N-1.$$

Perceba que o valor de y_{i+1} é calculado explicitamente em função de y_i, mesmo quando a função f é não-linear.

Agora, quando aproximamos a primeira derivada por diferenças atrasadas, obtemos

- **Diferença Atrasada:**

$$y'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}, \quad f(x_i, y_i) = f_i, \quad ELT = \frac{h}{2} y''(\xi_i),$$

sendo que $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$. Substituindo na EDO, temos

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h} = f_i \quad \Rightarrow \quad y_i = y_{i-1} + hf_i \quad i = 1, 2 \cdots, N.$$

Ou ainda, $\underbrace{y_{i+1} = y_i + hf_{i+1},}_{\textbf{Euler Implícito}} \quad i = 0, 1 \cdots, N-1.$

Esse método é chamado de Método de Euler Implícito. Note que se f for uma função não-linear teremos que o vetor y_{i+1} será definido implicitamente e, portanto, para obtê-lo deve-se utilizar um método eficiente para a solução de sistemas de equações algébricas não-lineares, como por exemplo, o método de Newton. A comparação entre um método explícito e outro implícito é que em geral o método implícito é mais estável, mas exige um passo h menor para se obter uma boa aproximação da solução.

Exercícios

1. Determine as expressões para Euler Explícito e Implícito dos PVIs abaixo

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

      Solução exata: $y(x) = x - 1 + 2e^{-x}$.

   b) $\begin{cases} y' = -2xy, & x \in [-2.5, 2.5]. \\ y(-2.5) = e^{-6.25}. \end{cases}$

      Solução exata: $y(x) = e^{-x^2}$.

2. Faça um programa e plote o gráfico comparando a solução exata com as soluções aproximadas (do exercício anterior). Considere $h = 0.1$. Teste a diferença centrada.

Respostas dos Exercícios Anteriores

1. a) **Euler Explícito:** $y_{i+1} = (1-h)y_i + hx_i$;
   Euler Implícito: $y_{i+1} = \dfrac{y_i + hx_{i+1}}{1+h}$.

   b) **Euler Explícito:** $y_{i+1} = y_i(1-2hx_i)$;
   Euler Implícito: $y_{i+1} = \dfrac{y_i}{1+2hx_{i+1}}$.

2. a) **Diferença Centrada:** $y_{i+1} = 2h(x_i - y_i) + y_{i-1}$;
   Programa `Ex1_MetEuler`.

   b) **Diferença Centrada:** $y_{i+1} = -4hx_iy_i + y_{i-1}$;
   Programa `Ex2_MetEuler`.

Uma outra maneira de resolver o PVI é considerarmos o **Método dos Trapézios**, também conhecido como Regra dos Trapézios, que consiste em uma combinação linear (média aritmética) dos métodos de Euler Explícito e Implícito, afim de que os erros se cancelem e se tenha, portanto uma melhor aproximação.

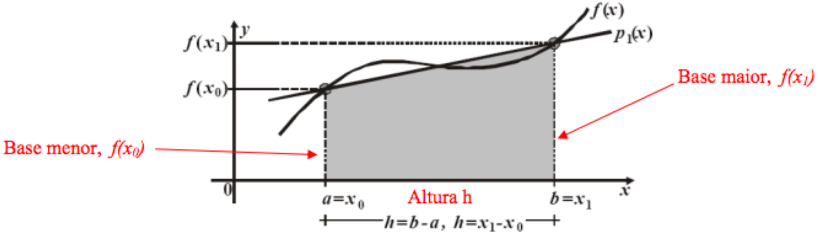
Integrando a equação (2.1) no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, ou seja,

$$y' = f(x,y) \quad \Rightarrow \quad \int_{x_i}^{x_{i+1}} y'\,dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx, \quad \text{então:}$$

$$y\Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx \quad \Rightarrow \quad y_{i+1} - y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx. \tag{2.2}$$

A ideia da Regra do Trapézio é aproximar a função $f(x)$ por um polinômio de ordem 1 (reta). Temos que, nessa aproximação a integral da função $f(x)$ pode ser aproximada pela área de um trapézio, como na figura abaixo:



Usando a fórmula de Lagrange para expressar o polinômio interpolador de ordem 1, $p_1(x)$, que interpola $f(x)$ nos pontos x_0 e x_1, temos:

$$p_1(x) = f(x_0)\, L_0(x) + f(x_1)\, L_1(x),$$

com

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \quad \text{e} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Fazendo $h = \dfrac{x_1 - x_0}{n}$, com $n = 1$ (n é o número de subdivisões do intervalo $[x_0, x_1]$) e substituindo os fatores de Lagrange no polinômio escrevemos assim:

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{\underbrace{x_0 - x_1}_{-h}}\, f(x_0) + \frac{x - x_0}{\underbrace{x_1 - x_0}_{h}}\, f(x_1).$$

Pela nossa aproximação, temos então que a integral da função $f(x)$ será escrita por

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_1} p_1(x)\,dx =$$

$$= \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{x - x_1}{-h} f(x_0) + \frac{x - x_0}{h} f(x_1) \right] dx = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)].$$

Resumindo:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)].$$

Aproximamos a integral da equação (2.2) pela fórmula dos trapézios, então

$$\underbrace{y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f_i + f_{i+1}],}_{\textbf{Método dos Trapézios}} \quad i = 0, 1, ..., N-1. \tag{2.3}$$

O método dos Trapézios é implícito e tem erro na ordem de h^2. Este método é mais preciso que ambos os outros anterios.

Seja $y(x_n)$ a solução exata do PVI (2.1) no ponto x_n e y_n uma aproximação obtida por um método numérico para essa solução.

- **Erro Global:** O erro global em x_n é dado por

$$e_n = y(x_n) - y_n.$$

A análise do erro global nos permite estabelecer a convergência de um método.

- **Erro de Truncamento:** Definimos o erro numérico como

$$e_n = y_n - y(x_n), \tag{3.1}$$

em que $y(x_n)$ é a solução exata em x_n e y_n é a solução aproximada através do método numérico.

- A seguir analisaremos os erros do Método de Euler.

Admitindo que existam as derivadas aproximadas, podemos expandir $y(x_{n+1})$ para $x = x_n$ usando o Teorema de Taylor com resto:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(\xi), \quad x_n \le \xi \le x_{n+1}, \tag{3.2}$$

e, ainda, utilizando a equação diferencial em série de Taylor temos

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\,f(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2}y''(\xi). \tag{3.3}$$

Subtraindo (3.3) do método de Euler explícito,

$$y_{n+1} = y_n + h\,f(x_n, y_n), \quad \text{temos}$$

$$\underbrace{y_{n+1} - y(x_{n+1})}_{e_{n+1}} = \underbrace{y_n - y(x_n)}_{e_n} + h\left[f(x_n, y_n) - f(x_n, y(x_n))\right] + O(h^2). \tag{3.4}$$

Assim, substituindo pela equação (3.1) temos

$$e_{n+1} = e_n + h\left[f(x_n, y_n) - f(x_n, y(x_n))\right] + O(h^2). \qquad (3.5)$$

Lembrando a condição de Lipschitz em f, temos:

Condição de Lipschitz

Seja $f(x, y)$ satisfazendo:

1. $f : E \to \mathbb{R}^n$ é contínua, onde $E = \{(x, y) : x \in [a, b], y \in \mathbb{R}^n\}$;
2. $\exists\, L > 0$ tal que $\forall\, x \in [a, b]$ e $y, y^* \in \mathbb{R}^n$, tem-se:

$$|f(x, y) - f(x, y^*)| \leq L\,|y - y^*|.$$

Então $f(x, y)$ é Lipschitz na variável y.

Voltando a equação (3.5) e usando a condição de Lipschitz, temos

$$\begin{aligned}
||e_{n+1}|| &\leq ||e_n|| + h\,||f(x_n, y_n) - f(x_n, y(x_n))|| + ch^2 \\
&\leq ||e_n|| + h\,L\,||y_n - y(x_n)|| + ch^2 \\
&\leq ||e_n|| + h\,L\,||e_n|| + ch^2 \\
&\leq (1 + h\,L)||e_n|| + ch^2.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$||e_{n+1}|| \leq (1 + h\,L)||e_n|| + ch^2. \tag{3.6}$$

- **Erro de Truncamento Local:** é o erro cometido em uma iteração do método numérico supondo que a solução exata é conhecida no passo anterior.

  Assim, supondo que a solução é exata em x_n, obtemos que o ETL é
  $$ETL_{Euler} = \frac{h^2}{2}||y''(x_n)|| + O(h^3).$$

- **Erro de Truncamento Global:** é o erro cometido durante várias iterações do método numérico.

Voltando a equação (3.6) e seja $T = x_{n+1} - x_0 = h(n+1)$, temois dois casos:

- Se L=0, então:

$$\begin{aligned}
||e_{n+1}|| &\leq ||e_n|| + ch^2 \\
&\leq ||e_{n-1}|| + ch^2 + ch^2 \\
&\leq ||e_{n-2}|| + ch^2 + ch^2 + ch^2 \\
&\vdots \\
&\leq ||e_0|| + (n+1)ch^2 \\
&\leq ||e_0|| + Tch.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$||e_{n+1}|| \leq ||e_0|| + Tch. \tag{3.7}$$

- Se $L \neq 0$, então:

$$
\begin{aligned}
||e_{n+1}|| &\leq (1 + h\,L)||e_n|| + ch^2 \\
||e_{n+1}|| + \frac{ch}{L} &\leq (1 + h\,L)||e_n|| + \frac{ch}{L} + ch^2 \\
&\leq (1 + h\,L)||e_n|| + \frac{ch + ch^2 L}{L} \\
&\leq (1 + h\,L)||e_n|| + \frac{(1 + h\,L)ch}{L} \\
&\leq (1 + h\,L)\left(||e_n|| + \frac{ch}{L}\right) \\
&\leq (1 + h\,L)(1 + h\,L)^n\left(||e_0|| + \frac{ch}{L}\right) \\
&\leq (1 + h\,L)^{n+1}\left(||e_0|| + \frac{ch}{L}\right) \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\vdots\\
||e_{n+1}|| + \frac{ch}{L} &\leq (1 + h\,L)^{n+1}\left(||e_0|| + \frac{ch}{L}\right)\\
||e_{n+1}|| + \frac{ch}{L} &\leq \underbrace{e^{(n+1)h\,L}}_{(*)}\left(||e_0|| + \frac{ch}{L}\right)\\
||e_{n+1}|| &\leq e^{(n+1)h\,L}\left(||e_0|| + \frac{ch}{L}\right) - \frac{ch}{L}\\
||e_{n+1}|| &\leq e^{TL}||e_0|| + e^{TL}\frac{ch}{L} - \frac{ch}{L}\\
||e_{n+1}|| &\leq e^{TL}||e_0|| + (e^{TL} - 1)\frac{ch}{L}. \qquad (3.8)
\end{aligned}
$$

$(*)$ $ln(1 + a) \leq a$ e $e^{lnx} = x$.

Supondo que a solução exata é conhecida em x_0, temos $||e_0|| = 0$ e ETG é

$$ETG_{Euler} = O(h).$$

Observação: De um modo geral, se o erro de truncamento local para um determinado método for $O(h^{p+1})$, o seu erro de truncamento global $e_n(h) = y(x_n) - y_n$ será dado por $O(h^p)$, pois, enquanto que $T_{n+1}(h)$ é o erro cometido quando passamos do ponto (x_n, y_n) para o ponto (x_{n+1}, y_{n+1}) o erro de truncamento global $e_n(h)$ é a acumulação dos n erros (de truncamento local) cometidos nas sucessivas passagens desde o ponto (x_0, y_0) até o ponto (x_n, y_n), tendo em conta que $y_0 = y(x_0)$.

- **Convergência:** Um método numérico é convergente se o erro global e_n converge para zero quando $n \to \infty$, de maneira que x_n permanece fixo.

Análise no ponto: $\underbrace{x_n}_{fixo} = a + \underbrace{n}_{\to\infty}\underbrace{h}_{\to 0}$

Na prática para testar a convergência de um método numérico, resolve-se o problema para vários valores decrescentes de h e observa-se a sequência assim obtida se está se aproximando de um número fixo. No entanto, o fato da sequência ser convergente não implica que ela converge para um limite que é a solução da equação diferencial.

- **Consistência:**

Erro de Truncamento Local (ETL): Pode também ser interpretado como um erro cometido no passo atual, sem levar em consideração os erros dos passos anteriores.

Exemplo: Método de Euler

$$y_{i+1} = y_i + h\, f(x_i, y_i) \quad \Rightarrow \quad f(x_i, y_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \tag{3.9}$$

Por outro lado,

$$y(x) = y_i + (x - x_i) y'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2} y''(\xi_i),$$

$$x = x_i + h \quad \Rightarrow \quad x - x_i = h \quad \text{e} \quad x_i + h = x_{i+1}.$$

Assim,

$$y_{i+1} = y_i + h\, y'(x_i) + \frac{h^2}{2}\, y''(\xi_i),$$

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = y'(x_i) + \frac{h}{2}\, y''(\xi_i). \tag{3.10}$$

Substituindo a equação (3.10) em (3.9), temos

$$y'(x_i) + \frac{h}{2}y''(\xi_i) = f(x_i, y_i) \quad \Rightarrow \quad y'(x_i) = f(x_i, y_i) - \frac{h}{2}y''(\xi_i).$$

- Se $h \to 0 \quad \Rightarrow \quad$ a equação de diferenças aproxima-se da equação diferencial $\Rightarrow$ ETL $\to 0$ então o método é consistente.
- Se o erro de truncamento local (ETL) é $O(h^p)$ então o método tem ordem p ou tem ordem de consistência p.

Como o ETL de Euler é de ordem 1 então o método é consistente de ordem 1. Analogamente, o método dos trapézios é consistente de ordem 2, porque seu erro é $O(h^2)$.

Erro Global: ETL + Erro de Arredondamento

A ordem de consistência de um método está relacionada com sua ordem de convergência. E, essa ordem é um indicativo da velocidade de convergência e assim um método com erro $O(h^2)$ deve convergir mais rápido que outro com $O(h)$. Portanto, um método com ordem mais alta, produz aproximações mais precisas, teoricamente.

Zero-Estabilidade

Objetivos: Analisar o comportamento da solução numérica quando $h \to 0$.

Definição: Um método é dito ser zero-estável se as soluções básicas da equação de diferenças associada, tomando $f(x,y) = 0$ são limitadas.

As soluções básicas da equação de diferenças são dadas pelas raízes do polinômio característico a ele associado.

Exemplo: Considere a fórmula do ponto médio, que utiliza 3 pontos:

$$y_{i+1} - y_{i-1} = 2\,h\,f(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \ldots, N-1.$$

Ou ainda,

$$y_{i+2} - y_i = 2\,h\,f(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = 1, 2, \ldots, N-2,$$

tem ordem de consistência 2.

No limite, quando $h \to 0$ devemos ter

$$y_{i+1} - y_{i-1} = 0 \quad \text{ou} \quad y_{i+2} - y_i = 0.$$

Analisando soluções básicas do tipo $e^{\lambda x}$, temos

$$y_i = e^{\lambda x_i} \quad \text{e} \quad y_{i+2} = e^{\lambda x_{i+2}} = e^{\lambda(x_i+2h)} = e^{\lambda x_i + \lambda 2h} = e^{\lambda x_i} e^{\lambda 2h}.$$

Logo,

$$e^{\lambda x_i} e^{\lambda 2h} - e^{\lambda x_i} = 0 \quad \Rightarrow \quad e^{\lambda x_i}(e^{\lambda 2h} - 1) = 0.$$

Fazendo $z = e^{\lambda h}$, obtemos

$$z^2 - 1 = 0 \quad \text{(equação característica)} \quad \Rightarrow \quad z = \pm 1.$$

Para que o erro seja decrescente, temos que se $|z| \leq 1$ então o método é estável.

Teorema (Equivalência de Lax): No PVI para EDO um método baseado em diferenças finitas é convergente se, e somente se, é consistente e zero-estável.

- **Estabilidade:** A estabilidade (h fixo) é importante para problemas que exigem um número muito grande de aplicações repetidas de um método para obter a solução em um dado intervalo. É importante que tenhamos um controle da propagação do erro. A escolha do tamanho h da malha está relacionada à estabilidade do método e é um parâmetro possível para exercer esse controle.

A estabilidade é verificada por meio da aplicação do método à equação teste $y' = \lambda y$.

A seguir é apresentada uma análise da estabilidade para os métodos mais populares:

Euler Explícito: $e_{i+1} - e_i = h\lambda e_i \Rightarrow e_{i+1} = (1 + h\lambda)e_i \Rightarrow$ estabilidade para $-2 \leq h\lambda \leq 0$ **(condicionalmente estável)**

$$|1 + h\lambda| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 + h\lambda \leq 1 \Rightarrow -2 \leq h\lambda \leq 0$$

Euler Implícito: $e_{i+1} - e_i = h\lambda e_{i+1} \Rightarrow e_{i+1} = \dfrac{1}{(1 - h\lambda)} e_i \Rightarrow$ estabilidade para $h\lambda \leq 0$ **(absolutamente estável)**

Trapézio: $e_{i+1} - e_i = \dfrac{h\lambda}{2}(e_{i+1} - e_i) \Rightarrow e_{i+1} = \dfrac{(1 + \frac{h\lambda}{2})}{(1 - \frac{h\lambda}{2})} e_i \Rightarrow$ estabilidade para $h\lambda \leq 0$ **(absolutamente estável)**

Observação: Um método absolutamente estável permite qualquer tamanho de passo h, enquanto um condicionalmente estável impõe restrição ao passo.