

Objetivos Específicos de Aprendizagem

Ao finalizar este Capítulo, você será capaz de:

- Determinar soluções numéricas de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem (Problemas de Valor Inicial – PVI) por métodos de Euler, métodos de Runge-Kutta e Adams-Bashforth;
- Determinar soluções numéricas de PVIs de ordem n pelos métodos apresentados;
- Determinar soluções numéricas de Problemas de Valor no Contorno (PVC) pelo método clássico das tentativas (*shooting*);
- Determinar soluções numéricas de PVCs com uma ou mais condições de contorno desconhecida(s); e
- Utilizar os algoritmos disponibilizados.

9 Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

No Capítulo 3, abordamos a solução numérica de uma equação algébrica $f(x)=0$ envolvendo uma única variável desconhecida x . Neste Capítulo, trataremos de soluções numéricas de outros tipos de equações, que envolvem a determinação de uma função desconhecida e que ampliam a capacidade de modelagem de fenômenos.

Definição 1: uma **equação diferencial** é toda equação que envolve uma ou mais derivada(s) de uma função desconhecida $y = y(x)$. Se nessa equação estiverem envolvidas derivadas em relação a uma única variável, até a ordem n , ela será denominada de **equação diferencial ordinária** de ordem n , denotada pela sigla EDO, e genericamente representada por:

$$y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \text{ com } x \in [a, b], \quad (1)$$

em que $y = y(x)$ é uma função desconhecida, $y', y'', \dots, y^{(n-1)}$ são as suas respectivas **derivadas ordinárias** até a ordem $(n-1)$. SAIBA MAIS Se as derivadas forem em relação a mais de uma variável, teremos derivadas parciais, que geram **equações diferenciais parciais**, denotadas pela sigla EDPs. FIM SAIBA MAIS

Definição 2: a **solução de uma EDO** de ordem n é toda função $y = y(x)$, definida em $[a, b]$, que possui as n derivadas ordinárias nesse domínio e satisfaz à equação diferencial (1).

Como uma EDO pode ter mais de uma solução, por exemplo, a equação $y' = x^2$ possui a família de soluções $y(x) = (x^3 / 3) + C$, em que C é uma constante, temos de impor condições adicionais para obter numericamente uma solução específica. Tais condições complementares podem ser de dois tipos:

- a) Na eq. (1), impondo que $y(a) = u_1$, $y'(a) = u_2$, ..., $y^{(n-1)}(a) = u_n$ (condições em um único ponto $x = a$), a EDO é denominada de **Problema de Valor Inicial (PVI)**. Por exemplo, o PVI $y' = -y \cdot \operatorname{tg}(x)$, com $y(0) = 1$ e $x \in [0, 1]$, tem solução $y(x) = \cos(x)$.

- b) Se, além de condições do tipo (a), também forem impostas condições na outra extremidade do intervalo, $y(b) = v_1$, $y'(b) = v_2$, ..., $y^{(n-1)}(b) = v_n$, a EDO será denominada de **Problema de Valor no Contorno (PVC)**.

As equações diferenciais ordinárias são usadas com muita frequência na modelação de fenômenos da natureza como a taxa de variação da posição x de um móvel em função do tempo t e de sua aceleração a . No caso de aceleração a constante, temos o movimento uniformemente variado, amplamente conhecido das disciplinas introdutórias de Física, que pode ser modelado pelo seguinte PVI de 2ª ordem:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = a, \text{ em que } a = \text{aceleração do móvel.}$$

Condições iniciais:

$$\frac{dx(t=0)}{dt} = v_0, \text{ em que } v_0 = \text{valor da sua velocidade inicial.}$$

$$x(t=0) = x_0, \text{ em que } x_0 = \text{valor da sua posição inicial.}$$

Nesse caso, obtendo a solução dessa EDO por integração analítica direta, resulta:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dx(t)}{dt} \right) = a \Rightarrow \int d \left(\frac{dx(t)}{dt} \right) = \int a * dt \Rightarrow \frac{dx(t)}{dt} = a * t + C_1$$

Integrando novamente a solução, temos:

$$dx(t) = (a * t + C_1) dt \Rightarrow \int dx(t) = \int (a * t + C_1) dt \Rightarrow x(t) = a * t^2 / 2 + C_1 * t + C_2$$

Aplicando as condições iniciais $\frac{dx}{dt}(t=0) = v_0$ e $x(t=0) = x_0$, temos a conhecida equação do movimento uniformemente variado:

$$x(t) = a * t^2 / 2 + v_0 * t + x_0$$

Existem vários métodos analíticos de resolução de equações diferenciais

ordinárias, mas na maioria dos casos não é possível representar a solução em termos de funções elementares, como no modelo matemático anterior. Mesmo uma equação diferencial com aspecto simples como:

$$y' = x^2 + y^2$$

não pode ser resolvida em termos de funções elementares. Nesses casos, os métodos numéricos permitem encontrar as funções solução na forma discreta e aproximada.

Inicialmente, vamos abordar alguns métodos numéricos para resolver PVI de 1ª ordem com fundamentação teórica no desenvolvimento da solução $y = y(x)$ em série de Taylor. Por esse motivo, esses métodos são chamados de métodos baseados na série de Taylor.

9.1 Método de Euler Simples

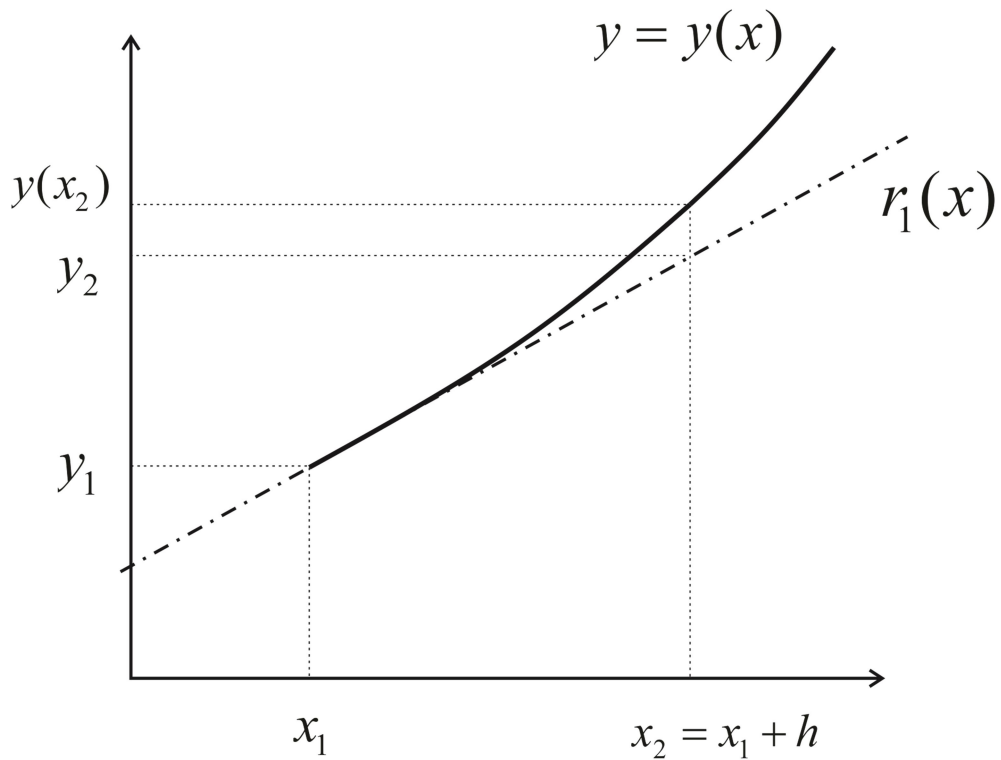
Seja um PVI de 1ª ordem:

$$y' = f(x, y) \text{ com } x \in [a, b] \text{ e condição inicial } y(x_1) = y_1 \quad (2)$$

em que $f(x, y)$ representa a derivada da função solução $y(x)$.

Suponhamos que a solução exata da equação diferencial (2) seja dada por $y = y(x)$, conforme o Gráfico 9.1 a seguir.

Gráfico 9.1 – Representação de uma solução $y = y(x)$ e da reta tangente $r_1(x)$ no ponto definido pela condição inicial $y(x_1) = y_1$



Fonte: Elaboração própria

Como conhecemos o ponto inicial da solução desejada (x_1, y_1) , e o coeficiente angular $y'(x_1) = f(x_1, y_1)$ da reta $r_1(x)$ tangente à essa solução $y(x)$ no ponto (x_1, y_1) , então podemos obter a expressão algébrica dessa reta:

$$r_1(x) = y_1 + (x - x_1)y'(x_1) = y_1 + (x - x_1)f(x_1, y_1) \quad (3)$$

Na Gráfico 9.1, considerando $h = (x_2 - x_1)$ como o espaçamento entre os dois primeiros valores da variável independente x e aplicando-o na eq. (3), temos:

$$y_2 = y_1 + (x_2 - x_1)f(x_1, y_1) = y_1 + h * f(x_1, y_1), \text{ em que } x_2 = x_1 + h.$$

Dividindo o domínio $[a, b]$ em n partes iguais, resulta o passo constante $h = (b - a) / n$; e generalizando a eq.(3), para todo $k = 1, 2, \dots, n$, temos:

$$y_{k+1} = y_k + h * f(x_k, y_k) \quad (4a)$$

$$x_{k+1} = x_k + h \quad (4b)$$

Assim, podemos obter n **aproximações discretas da solução** $y = y(x)$ do PVI. Esse é o denominado **método de Euler simples**. LINK Esse método é classificado como de passo simples porque cada nova aproximação y_{k+1} é calculada somente a partir da aproximação anterior y_k . FIMLINK

Note que $y_2 = y_1 + (x_2 - x_1)f(x_1, y_1) = y_1 + h * f(x_1, y_1)$ é o valor da solução $y(x)$, em $x = x_2$, desenvolvida em série de Taylor em torno de $x = x_1$ e truncada a partir do terceiro termo.

Exemplo 9.1: resolva por Euler simples o PVI:

$$y' = x - y + 2, \text{ com } y(x = 0) = 2 \text{ no domínio } [0, 1]$$

Escolha um valor inicial para o número n de divisões do domínio e aumente o n até que $y(x = 1)$ tenha erro estimado da ordem de 10^{-6} .

Solução:

Temos que $f(x, y) = x - y + 2$ e $y(x = 0) = 2$.

Tomando **$n = 8$** LINK É recomendável que o h inicial seja um valor relativamente pequeno, como $h \sim O(0.1)$. FIM LINK para o número de subdivisões e aplicando as eqs. (4), resulta:

$$h = (1 - 0) / 8 = 0.125$$

$$x_1 = 0 \quad \text{e} \quad y_1 = 2$$

$$x_2 = x_1 + h \quad \text{e} \quad y_2 = y_1 + h * f(x_1, y_1)$$

$$x_2 = 0 + 0.125 = 0.125 \quad y_2 = 2 + 0.125 * (0 - 2 + 2) = 2$$

$$x_3 = x_2 + h \quad \text{e} \quad y_3 = y_2 + h * f(x_2, y_2)$$

$$x_3 = 0.125 + 0.125 = 0.250 \quad y_3 = 2 + 0.125 * (0.125 - 2 + 2) = 2.015625$$

Assim sucessivamente, resultando em:

k	x_k	y_k	$K_1 = f(x_k, y_k)$	x_{k+1}	y_{k+1}
1	0	2	0.000000000	0.125	2.000000000
2	0.12500	2.000000000	0.125000000	0.250	2.015625000
3	0.25000	2.015625000	0.234375000	0.375	2.044921875
4	0.37500	2.044921875	0.330078125	0.500	2.086181641
5	0.50000	2.086181641	0.413818359	0.625	2.137908936
6	0.62500	2.137908936	0.487091064	0.750	2.198795319
7	0.75000	2.198795319	0.551204681	0.875	2.267695904
8	0.87500	2.267695904	0.607304096	1.000	2.343608916
9	1.00000	2.343608916			

Portanto, para $n = 8$, $y(x=1) = y_9 \cong 2.343608916$.

Qual o erro associado ao último ponto da solução obtida?

Se repetirmos todo o cálculo com o dobro de subdivisões, $n = 16$, teremos um valor aproximado $y(x=1)$ com erros de truncamento de ordem inferior, que pode ser considerado um valor estimativo mais próximo do exato do que o valor obtido com $n = 8$.

Tomando $n = 16$ divisões do domínio e aplicando as eqs. (4), temos:

$$h = (1-0)/16 = 0.0625$$

$$x_2 = 0.0625 \quad \text{e} \quad y_2 = y_1 + h * f(x_1, y_1) = 2 + 0.0625 * (0 - 2 + 2) = 2$$

$$x_3 = 0.1250 \quad \text{e} \quad y_3 = y_2 + h * f(x_2, y_2) = 2 + 0.0625 * (0.0625 - 2 + 2) = 2.003906250$$

Assim sucessivamente, resultando:

k	x_k	y_k	$K_1 = f(x_k, y_k)$	x_{k+1}	y_{k+1}
1	0	2	0.000000000	0.06250	2.000000000
2	0.06250	2.000000000	0.062500000	0.12500	2.003906250
3	0.12500	2.003906250	0.121093750	0.18750	2.011474609
4	0.18750	2.011474609	0.176025391	0.25000	2.022476196
5	0.25000	2.022476196	0.227523804	0.31250	2.036696434
6	0.31250	2.036696434	0.275803566	0.37500	2.053934157
7	0.37500	2.053934157	0.321065843	0.43750	2.074000772
8	0.43750	2.074000772	0.363499228	0.50000	2.096719474
9	0.50000	2.096719474	0.403280526	0.56250	2.121924507
10	0.56250	2.121924507	0.440575493	0.62500	2.149460475

11	0.62500	2.149460475	0.475539525	0.68750	2.179181695
12	0.68750	2.179181695	0.508318305	0.75000	2.210951589
13	0.75000	2.210951589	0.539048411	0.81250	2.244642115
14	0.81250	2.244642115	0.567857885	0.87500	2.280133233
15	0.87500	2.280133233	0.594866767	0.93750	2.317312406
16	0.93750	2.317312406	0.620187594	1.00000	2.356074130
17	1.00000	2.356074130			

Portanto, para $n = 16$, $y(x=1) = y_{17} \cong 2.356074130$.

Erro estimado Euler $= |y_9^{(n=8)} - y_{17}^{(n=16)}| = 0.012465214 > 10^{-6}$.

Esse erro demonstra que a solução ainda está muito distante da precisão requerida. Por simulação em computador, teremos de aumentar o n até $n = 2^{15} = 32768$ para chegar a um erro estimado de $2.8068e-06$, que é da ordem de 10^{-6} .

A seguir, apresentaremos métodos de maior precisão, para evitar o aumento exagerado no número n LINK Assim como nos métodos de integração numérica de funções que vimos no Capítulo 8, esses métodos de passo simples podem acumular erros de arredondamento exagerados se n for muito grande, pois um novo ponto depende do anterior. FIM LINK de subdivisões do domínio.

9.2 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são obtidos tomando mais termos nas séries de Taylor para aproximar as soluções dos PVIs. Se forem cancelados os termos que contêm derivadas de ordens maiores do que p , o método será considerado de ordem p . O método de Euler simples estudado anteriormente é de primeira ordem ($p = 1$), porque despreza os termos com derivadas de ordem 2 e superiores.

Na sequência, vamos apresentar alguns métodos dessa categoria.

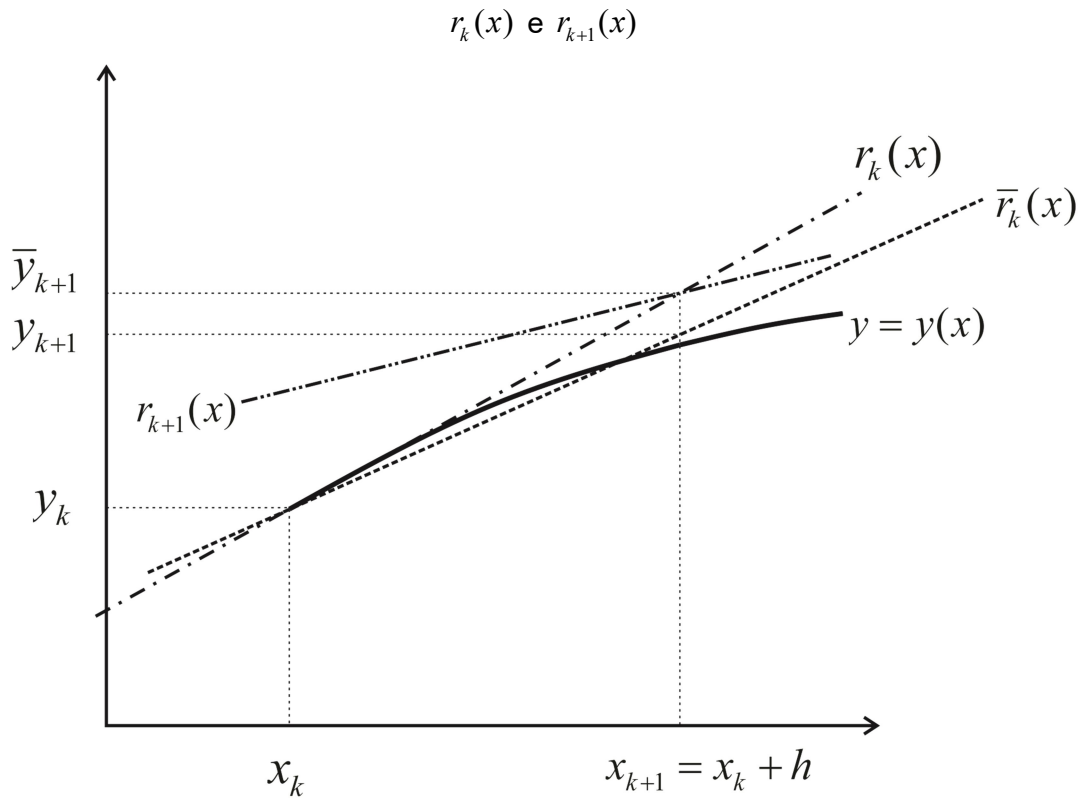
9.2.1 Método de Euler Aperfeiçoado

Exploramos inicialmente um método particular que é o método de Euler

aperfeiçoado, pois ele tem uma interpretação geométrica bastante simples.

Conforme o próprio nome indica, esse método consiste em fazer mudanças no método de Euler simples para conseguir um método de ordem mais elevada. Graficamente, o método de Euler aperfeiçoado pode ser interpretado conforme o Gráfico 9.2.

Gráfico 9.2 – Método de Euler aperfeiçoado com inclinações representadas pelas retas



Fonte: Elaboração própria

No Gráfico 9.2, temos a reta $r_k(x)$ definida pelo ponto (x_k, y_k) e coeficiente angular:

$$y'(x_k) = f(x_k, y_k) \quad (6)$$

com expressão algébrica:

$$r_k(x) = y_k + (x - x_k)y'(x_k) = y_k + (x - x_k)f(x_k, y_k) \quad (7)$$

Assim, aplicando o método de Euler com passo h , determinamos

$$\bar{y}_{k+1} = y_k + h * f(x_k, y_k) \text{ e } x_{k+1} = x_k + h \quad (8)$$

Com os valores de x_{k+1} e de \bar{y}_{k+1} , temos a reta $r_{k+1}(x)$ definida pelo ponto (x_{k+1}, \bar{y}_{k+1}) e coeficiente angular:

$$y'(x_{k+1}) = f(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1}) \quad (9)$$

com expressão algébrica:

$$r_{k+1}(x) = y_{k+1} + (x - x_{k+1}) * f(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1}) \quad (10)$$

Tomando como um novo coeficiente angular a média aritmética simples entre os valores dados pelas eqs. (6) e (9), definimos uma nova reta, de inclinação média entre $r_k(x)$ e $r_{k+1}(x)$ e que também passe pelo ponto (x_k, y_k) , conforme segue,

$$\bar{r}_k(x) = y_k + (x - x_k) * (f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1})) / 2 \quad (11)$$

Assim, podemos recalcular o segundo ponto (x_{k+1}, y_{k+1}) utilizando esse coeficiente angular médio, através de

$$y_{k+1} = y_k + h * (f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1})) / 2 \quad (12a)$$

ou usar apenas os valores do primeiro ponto (x_k, y_k) , resultando:

$$y_{k+1} = y_k + h * (f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + h * f(x_k, y_k))) / 2 \quad (12b)$$

As eqs.(12a) e (12b) são as duas expressões algébricas equivalentes do chamado método de Euler aperfeiçoado, ou modificado. Esse método também é conhecido como método de **Runge-Kutta de 2ª ordem (RK₂)** LINK Podemos comprovar que sua fórmula equivale à expansão da $y(x)$ em série de Taylor até o termo com derivada de 2ª ordem ($O(h^2)$) FIM DO LINK. Tradicionalmente a eq. (12b) é expressa na literatura, para todo $k = 1, 2, \dots, n$, na seguinte forma:

$$y_{k+1} = y_k + h(K_1 + K_2)/2 \quad (13a)$$

$$x_{k+1} = x_k + h \quad (13b)$$

em que

$$K_1 = f(x_k, y_k) \quad (13c)$$

$$K_2 = f(x_k + h, y_k + h * K_1) \quad (13d)$$

Observe que a parcela $(K_1 + K_2)/2$ é uma inclinação média da função solução $y(x)$, considerando apenas as informações disponíveis no ponto inicial de cada subintervalo (x_k, y_k) .

Exemplo 9.2: resolva, pelo método de Runge-Kutta de 2ª ordem, o PVI do **Exemplo 9.1**, isto é, $y' = x - y + 2$, com $y(x=0) = 2$ no domínio $[0, 1]$.

Solução:

Temos que $f(x, y) = x - y + 2$ e $y(x=0) = 2$.

Tomando $n = 8$ para o número de subdivisões e aplicando as eqs. (13), resulta:

$$h = (1 - 0) / 8 = 0.125$$

k	x_k	y_k	$K_1 = f(x_k, y_k)$	$K_2 = f(x_k + h, y_k + h * K_1)$	x_{k+1}	y_{k+1}
1	0	2	0.000000000	0.125000000	0.125	2.007812500
2	0.125	2.007812500	0.117187500	0.227539063	0.250	2.029357910
3	0.250	2.029357910	0.220642090	0.318061829	0.375	2.063026905
4	0.375	2.063026905	0.311973095	0.397976458	0.500	2.107398752
5	0.500	2.107398752	0.392601248	0.468526092	0.625	2.161219211
6	0.625	2.161219211	0.463780789	0.530808190	0.750	2.223381022
7	0.750	2.223381022	0.526618978	0.585791606	0.875	2.292906684
8	0.875	2.292906684	0.582093316	0.634331652	1.000	2.368933244
9	1.000	2.368933244				

Portanto, para $n = 8$, $y(x=1) = y_9 \cong 2.368933244$.

Agora, para calcular o erro estimado, com $n = 16$, $h = (1 - 0) / 16 = 0.0625$, as eqs. (13) fornecem:

k	x_k	y_k	$K_1 = f(x_k, y_k)$	$K_2 = f(x_k + h, y_k + h * K_1)$	x_{k+1}	y_{k+1}
1	0	2	0.000000000	0.062500000	0.063	2.001953125
2	0.063	2.001953125	0.060546875	0.119262695	0.125	2.007572174
3	0.125	2.007572174	0.117427826	0.172588587	0.188	2.016635187
4	0.188	2.016635187	0.170864813	0.222685762	0.250	2.028933642
5	0.250	2.028933642	0.221066358	0.269749710	0.313	2.044271645
6	0.313	2.044271645	0.268228355	0.313964083	0.375	2.062465158
7	0.375	2.062465158	0.312534842	0.355501414	0.438	2.083341291
8	0.438	2.083341291	0.354158709	0.394523789	0.500	2.106737619
9	0.500	2.106737619	0.393262381	0.431183482	0.563	2.132501553
10	0.563	2.132501553	0.429998447	0.465623544	0.625	2.160489740
11	0.625	2.160489740	0.464510260	0.497978369	0.688	2.190567509
12	0.688	2.190567509	0.496932491	0.528374210	0.750	2.222608344
13	0.750	2.222608344	0.527391656	0.556929678	0.813	2.256493386
14	0.813	2.256493386	0.556006614	0.583756201	0.875	2.292110974
15	0.875	2.292110974	0.582889026	0.608958462	0.938	2.329356208
16	0.938	2.329356208	0.608143792	0.632634805	1.000	2.368130539
17	1.000	2.368130539				

Portanto, para $n = 16$, $y(x = 1) \cong y_{17} = 2.368130539$

Erro estimado $RK_2 = \left| y_9^{(n=8)} - y_{17}^{(n=16)} \right| = 8.0271e - 04 > 10^{-6}$

Observe que a exatidão almejada ainda não foi obtida com $n = 8$, apesar de a precisão ser bem melhor do que a do método de Euler simples. Por simulação em computador, teremos que aumentar n somente até $n = 2^7 = 128$ para chegarmos a um erro estimado $2.8260e - 06$, que é da ordem de 10^{-6} .

Na sequência, vamos apresentar um método ainda mais preciso do que o de Runge-Kutta de 2ª ordem.

9.2.2 Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem

O truncamento na série de Taylor representativa da solução $y(x)$, no método de Runge-Kutta de 4ª ordem, ocorre a partir do termo de 5ª ordem ($O(h^5)$) e conduz a múltiplas possibilidades de expressões, e a mais popular, para todo $k = 1, 2, \dots, n$, é a seguinte:

$$y_{k+1} = y_k + h(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)/6 \quad (14a)$$

$$x_{k+1} = x_k + h \quad (14b)$$

em que

$$K_1 = f(x_k, y_k) \quad (14c)$$

$$K_2 = f(x_k + h/2, y_k + (h/2)K_1) \quad (14d)$$

$$K_3 = f(x_k + h/2, y_k + (h/2)K_2) \quad (14e)$$

$$K_4 = f(x_k + h, y_k + hK_3) \quad (14f)$$

Observe que o termo $(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)/6$ é uma inclinação média ponderada da função solução $y(x)$, considerando uma avaliação no ponto inicial $K_1 = f(x_k, y_k)$, duas no ponto intermediário, $K_2 = f(x_k + h/2, y_k + (h/2)K_1)$ e $K_3 = f(x_k + h/2, y_k + (h/2)K_2)$, e uma no ponto final $K_4 = f(x_k + h, y_k + hK_3)$ do subintervalo $[x_k, x_{k+1}]$.

Exemplo 9.3: resolva o PVI do **Exemplo 9.1** considerando agora o método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Solução:

Temos que $f(x, y) = x - y + 2$ com $y(x = 0) = 2$.

Tomando inicialmente $n = 8$, $h = (1 - 0)/8 = 0.125$, para o número de subdivisões e aplicando as eqs. (14), resulta:

$$h = (1 - 0)/8 = 0.125$$

k	x_k	y_k	K_1	K_2	K_3	K_4	x_{k+1}	y_{k+1}
1	0	2	0.000000000	0.062500000	0.058593750	0.117675781	0.125	2.007497152
2	0.125	2.007497152	0.117502848	0.172658920	0.169211666	0.221351390	0.250	2.028801223

3	0.250	2.028801223	0.221198777	0.269873854	0.266831661	0.312844820	0.375	2.062289861
4	0.375	2.062289861	0.312710139	0.355665755	0.352981029	0.393587511	0.500	2.106531345
5	0.500	2.106531345	0.393468655	0.431376864	0.429007601	0.464842705	0.625	2.160262184
6	0.625	2.160262184	0.464737816	0.498191703	0.496100835	0.527725212	0.750	2.222367353
7	0.750	2.222367353	0.527632647	0.557155607	0.555310422	0.583218845	0.875	2.291862843
8	0.875	2.291862843	0.583137157	0.609191084	0.607562714	0.632191817	1.000	2.367880272
9	1.000	2.367880272						

Portanto, para $n = 8$, $y(x = 1) \cong y_9 = 2.367880272$.

Agora, para calcular o erro estimado, com $n = 16$, $h = (1 - 0)/16 = 0.0625$, reaplicamos as eqs. (14):

k	x_k	y_k	K_1	K_2	K_3	K_4	x_{k+1}	y_{k+1}
1	0	2	0.000000000	0.031250000	0.030273438	0.060607910	0.0625	2.001913071
2	0.0625	2.001913071	0.060586929	0.089943588	0.089026192	0.117522792	0.1250	2.007496917
3	0.1250	2.007496917	0.117503083	0.145081111	0.144219298	0.170989377	0.1875	2.016529139
4	0.1875	2.016529139	0.170970861	0.196878022	0.196068423	0.221216585	0.2500	2.028800809
5	0.2500	2.028800809	0.221199191	0.245536716	0.244776168	0.268400680	0.3125	2.044115660
6	0.3125	2.044115660	0.268384340	0.291247330	0.290532861	0.312726037	0.3750	2.062289313
7	0.3750	2.062289313	0.312710687	0.334188478	0.333517297	0.354365856	0.4375	2.083148564
8	0.4375	2.083148564	0.354351436	0.374527953	0.373897437	0.393482846	0.5000	2.106530700
9	0.5000	2.106530700	0.393469300	0.412423384	0.411831069	0.430229858	0.5625	2.132282868
10	0.5625	2.132282868	0.430217132	0.448022847	0.447466418	0.464750481	0.6250	2.160261473
11	0.6250	2.160261473	0.464738527	0.481465448	0.480942731	0.497179606	0.6875	2.190331624
12	0.6875	2.190331624	0.497168376	0.512881864	0.512390817	0.527643950	0.7500	2.222366600
13	0.7500	2.222366600	0.527633400	0.542394856	0.541933561	0.556262552	0.8125	2.256247358
14	0.8125	2.256247358	0.556252642	0.570119747	0.569686400	0.583147242	0.8750	2.291862069
15	0.8750	2.291862069	0.583137931	0.596164871	0.595757779	0.608403070	0.9375	2.329105676
16	0.9375	2.329105676	0.608394324	0.620632002	0.620249574	0.632128726	1.0000	2.367879490
17	1.0000	2.367879490						

Portanto, para $n = 16$, $y(x = 1) \cong y_{17} = 2.367879490$.

Erro estimado $RK_4 = |y_9^{(n=8)} - y_{17}^{(n=16)}| = 7.8147e - 07 < 10^{-6}$.

Logo, temos o problema proposto no **Exemplo 9.1** resolvido com a precisão

desejada, $O(10^{-6})$, em apenas $n = 8$ subdivisões, usando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Apenas para efeito didático, comparamos a solução numérica e a solução analítica exata do PVI, obtida por meio de fator integrante, $y(x) = (x+1) + e^{-x}$, na seção **Complementando...** ao final deste Capítulo.

O valor exato de y em $x = 1$ é

$$y(x=1) = (1+1) + e^{-1} = 2.36787944117144$$

Erros exatos dos valores aproximados por Runge-Kutta de 4ª ordem são:

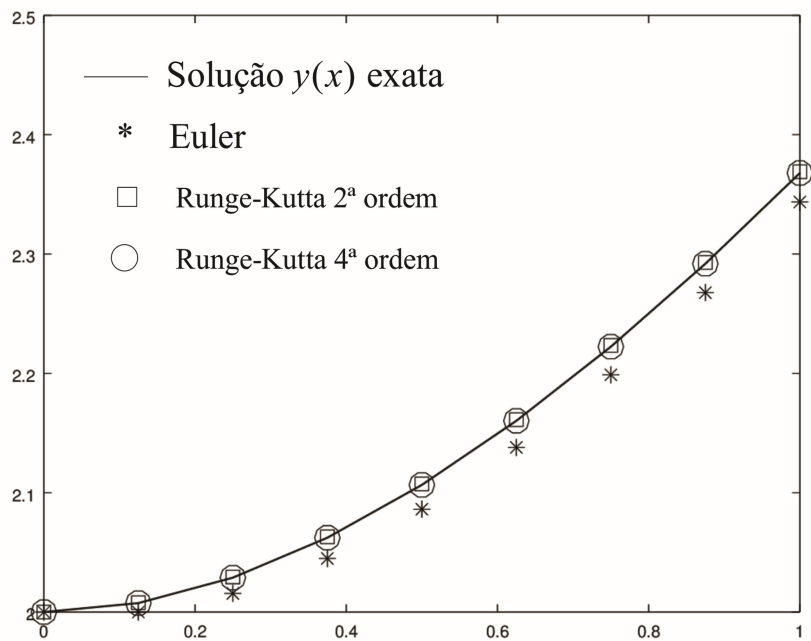
$$y(x=1) \cong y_9^{(n=8)} = 2.36788027192195 \Rightarrow \text{Erro exato de } y_9^{(n=8)} = 8.3075 \cdot 10^{-7}$$

$$y(x=1) \cong y_{17}^{(n=16)} = 2.36787949045257 \Rightarrow \text{Erro exato de } y_{17}^{(n=16)} = 4.9281 \cdot 10^{-8}$$

Note que, com $n = 16$, temos um resultado mais preciso, pois o erro exato com $n = 16$ é de ordem 10 vezes menor do que o erro com $n = 8$.

Agora, observe que, com o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, e $n = 8$ subdivisões, temos em $y(x=1)$ o Erro estimado de RK₄ é $7.8147 \cdot 10^{-7}$ (obtido comparativamente com o resultado de $n = 16$ subdivisões), enquanto o seu erro exato, comparando-o com a solução exata, é $8.3075 \cdot 10^{-7}$, ou seja, o erro estimado é da mesma ordem do erro exato.

Gráfico 9.3 – Resultados aproximados obtidos executando os algoritmos Euler Simples, Rung-Kutta de 2ª e 4ª ordem para $n = 8$ para o Exemplo 9.1

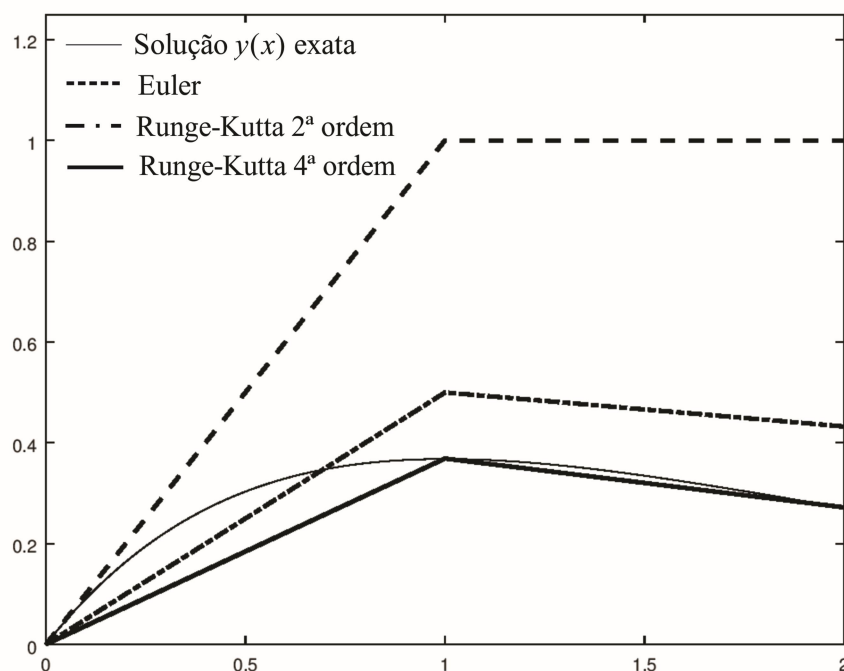


Fonte: Elaboração própria

Perceba, no Gráfico 9.3, que, com essa resolução, os métodos de Runge-Kutta de 2ª e 4ª ordem geram praticamente os resultados exatos, tornando a visualização da sua diferença praticamente imperceptível.

DESTAQUE Para visualizar as diferenças de cada um dos métodos apresentados, usamos o PVI exemplo $y' = \exp(-x) - x \cdot \exp(-x)$, $y(x=0) = 0$ com $x \in [0, 2]$ (solução exata $y(x) = x \cdot \exp(-x)$), e o passo $h=1$ (passo grande para destacar o erro), conforme o Gráfico 9.4. Desse modo, podemos observar uma redução crescente nos erros com as soluções de Euler e de Runge-Kutta de 2ª ordem e de 4ª ordem, respectivamente. **FIM DO DESTAQUE.**

Gráfico 9.4 – Comparativo entre soluções aproximadas e exata



Fonte: Elaboração própria

Os Algoritmos de Euler Simples e Runge-Kutta de 2ª e 4ª ordem estão no **Caderno de Algoritmos**, em <http://sergiopeters.prof.ufsc.br/algoritmos-livro/>, no arquivo **Cap9exem9.1,9.2,9.3EulerRungeKutta.m** (com cálculos dos erros de forma exata e estimada, conforme os **Exemplos 9.1, 9.2 e 9.3**).

Sobre os métodos de Runge-Kutta de ordem p , concluímos que se caracterizam pelas três propriedades a seguir:

- são de passo simples, ou seja, a sua aplicação é autossuficiente, não necessitando de correções iterativas ou de outros métodos complementares, mas apenas dos valores no ponto inicial de cada sub-intervalo;
- não exigem o cálculo de qualquer derivada da função inclinação $f(x, y)$, mas precisam calcular $f(x, y)$ em vários pontos de cada subintervalo;
- a expansão da função solução $y(x)$ diretamente por série de Taylor em torno de (x_k, y_k) , que envolve as derivadas de ordem superior da função

$f(x, y)$ (não apresentada neste livro), gera expressões de ordem equivalente às obtidas por Euler, Runge-Kutta de 2ª e de 4ª ordem.

Existem outras famílias de métodos numéricos de solução de PVIs, além dos fundamentados em série de Taylor apresentados neste livro. Por exemplo, para o PVI $y' = f(x, y)$ com $y(x_1) = y_1$, temos:

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

Logo,

$$y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y)dx \quad (15)$$

Agora, efetuando numericamente a integral $I = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y)dx$, por exemplo, pelo método dos trapézios, com um único intervalo, temos:

$$I = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y)dx \cong \frac{h}{2}(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1}))$$

que, substituída na eq. (15), resulta,

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})) \quad (16)$$

Assim, geramos um método de solução com uma característica completamente distinta dos já abordados, pois a incógnita y_{k+1} aparece em ambos os lados da eq. (16). Esse tipo de método é denominado de multipassos, pois ele não é autoinicializável, isto é, temos que atribuir um valor inicial para o y_{k+1} da direita da eq. (16), conforme fizemos com os métodos iterativos dos Capítulos 2 e 3. Na literatura, o leitor encontrará uma família desses métodos desenvolvidos por **Adams-Bashforth** que excluem algebricamente os valores de y_{k+1} da direita da eq. (16). Por exemplo, o primeiro método dessa família, proveniente da eq. (16), baseado na extrapolação linear de y_{k+1} a partir dos dois pontos anteriores y_{k-1} e y_k , torna-se

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(3f(x_k, y_k) - f(x_{k-1}, y_{k-1})) \quad \forall k = 2, 3, \dots, n \quad (17)$$

com erro local da ordem de $O(h^3)$. A eq. (17) calcula uma solução aproximada a partir do terceiro ponto y_3 usando os dois pontos anteriores: o valor inicial y_1 conhecido e necessitando de um método complementar, de outra família, para gerar o valor do segundo ponto y_2 .

Exemplo 9.4: resolva o mesmo PVI do **Exemplo 9.1** pelo método de **Adams-Bashforth**, eq.(17), com $n = 8$. Use o método de Runge-Kutta de 2ª ordem, eq. (13), para obter o segundo ponto y_2 .

Solução:

Para $f(x, y) = x - y + 2$, $y(x = 0) = 2$, temos:

k	x_k	y_k
1	0	2
2	0.125	2.007812500000000
3	0.250	2.02978515625000
4	0.375	2.06375122070312
5	0.500	2.10834693908691
6	0.625	2.16232883930206
7	0.750	2.22460136562586
8	0.875	2.29419666202739
9	1.000	2.37025987324887

$$y(x = 1) \cong y_9^{(n=8)} = 2.37025987324887$$

Erro estimado Adams Bashforth = 0.00178262689949493

Erro exato Adams Bashforth = 0.00238043207742722.

Observe que esses erros ficaram na mesma ordem de grandeza dos erros do método de Runge-Kutta de 2ª ordem. Porém, Adams-Bashforth com trapézios utiliza uma única nova chamada $f(x_k, y_k)$ no **ponto anterior** LINK $f(x_{k-1}, y_{k-1})$ é sempre calculado no passo anterior. FIM LINK (que pode ser reaproveitada para o próximo). O Runge-Kutta de 2ª ordem utiliza duas chamadas na $f(x, y)$ para cada passo.

O Algoritmo de Adams-Bashforth com integração por trapézios está no **Caderno de**

A seguir, vamos abordar a solução numérica de EDOs de ordem superior, por meio da sua transformação em um sistema de EDOs de primeira ordem.

9.3 Solução Numérica de Sistemas de PVI de 1ª Ordem e de PVI de Ordem Superior

Nesta seção, vamos estender as expressões dos métodos de solução numérica de um PVI de 1ª ordem para a solução de um PVI de ordem n por meio da solução de um sistema de n EDOs de 1ª ordem. Sem perda de generalidade, vamos apresentar a extensão desses métodos apenas para os PVI de ordem $n = 2$.

Definição 3: um **sistema de duas EDOs** de 1ª ordem com $x \in [a, b]$ é toda expressão do tipo:

$$\begin{cases} y_1' = f_1(x, y_1, y_2) \\ y_2' = f_2(x, y_1, y_2) \end{cases} \quad (18)$$

Na eq. (18), se as condições iniciais $y_1(x_1 = a) = u_1$ e $y_2(x_1 = a) = u_2$ forem valores conhecidos, teremos um sistema de dois PVI de 1ª ordem. Para resolver esse sistema, também dividimos o domínio $x \in [a, b]$ em n partes, de comprimento $h = (b - a)/n$, e adaptamos o método de Euler simples, eq. (8), por exemplo, para todo $k = 1, 2, \dots, n$, resultando,

$$\begin{cases} y_{1,k+1} = y_{1,k} + f_1(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}) \\ y_{2,k+1} = y_{2,k} + f_2(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}) \\ x_{k+1} = x_k + h \end{cases} \quad (19)$$

Adaptando o método de Runge-Kutta de 2ª ordem (eq.13) para resolver o sistema (18), resulta:

$$\begin{cases} y_{1,k+1} = y_{1,k} + 0.5h(K_1^{f_1} + K_2^{f_1}) \\ y_{2,k+1} = y_{2,k} + 0.5h(K_1^{f_2} + K_2^{f_2}) \\ x_{k+1} = x_k + h \end{cases} \quad (20a)$$

LINK Os superíndices f_1 e f_2 indicam as funções representativas das EDOs de y_1 e

y_2 , respectivamente. FIM LINK

em que

$$K_1^{f_1} = f_1(x_k, y_{1,k}, y_{2,k})$$

$$K_1^{f_2} = f_2(x_k, y_{1,k}, y_{2,k})$$

$$K_2^{f_1} = f_1(x_k + h, y_{1,k} + h * K_1^{f_1}, y_{2,k} + h * K_1^{f_2}) \quad (20b)$$

$$K_2^{f_2} = f_2(x_k + h, y_{1,k} + h * K_1^{f_1}, y_{2,k} + h * K_1^{f_2})$$

LINK Note que os valores de $K_1^{f_1}$ e $K_1^{f_2}$ devem ser calculados antes de calcularmos

$K_2^{f_1}$ e $K_2^{f_2}$, pois estes últimos dependem de $K_1^{f_1}$ e $K_1^{f_2}$ FIM LINK

Então, para resolver um PVI de segunda ordem:

$$y'' = f(x, y, y') \text{ com } x \in [a, b], \quad y(x_1 = a) = u_1 \text{ e } y'(x_1 = a) = u_2 \text{ conhecidos,}$$

tomamos uma variável auxiliar $y_2 = y'$ e redefinimos a solução como $y_1 = y$ (para manter a notação de sistema) da seguinte forma:

$$\begin{cases} y_1 = y \\ y_2 = y' \end{cases} \quad (21)$$

Derivando ambas as funções das eqs. (21), o PVI de 2ª ordem torna-se o sistema:

$$\begin{cases} y_1' = y' = y_2 \\ y_2' = y'' = f(x, y, y') = f(x, y_1, y_2) \end{cases} \quad (22)$$

Com $y_1(x_1 = a) = u_1$ e $y_2(x_1 = a) = u_2$ conhecidos. Podemos reescrever as eqs. (22), como:

$$\begin{cases} y_1' = f_1(x, y_1, y_2) = y_2 & \rightarrow y_1(x_1 = a) = u_1 \\ y_2' = f_2(x, y_1, y_2) = f(x, y_1, y_2) & \rightarrow y_2(x_1 = a) = u_2 \end{cases} \quad (23)$$

Temos justamente um sistema de duas EDOs de 1ª ordem, como o das eqs. (18), que pode ser resolvido numericamente pelas eqs. (19), ou (20), ou por outro método adaptado a sistemas, como o Runge-Kutta de 4ª ordem.

Na sequência, vamos apresentar um exemplo de solução de PVI de 2ª ordem.

Exemplo 9.5: determine a solução do PVI $y'' - 4y' + 4y = 8x^2 - 16x + 4$, com $x \in [0, 1]$, condições iniciais, $y(x=0) = 0$ e $y'(x=0) = 1$, e erro máximo menor do que 10^{-6} .

Solução:

Com os métodos apresentados, podemos resolver apenas uma EDO de 1ª ordem por vez; então podemos transformar uma EDO de 2ª ordem em um sistema de duas EDOs de 1ª ordem. Para EDOs de ordem 2, como neste exemplo, redefinimos $y(x)$ e criamos uma variável auxiliar para $y'(x)$, conforme segue:

$$\begin{cases} y_1(x) = y(x) \\ y_2(x) = y'(x) \end{cases}$$

Derivamos as duas variáveis auxiliares, $y_1(x)$ e $y_2(x)$, para gerar duas equações diferenciais:

$$y_1(x) = y(x) \Rightarrow y_1'(x) = y'(x) = y_2(x)$$

$$y_1'(x) = z_1(x, y_1, y_2) = y_2(x)$$

$$y_1(x=0) = y(x=0) = 0 \text{ (condição inicial)}$$

$$y_2(x) = y'(x) \Rightarrow y_2'(x) = y''(x) = +4y' - 4y + 8x^2 - 16x + 4 \text{ (EDO original)}$$

$$y_2'(x) = z_2(x, y_1, y_2) = +4y_2 - 4y_1 + 8x^2 - 16x + 4$$

$$y_2(x=0) = y'(x=0) = 1 \text{ (condição inicial)}$$

Resultando duas EDOs de 1ª ordem, para $y_1(x)$ e $y_2(x)$, com duas condições iniciais:

$$\begin{cases} y_1'(x) = z_1(x, y_1, y_2) = y_2 & \rightarrow y_1(x=0) = y(x=0) = 0 \\ y_2'(x) = z_2(x, y_1, y_2) = +4y_2 - 4y_1 + 8x^2 - 16x + 4 & \rightarrow y_2(x=0) = y'(x=0) = 1 \end{cases}$$

Então, resolvemos as duas EDOs simultaneamente, pois a incógnita $y_1(x)$ depende de $y_2(x)$, e vice-versa, conforme o arquivo **Cap9exem9.5sist2PVI.m** do **Caderno**

de Algoritmos.

Na tabela estão os resultados obtidos para $n = 43$, de forma que o erro máximo seja menor do que 10^{-6} .

k	t	y_1	y_2
1	0.00000	0.00000	1.0000
2	0.02326	0.02544	1.1894
3	0.04651	0.05537	1.3856
4	0.06977	0.08995	1.5892
5	0.09302	0.12935	1.8007
\vdots			
41	0.95349	8.23783	23.3858
42	0.97674	8.79728	24.7387
43	1.00000	9.38906	26.1672

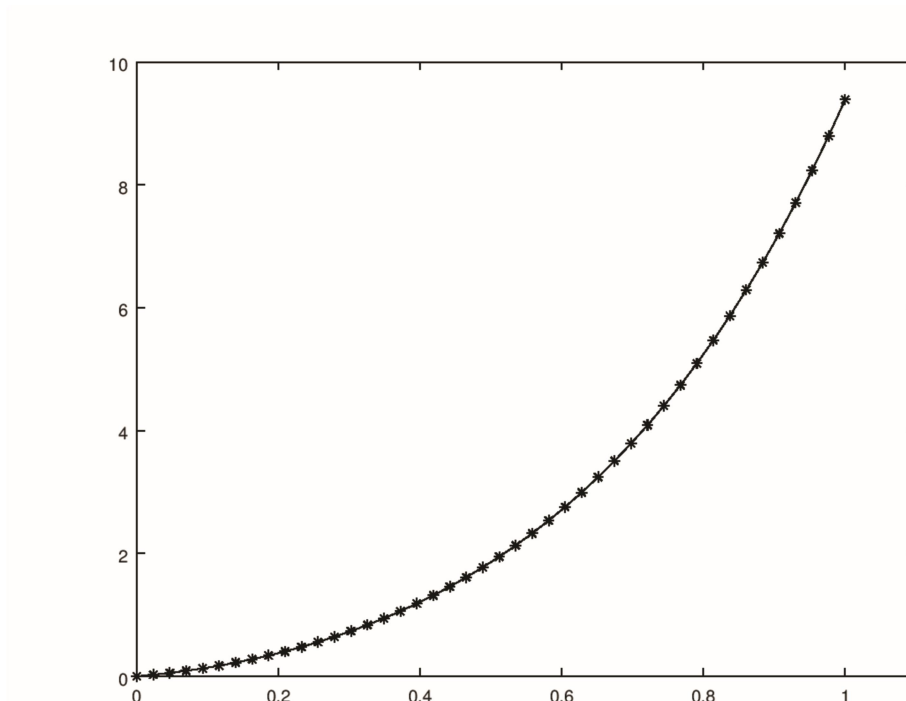
Erro máximo de $y = y_1$:

Erro Exato máximo em todo $x \in [0, 1]$ é $9.28874230865517e-07$

Erro Exato máximo em $x = 1$ é $9.28874230865517e-07$

Erro estimado máximo em $x = 1$ é $8.69081802079563e-07$.

Gráfico 9.5 – Gráfico da solução discreta $y_1(x)$ obtida por Runge-Kutta de 4ª ordem marcada com * e a solução exata $y(x)$, em linha contínua



Fonte: Elaboração própria

[Acompanhe agora uma introdução à solução numérica de problemas com valor no](#)

contorno (PVCs).

9.4 Solução Numérica de EDOs com Problema de Valor no Contorno (PVC)

Para uma EDO de ordem $n > 1$, se o valor da sua solução $y(x)$, ou de alguma(s) de suas derivadas até ordem $n-1$, for conhecido em mais de um ponto do domínio $[a, b]$, normalmente nos extremos deste intervalo, ela será denominada de **Problema de Valor no Contorno (PVC)** e sua solução não poderá ser obtida diretamente por meio dos métodos de resolução de PVIs. Por exemplo, para uma EDO de ordem $n = 2$, $y'' = f(x, y, y')$ com domínio $x \in [a, b]$, a especificação dos valores conhecidos nos extremos pode ser sintetizada pelo sistema:

$$\begin{cases} \alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = v_1 \\ \alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = v_2 \end{cases}$$

em que α_i , β_i e v_i , com $i = 1, 2$, são constantes Reais conhecidas, bem como os α_i e β_i não podem ser simultaneamente nulos.

Os métodos de solução de PVCs podem ser agrupados na categoria dos fundamentados nas diferenças finitas, nos quais as derivadas envolvidas na EDO são aproximadas numericamente por operadores de diferenças, gerando sistemas de equações algébricas cuja solução fornece aproximações discretas da solução do PVC, conforme (FAIRES; BURDEN, 2011). Uma segunda maneira de resolver um PVC consiste em determinar a condição inicial desconhecida por meio de uma função entre esta condição inicial desconhecida e a condição de contorno conhecida, conforme desenvolveremos a seguir.

9.4.1 Métodos de Determinação de uma Condição Inicial em Função de uma Condição de Contorno

Para o PVC $y'' = f(x, y, y')$, $x \in [a, b]$ com condições de contorno $y(a) = v_1$ e $y(b) = D$ conhecidos, a ideia é tentar **adivinhar** um valor inicial C para o $y'(a)$

desconhecido do PVI a seguir,

$$y'' = f(x, y, y'), \quad x \in [a, b] \text{ com}$$

$$y(a) = y_1(a) = v_1 \text{ e}$$

$$y'(a) = y_2(a) = C = ?$$

de modo que, depois de resolvido esse PVI, pelos métodos abordados na seção anterior, a partir das condições iniciais (CI) atribuídas, possamos atingir a condição de contorno (CC) $y(b) = D$ conhecida. É o mesmo que determinar C da equação $erro(C) = Z(C) - D = 0$, em que:

- a) $y_1(b) = y(b) = Z(C)$ é o alvo atingido pela solução numérica da EDO, obtida a partir de $y(a) = y_1(a) = v_1$ e $y_2(a) = y'(a) = C$;
- b) $y_1(b) = y(b) = D$ é o alvo correto; e
- c) $Z(C)$ representa o cálculo da condição de contorno $y_1(x=b)$, correspondente ao **alvo atingido**, em função de uma condição inicial atribuída (mira) $y_2(x=a) = C$ por meio da solução numérica do respectivo sistema de PVIs.

No **Exemplo 9.6** a seguir, vamos obter a solução de um PVC de 2ª ordem aplicando o chamado *shooting method*, com o qual calculamos a condição inicial (mira) $y_2(x=0) = C$ por meio de **correções** baseadas no valor da condição de contorno conhecida (alvo) $y_1(x=1) = D$. Por isso, esse método de tentativas é chamado de *shooting* (tiro). Alternativamente, vamos determinar diretamente a raiz C da equação do erro entre o alvo atingido e o alvo correto, $erro(C) = Z(C) - D = 0$, pelo método de Newton com derivadas numéricas (secante).

Exemplo 9.6: determine a solução $y(x)$ da EDO de 2ª ordem $y'' - 4y' + 4y = 8x^2 - 16x + 4$, com as duas condições de contorno, $y(x=0) = 0$ e $y(x=1) = 9.389056098930666$, com erro máximo da ordem 10^{-6} . Use o *shooting method* e o método de Newton numérico para determinar a condição inicial desconhecida $y'(x=0) = C$.

Solução:

Para essa EDO de 2ª ordem, definimos as variáveis auxiliares, conforme segue:

$$y_1(x) = y(x) \Rightarrow y_1'(x) = y'(x) = y_2(x) \text{ (própria solução } y(x))$$

$$y_1'(x) = z_1(x, y_1, y_2) = y_2(x)$$

$$y_1(x=0) = y(x=0) = 0 \text{ (condição inicial conhecida)}$$

$$y_2(x) = y'(x) \Rightarrow y_2'(x) = y''(x) = +4y' - 4y + 8x^2 - 16x + 4 \text{ (} y'' \text{ é a própria EDO)}$$

$$y_2'(x) = z_2(x, y_1, y_2) = +4y_2 - 4y_1 + 8x^2 - 16x + 4$$

$$y_2(x=0) = y'(x=0) = C$$

Em que C é uma condição inicial de valor desconhecido.

Resultam então duas EDOs de 1ª ordem que precisam de duas condições iniciais:

$$\begin{cases} y_1'(x) = z_1(x, y_1, y_2) = y_2 & \rightarrow y_1(x=0) = y(x=0) = 0 \\ y_2'(x) = z_2(x, y_1, y_2) = +4y_2 - 4y_1 + 8x^2 - 16x + 4 & \rightarrow y_2(x=0) = y'(x=0) = C \end{cases}$$

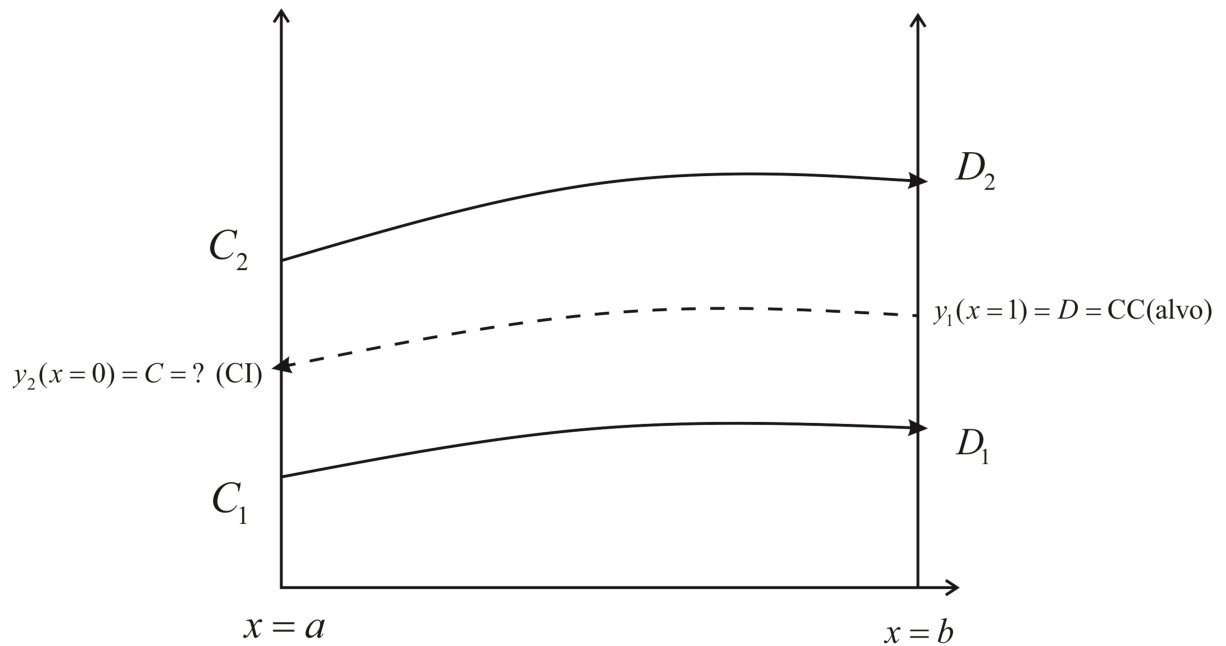
Agora precisamos determinar primeiro a condição inicial para $y_2(x=0)$ desconhecida, denominada de C , pois já conhecemos o valor da condição de contorno no outro extremo do domínio de cálculo, $y_1(x=1) = y(x=1) = 9.389056098930666$, que será denominada de D .

Determinando C pelo *shooting method*

Vamos atribuir dois valores estimados para C (miras), resolver duas vezes as EDOs e obter dois valores finais para $y_1(x=1)$ em $x=1$ (alvos atingidos) que, inicialmente, estarão errados, pois o valor correto em $x=1$ é conhecido, $y_1(x=1) = D = 9.389056098930666$ (alvo correto).

Então, nesse método, consideramos estimativas da condição inicial ausente, como se fossem miras de tiro; atribuímos dois valores iniciais de miras, C_1 e C_2 ; resolvemos as equações entre o ponto inicial a e o ponto final b ; e determinamos dois resultados para os alvos $y_1(x=1)$ atingidos no outro extremo b (contorno), denominados como D_1 e D_2 , cujo valor correto é o alvo com o valor D da condição de contorno conhecida em b , conforme o Gráfico 9.6.

Gráfico 9.6 – *Shooting method* para determinar uma condição inicial (CI) C a partir de uma condição de contorno (CC) D conhecida



Fonte: Elaboração própria

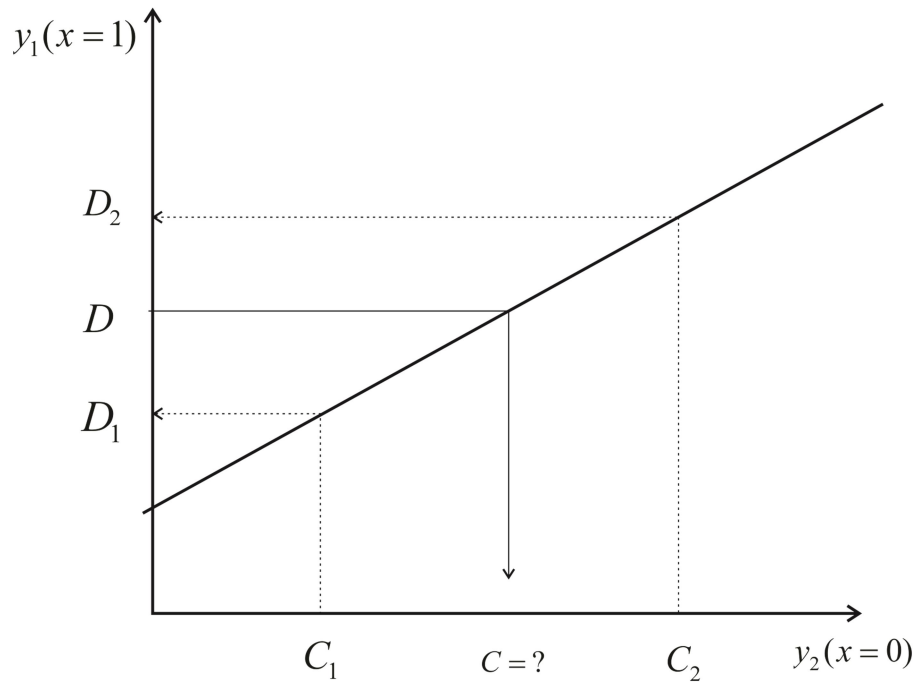
Então, relacionamos $y_2(x = 0) = C$ com $y_1(x = 1) = D$, supondo uma relação de **proporcionalidade linear** entre C e D , que é uma relação válida para valores de C próximos da solução, conforme mostrado no Gráfico 9.7 a seguir.

Para $y_2(x = 0) = y'(x = 0) = C_1$, obtemos $y_1(x = 1) = y(x = 1) = D_1$.

Para $y_2(x = 0) = y'(x = 0) = C_2$, obtemos $y_1(x = 1) = y(x = 1) = D_2$.

Para $y_2(x = 0) = y'(x = 0) = C = ?$, obter $y_1(x = 1) = y(x = 1) = D = 9.389056098930666$.

Gráfico 9.7 – Relação linear entre a CC conhecida $y_1(x = 1) = D$ (alvo) e a condição inicial $y_2(x = 0) = C$ desconhecida (mira)



Fonte: Elaboração própria

Logo, estabelecendo uma relação de proporcionalidade entre as condições iniciais C_1 e C_2 (miras propostas) com as condições de contorno D_1 e D_2 (alvos atingidos), calculadas na outra extremidade, podemos estabelecer uma relação linear entre C e D , conforme segue,

$$\frac{C - C_1}{C_2 - C_1} = \frac{D - D_1}{D_2 - D_1}$$

$$C = C_1 + (C_2 - C_1) \left(\frac{D - D_1}{D_2 - D_1} \right) \quad (24)$$

Uma vez obtido o valor de C , via eq. (24), teremos um resultado melhor do que os dois valores iniciais C_1 e C_2 . Então escolhemos dois desses três valores e refazemos o cálculo de C iterativamente. Por exemplo, vamos tomar C e C_2 como os dois melhores valores, descartando C_1 , conforme a seguinte seleção:

$$C_1 = C_2 \quad (\text{atualiza } C_1, \text{ substitui por } C_2)$$

$$C_2 = C \quad (\text{atualiza } C_2, \text{ substitui por } C)$$

Assim, em um novo passo:

- a) redefinimos $D_1 = D_2$, pois D_1 é o valor de D_2 do passo anterior;

- b) com o novo valor de C_2 , recalculamos D_2 ; e
- c) refazemos o cálculo de C , via eq. (24), até que algum critério de parada seja satisfeito.

Podemos avaliar $|C_2 - C_1| < 10^{-6}$, $|D_2 - D| < 10^{-6}$ ou $|D_2 - D_1| < 10^{-6}$ como possíveis critérios de parada deste exemplo.

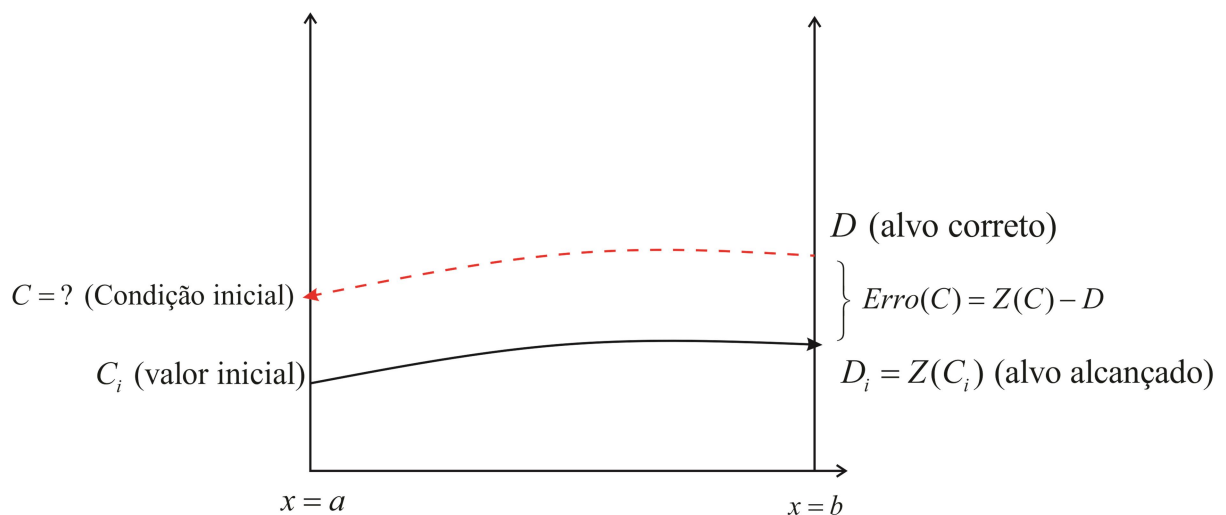
Determinando C pelo método de Newton:

Vamos determinar C diretamente por meio da equação do erro entre o alvo atingido e o alvo correto, $erro(C) = Z(C) - D = 0$, em função da condição C desconhecida, aplicando o método de Newton com derivadas numéricas (método da secante).

Observe, no Gráfico 9.8, o Erro entre o alvo atingido $D_i = Z(C_i)$, via resolução da EDO, e o alvo correto D conhecido. A mira correta C será atingida quando o $erro(C) = Z(C) - D = 0$. LINK Observe que a equação desse erro é calculada sempre em relação à condição de contorno correta, no caso $y_1(b) = y(b) = D$ (conhecida).

FIM LINK

Gráfico 9.8 – Erro entre o alvo atingido D_i e o alvo correto D



Fonte: Elaboração própria

Observe que, para cada valor inicial de C_i (mira), fica definida a condição inicial $y_2(x=0) = C_i$ do sistema de PVIs. Então resolvemos as EDOs pelos métodos disponíveis para PVIs e obtemos o valor final para $y_1(x=1) = D_i$ (alvo atingido), que

seria equivalente a uma função $Z(C_i) = D_i$ (condição de contorno calculada). Inicialmente, o valor D_i está errado, mas o valor correto em $x = 1$ está disponível, dado por $y_1(x = 1) = D = 9.389056098930666$ (alvo correto). Logo, o valor correto de C deve satisfazer a equação $erro(C) = Z(C) - D = 0$, que pode ser resolvida pelo método de Newton com derivadas numéricas.

DESTAQUE Esse mesmo método de Newton pode ser estendido para problemas de valor no contorno com duas ou mais condições iniciais desconhecidas, bastando gerar e resolver duas ou mais equações de erro entre os alvos atingidos, pela própria solução numérica do sistema de PVIs, e os alvos corretos conhecidos, conforme o **Exercício 9.6**. FIM DESTAQUE

Depois de determinar o valor da condição inicial desconhecida, $C = 1$, conforme algoritmo apresentado, devemos determinar a solução da EDO e estimar o erro máximo em função do número n de subintervalos estabelecido.

Mas como vamos medir o erro máximo da solução $y(x)$ se nos dois contornos (extremos) os erros são nulos? Onde estará o erro máximo?

Possivelmente o maior erro estará no meio no intervalo $x \in [0, 1]$. Podemos estimar o erro máximo comparando a solução aproximada com n subdivisões com outra solução aproximada com $2n$ subdivisões no ponto médio, por exemplo, ou calculá-lo nos vários pontos discretos e tomar o seu valor máximo.

Neste **Exemplo 9.6**, podemos validar essa estimativa de erro comparando-o com o erro exato, conforme algoritmo correspondente, e determinar o n mínimo por sucessivas tentativas.

Resultados:

Com $n = 18$ obtemos:

$C = 1.00000377206141$ pelo *shooting method*, obtido em 2 iterações.

$C = 1.00000377206141$ pelo método de Newton, obtido também em 2 iterações.

Erro exato máximo de y_1 é $2.81176553951212e-06$ e ocorre em $x = 0.6666667$.

Erro estimado máximo no meio do domínio, $x = 0.5$, é $2.18895585768486e-06$.

Erro estimado máximo, a partir de todos os pontos discretos, é $2.62705417908293e-06$ (nesse caso, recalculamos C e a solução aproximada y_1 com $2n$ subdivisões). Neste caso, todos os erros tem a mesma ordem.

Confira no **Caderno de Algoritmos** os arquivos **Cap9exep9.6ShootingNewton2.m** e **Cap9exem9.6NR2.m** com os algoritmos que resolvem o **Exemplo 9.6**, determinando C via *shooting method* e via método de Newton, respectivamente.

9.5 Conclusões

Neste último Capítulo da obra, apresentamos uma abordagem superficial da solução numérica das EDOs, visando suprir os tópicos constantes nos programas de disciplinas dos cursos de graduação e resolver os modelos matemáticos básicos que utilizam essa ferramenta. Como nem todas as EDOs têm solução analítica conhecida, recorreremos aos métodos numéricos para a solução delas. Os métodos de passo simples da família Runge-Kutta são amplamente usados para resolver EDOs por fornecerem resultados precisos e com baixo esforço computacional.

O próximo passo nessa área é a solução numérica das EDPs por meio de métodos clássicos como diferenças finitas, elementos finitos, volumes finitos. Para o método dos volumes finitos, indicamos a obra “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”, de C. R. Maliska (2004).

COMPLEMENTANDO...

Solução exata de $y' = x - y + 2$ para os Exemplos 9.1, 9.2, 9.3:

Reescrevendo:

$y' + y = x + 2 \Rightarrow$ multiplicando um fator integrante $u(x)$ desconhecido em ambos os lados, temos:

$$\left(\frac{dy}{dx} + y\right)u(x) = (x + 2)u(x) \Rightarrow u(x)\frac{dy}{dx} + u(x)y(x) = (x + 2)u(x)$$

Se, no lado esquerdo, tivéssemos apenas a derivada do produto $u(x)y(x)$,

isso poderia facilitar a integração. Ou seja,

$$\text{Se } \frac{d(u(x) * y(x))}{dx} = u(x) * \frac{dy(x)}{dx} + \frac{du(x)}{dx} * y(x)$$

$$\text{For igual a } u(x) * \frac{dy(x)}{dx} + u'(x) * y(x)$$

Comparando termo a termo, o fator integrante $u(x)$, caso exista, deverá satisfazer:

$$\frac{du(x)}{dx} = u(x)$$

Resolvendo essa equação de variáveis separáveis, temos:

$$\frac{du(x)}{u(x)} = dx \Rightarrow \int \frac{du(x)}{u(x)} = \int dx \Rightarrow \ln(u(x)) = x + C$$

Agora, escolhendo um valor adequado $C = 0$, temos:

$$u(x) = e^x$$

Substituindo o nosso fator integrante $u(x)$, temos:

$$\left(\frac{dy}{dx} + y\right)u(x) = \left(\frac{dy}{dx} + y\right)e^x = e^x * \frac{dy}{dx} + e^x * y = \frac{d(e^x * y(x))}{dx}$$

assim podemos trocar o termo

$$\left(\frac{dy}{dx} + y\right)e^x \text{ por } \frac{d(e^x * y(x))}{dx}$$

e a nossa EDO fica:

$$\left(\frac{dy}{dx} + y\right)e^x = \frac{d(e^x * y(x))}{dx} = (x + 2) * e^x \Rightarrow$$

$$\frac{d(e^x * y(x))}{dx} = (x + 2) * e^x$$

Integrando

$$\int d(e^x * y(x)) = \int (x + 2) * e^x dx \Rightarrow e^x * y(x) = \int x * e^x dx + \int 2 * e^x dx$$

Integrando $\int x * (e^x * dx) = x * e^x - \int e^x * 1 * dx$ por partes $\int u dv = u * v - \int v du$, obtemos

$$\int x * e^x * dx = x * e^x - e^x \Rightarrow \int x * e^x dx = (x - 1) * e^x \text{ e}$$

Integrando $\int 2 * e^x * dx = 2 * e^x$ diretamente, temos

$$e^x * y(x) = (x - 1) * e^x + 2 * e^x + c$$

$$e^x * y(x) = (x+1) * e^x + c$$

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

Aplicando a condição inicial $y(0) = 2$, temos $y(x=0) = (0+1) + c * e^{-0} = 2 \Rightarrow c = 1$.

Logo, a solução é dada por:

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