

# Solução numérica de equações diferenciais ordinárias

Irineu Lopes Palhares Junior

FCT/UNESP,  
[irineu.palhares@unesp.br](mailto:irineu.palhares@unesp.br)



## Informações sobre os conteúdos

- 1 Problema de valor inicial
- 2 Aplicação de diferenciação numérica
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Métodos de Runge-Kutta
- 6 Análise de convergência e estabilidade
- 7 Métodos multi-passos

# Problema de valor inicial

A razão para se estudar métodos numéricos para aproximar soluções de problema de valor inicial (PVI) é a dificuldade de se encontrar, analiticamente, as soluções da equação. Em muitos casos, a teoria garante existência e unicidade de solução, mas não sabemos qual é a expressão analítica desta solução.

Os métodos que estudaremos aqui se baseiam em: dado o PVI:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (1)$$

construímos  $x_1, x_2, \dots, x_n$  que, embora não necessariamente, para nós serão igualmente espaçados, ou seja:  $x_{i+1} - x_i = h$ .

## Example

Seja o PVI:

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

## Example

$$\begin{aligned} y' &= t - 3y, \quad t \in [0, 2] \\ y(0) &= 1 \end{aligned} \quad (3)$$

# Aplicação de diferenciação numérica

- A fórmula progressiva, que dada por:

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - \frac{h}{2}y''(\xi) \quad (4)$$

- Fórmula regressiva

$$y'(x) = \frac{y(x) - y(x-h)}{h} + \frac{h}{2}y''(\xi) \quad (5)$$

- Fórmula centrada

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}y''(\xi) \quad (6)$$

# Método de passo um (ou passo simples) - Euler

Um método numérico que podemos aplicar à solução aproximada de um PVI:  $y' = f(x, y)$ ,  $y(x_0) = y_0$  é o método de Euler, o qual consiste em: como conhecemos  $x_0$  e  $y_0 = y(x_0)$ , então sabemos calcular  $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$ . Assim, a reta que passa por  $(x_0, y_0)$  com coeficiente angular  $y'(x_0)$ ,  $r_0(x)$  é conhecida:

$$r_0(x) = y(x_0) + (x - x_0) y'(x_0) \quad (7)$$

Escolhido  $h = x_{k+1} - x_k$ ,  $y(x_1) \approx y_1 = r_0(x_1) = y_0 + hy'(x_0)$ , ou seja,

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0). \quad (8)$$

# Método de Euler - GRAFICAMENTE

O raciocínio é repetido com  $(x_1, y_1)$  e  $y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$  e assim, sucessivamente, o método de Euler nos fornece

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

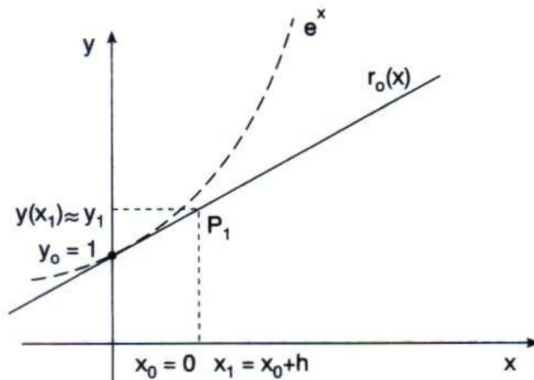


Figura 1: Método de Euler.

## Example

Seja o PVI:

$$\begin{aligned}y' &= y, \quad t \in [0, 2] \\ y(0) &= 1\end{aligned}\tag{10}$$

Trabalhando com quatro casas decimais, use o método de Euler para aproximar  $y(0.04)$  com  $\epsilon \leq 5 \times 10^{-4}$ .



Os métodos que usam o desenvolvimento em série de Taylor de  $y(x)$  teoricamente fornecem soluções para qualquer equação diferencial. No entanto, do ponto de vista computacional, os métodos de série de Taylor de ordem mais elevada são considerados inaceitáveis pois, a menos de uma classe restrita de funções  $f(x, y)$ , o cálculo das derivadas totais envolvidas é extremamente complicado.

## Example

Calcular  $y(2.1)$  usando a série de Taylor de 2ª ordem para o PVI:

$$\begin{aligned} xy' &= x - y \\ y(2) &= 2. \end{aligned} \tag{11}$$

# Métodos Runge-Kutta

A idéia básica destes métodos é aproveitar as qualidades dos métodos de série de Taylor e ao mesmo tempo eliminar seu maior defeito que é o cálculo de derivadas de  $f(x, y)$  que, conforme vimos, torna os métodos de série de Taylor computacionalmente inaceitáveis.

Podemos dizer que os métodos de Runge-Kutta de ordem  $p$  se caracterizam pelas três propriedades:

- são de passo um;
- não exigem o cálculo de qualquer derivada de  $f(x, y)$ ; pagam por isso, o preço de calcular  $f(x, y)$  em vários pontos;
- após expandir  $f(x, y)$  por Taylor para função de duas variáveis em torno de  $(x_n, y_n)$  e agrupar os termos semelhantes, sua expressão coincide com a do método de série de Taylor de mesma ordem.

# Métodos de Runge-Kutta de 1ª ordem - método de Euler

Já vimos que o método de Euler é um método de série de Taylor de 1ª ordem:

$$y_{n+1} = y_n + hy', \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (12)$$

então,

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

e o método de Euler satisfaz as três propriedades acima que o caracterizam como um método de Runge-Kutta de ordem  $p = 1$ .

# Métodos de Runge-Kutta de 2ª ordem - Euler melhorado

Exporemos inicialmente um método particular que é o método de Heun, ou método de Euler Aperfeiçoado, pois ele tem uma interpretação geométrica bastante simples.

Conforme o próprio nome indica, este método consiste em fazer mudanças no método de Euler para assim conseguir um método de ordem mais elevada.

# Método de Euler Aperfeiçoado - GRAFICAMENTE

O valor fornecido para  $y_{n+1}$  pelo método de Euler Aperfeiçoado é:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hy'_n)] , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

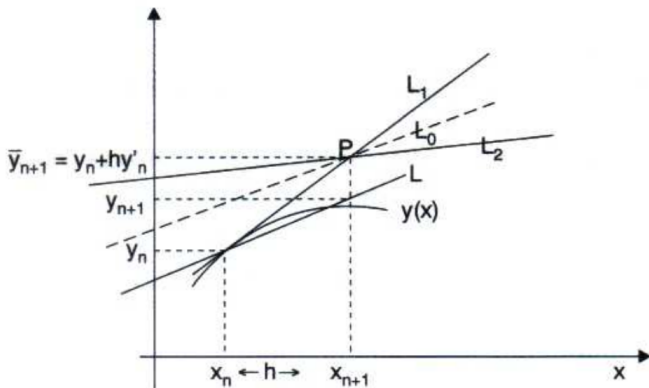


Figura 2: Euler aperfeiçoado.

# Verificar que o método de Euler Aperfeiçoado tem ordem 2

Observamos que este método é de passo um e só trabalha com cálculos de  $f(x, y)$ , não envolvendo suas derivadas. Assim, para verificarmos que ele realmente é um método de Runge-Kutta de 2ª ordem, falta verificar se sua fórmula concorda com a do método de série de Taylor até os termos de 2ª ordem em  $h$ :

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} f_x(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} f(x_n, y_n) f_y(x_n, y_n) \quad (15)$$

com  $e(x_{n+1}) = \frac{h^2}{3!} y'''(\xi_{n+1})$ .

# Runge-Kutta de segunda ordem (General formula)

In the forward Euler method, we used the information on the slope or the derivative of  $y$  at the given time step to extrapolate the solution to the next time-step. The LTE for the method is  $O(h^2)$ , resulting in a first order numerical technique. Runge-Kutta methods are a class of methods which judiciously uses the information on the 'slope' at more than one point to extrapolate the solution to the future time step. Let's discuss first the derivation of the second order RK method where the LTE is  $O(h^3)$ . Given the IVP of Eq. 6, and a time step  $h$ , and the solution  $y_n$  at the  $n$ th time step, let's say that we wish to compute  $y_{n+1}$  in the following fashion:

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(y_n, t_n) \\k_2 &= hf(y_n + \beta k_1, t_n + \alpha h) \\y_{n+1} &= y_n + ak_1 + bk_2\end{aligned}\tag{16}$$



## Runge-Kutta 2

where the constants  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $a$  and  $b$  have to be evaluated so that the resulting method has a LTE  $O(h^3)$ . Note that if  $k_2 = 0$  and  $a = 1$ , then Eq. reduces to the forward Euler method.

Now, let's write down the Taylor series expansion of  $y$  in the neighborhood of  $t_n$  correct to the  $h^2$  term i.e.,

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h \frac{dy}{dt} \Big|_{t_n} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2} \Big|_{t_n} + O(h^3). \quad (17)$$

However, we know from the IVP that  $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$  so that

$$\frac{d^2y}{dt^2} = \frac{df(t, y)}{dt} = f_t + ff_y. \quad (18)$$

# Construction of the RK2

So from the above analysis, we get

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n, t_n) + \frac{h^2}{2} (f_t + ff_y) + O(h^3). \quad (19)$$

However, the term  $k_2$  in the proposed RK method can be expanded correct to  $O(h^3)$  as

$$\begin{aligned} k_2 &= hf(t_n + \alpha h, y_n + \beta k_1) \\ &= h(f(t_n, y_n + \alpha hf_t) + \beta k_1 f_t) + O(h^3). \end{aligned} \quad (20)$$

# Determination of the constants

Comparing the terms with identical coefficients gives us the following system of equations to determine the constants:

$$\begin{aligned}a + b &= 1 \\ \alpha b &= \frac{1}{2} \\ \beta b &= \frac{1}{2}.\end{aligned}\tag{21}$$

There are infinitely many choices of  $a$ ,  $b$ ,  $\alpha$  and  $\beta$  which satisfy Eq., we can choose for instance  $\alpha = \beta = 1$  and  $a = b = \frac{1}{2}$ . With this choice, we have the classical second order accurate Runge-Kutta method (RK2) which is summarized as follows.

# Algorithm of the RK2 method

The Second Order Runge-Kutta Method (RK2) is given as

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(t_n, y_n) \\k_2 &= hf(y_n + k_1, t_n + h) \\y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)\end{aligned}\tag{22}$$

# Método Runge-Kutta de ordem 4

O mais usado e popular dos métodos Runge-Kutta é o método de ordem 4, também conhecido como método Runge-Kutta clássico.

Seja o problema de valor inicial dado a seguir:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0. \quad (23)$$

Here  $y$  is an unknown function (scalar or vector) of time  $t$ , which we would like to approximate; we are told that  $\frac{dy}{dt}$ , the rate at which  $y$  changes, is a function of  $t$  and of  $y$  itself. At the initial time  $t_0$  the corresponding  $y$  value is  $y_0$ . The function  $f$  and the initial conditions  $t_0, y_0$  are given.

Now we pick a step-size  $h > 0$  and define:

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\t_{n+1} &= t_n + h\end{aligned}\tag{24}$$

for  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , using[3]

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_n, y_n), \\k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + h\frac{k_1}{2}\right), \\k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + h\frac{k_2}{2}\right), \\k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3).\end{aligned}\tag{25}$$

Here  $y_{n+1}$  is the RK4 approximation of  $y(t_{n+1})$ , and the next value ( $y_{n+1}$ ) is determined by the present value ( $y_n$ ) plus the weighted average of four increments, where each increment is the product of the size of the interval,  $h$ , and an estimated slope specified by function  $f$  on the right-hand side of the differential equation.

- $k_1$  is the slope at the beginning of the interval, using  $y$  (Euler's method);
- $k_2$  is the slope at the midpoint of the interval, using  $y$  and  $k_1$ ;
- $k_3$  is again the slope at the midpoint, but now using  $y$  and  $k_2$ ;
- $k_4$  is the slope at the end of the interval, using  $y$  and  $k_3$ .

In averaging the four slopes, greater weight is given to the slopes at the midpoint. If  $f$  is independent of  $y$ , so that the differential equation is equivalent to a simple integral, then RK4 is Simpson's rule.[5]

The RK4 method is a fourth-order method, meaning that the local truncation error is on the order of  $O(h^5)$ , while the total accumulated error is on the order of  $O(h^4)$ .

In many practical applications the function  $f$  is independent of  $t$  (so called autonomous system, or time-invariant system, especially in physics), and their increments are not computed at all and not passed to function  $f$ , with only the final formula for  $t_{n+1}$  used.



# Figura RK4

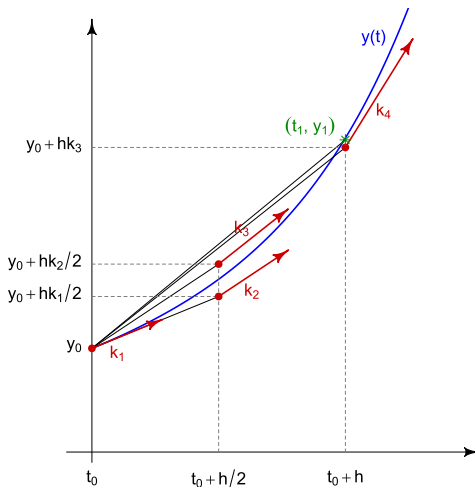


Figura 3: Slopes do método RK4

# Análise de convergência e estabilidade

Seja  $y(x_n)$  a solução exata do PVI

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y) \\ y(a) &= \alpha\end{aligned}\tag{26}$$

no ponto  $x_n$  e  $y_n$  uma aproximação obtida por um método numérico para essa solução.

## Definition

O erro global no ponto  $x_n$  é definido por

$$e_n = y(x_n) - y_n.\tag{27}$$

A análise do erro global nos permite estabelecer a convergência de um método. Esta é uma propriedade muito desejável para um método numérico, pois ela irá nos garantir que ao refinarmos a malha o resultado numérico se torna mais próximo do resultado exato.

# Definição de convergência

## Definition

Dizemos que um método numérico é convergente se o erro global  $e_n$  converge para zero quando  $n$  tende para infinito de maneira que o ponto  $x_n$  permaneça fixo.

Isto quer dizer que a convergência está sendo analisada no ponto  $x_n = a + nh$  e para que este ponto permaneça fixo, a quantidade  $nh$  deve permanecer fixa, portanto se  $n$  tende para infinito necessariamente  $h$  deve tender a zero, ou seja, a malha está sendo refinada para cada novo valor de  $n$  da sequência. É possível verificar a convergência de um método numérico diretamente a partir de sua definição. No entanto esta é uma maneira muito trabalhosa e é então preferível fazê-lo indiretamente utilizando os conceitos de consistência e zero-estabilidade.

Os conceitos estudados anteriormente, convergência, consistência e zero-estabilidade, dizem respeito a  $h \rightarrow 0$ . No entanto, quanto menor o valor de  $h$ , tanto maior será o número de cálculos que deverão ser efetuados para produzir uma solução aproximada em determinado ponto  $x$ , fixado. Isto pode levar a um acúmulo, não controlado, de erros e nesse caso dizemos que esse método é *não estável* ou *instável*. A estabilidade ( $h$  fixo) é muito importante para problemas que exigem um número muito grande de aplicações repetidas de um método para obter a solução em um dado intervalo.

# Mais discussão sobre estabilidade

Como em geral não é possível prever o número de passos necessários para obtenção da solução, é aconselhável que, por precaução, tenhamos um controle do comportamento do erro, isto é, um controle da propagação do erro. Na verdade, a escolha do tamanho  $h$  da malha está intimamente ligada à estabilidade do método, e é o parâmetro através do qual é possível exercer esse controle. Podemos interpretar um método numérico como uma máquina de produzir números a partir de dados iniciais. Como esses dados iniciais contêm sempre erro (de arredondamento do computador por exemplo), se essa máquina tiver o defeito de amplificá-los, em pouco tempo o crescimento do erro dominará a solução produzida pela máquina e esta perderá o seu significado.

Conforme vimos os métodos de passo simples precisam de informação sobre a solução apenas em  $x = x_n$  para achar uma aproximação para  $y(x_n + h)$ ; no entanto, eles exigem o cálculo de derivadas ou o cálculo de  $f(x, y)$  em vários outros pontos.

A característica dos métodos de passo múltiplo é que eles usam informações sobre a solução em mais de um ponto. Inicialmente vamos supor que conhecemos aproximações para  $y(x)$  em  $x_0, x_1, \dots, x_n$  e que  $x_{i+1} - x_i = h$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ . Exporemos aqui uma classe de métodos de passo múltiplo que é baseada no princípio de integração numérica conhecido como métodos de Adams-Bashforth; a idéia é integrar a equação diferencial  $y' = f(x, y)$  de  $x_n$  até  $x_{n+1}$ .

# Métodos de passo múltiplo - ideia central

A ideia central dos métodos de passo múltiplo é integrar o PVI entre  $x_n$  e  $x_{n+1}$ , isto é,

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x) dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \quad (28)$$

que implica em

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx. \quad (29)$$

Dessa forma,

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \quad (30)$$

e devemos então aproximar  $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$  por uma fórmula de quadratura numérica por nós escolhida.

## Example

Obtenha a interpolação pelo método de Lagrange a partir dos dados abaixo:

$x$	$-1$	$0$	$3$
$f(x)$	$15$	$8$	$-1$

Tabela 1: Dados para interpolação.



# Algumas considerações sobre o erro na interpolação

Como vimos, o polinômio de interpolação  $p(n)(x)$  para um função  $y = f(x)$  sobre um conjunto de pontos distintos  $x_0, x_1, \dots, x_n$  tem a propriedade:

$$p_n(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (31)$$

Nos pontos  $\bar{x} \neq x_k$  nem sempre é verdade que  $p_n(\bar{x}) = f(\bar{x})$ . Entretanto, para avaliar  $f(x)$  nos pontos  $\bar{x} \neq x_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ , consideramos  $p_n(x)$  como uma aproximação para a função  $y = f(x)$  em um intervalo que contenha os pontos  $x_0, x_1, \dots, x_n$  e calculamos  $f(\bar{x})$  através de  $p_n(\bar{x})$ . Perguntas que surgem são, por exemplo, as seguintes: é o polinômio de interpolação uma boa aproximação para  $f(x)$ ? Podemos ter idéia do erro que cometemos quando substituímos  $f(x)$  por  $p_n(x)$ ? Estas e outras perguntas são respondidas quando estudamos a teoria do termo do erro. Para isto, introduziremos dois lemas.

# Teoremas auxiliares (lemas) para o erro de interpolação

## Theorem (Teorema de Rolle)

*Seja  $f(x)$  contínua em  $[a, b]$  e diferenciável em cada ponto de  $(a, b)$ . Se  $f(a) = f(b)$ , então existe um ponto  $x = \xi$ ,  $a < \xi < b$ , tal que  $f'(\xi) = 0$ .*

## Theorem (Teorema de Rolle generalizado)

*Seja  $n \geq 2$ . Suponhamos que  $f(x)$  seja contínua em  $[a, b]$  e que  $f^{(n-1)}(x)$  exista em cada ponto de  $(a, b)$ . Suponhamos que  $f(x_1) = f(x_2) = \dots = 0$  para  $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$ . Então existe um ponto  $\xi$ ,  $x_1 < \xi < x_n$ , tal que  $f^{(n-1)}(\xi) = 0$ .*

## Theorem (First mean value theorem for integrals)

Suppose that  $u$  is continuous and  $v$  is integrable and nonnegative on  $[a, b]$ . Then

$$\int_a^b u(x)v(x)dx = u(c) \int_a^b v(x)dx \quad (32)$$

for some  $c \in [a, b]$ .

## Demonstração.

$u$  is integrable on  $[a, b]$ . Therefore, we have that the integral on the left exist. If  $m = \min u(x) : a \leq x \leq b$  and  $M = \max u(x) : a \leq x \leq b$ , then

$$m \leq u(x) \leq M \quad (33)$$

and, since  $v(x) \geq 0$ ,



# Continuação da demonstração

## Demonstração.

$$mv(x) \leq u(x)v(x) \leq Mv(x). \quad (34)$$

Therefore, we have

$$m \int_a^b v(x)dx \leq \int_a^b u(x)v(x)dx \leq M \int_a^b v(x)dx. \quad (35)$$

This implies that it holds for any  $c \in [a, b]$  if  $\int_a^b v(x)dx = 0$ . If  $\int_a^b v(x)dx \neq 0$ , let

$$\bar{u} = \frac{\int_a^b u(x)v(x)dx}{\int_a^b v(x)dx} \quad (36)$$

Since  $\int_a^b v(x)dx > 0$  in this case (why?), implies that  $m \leq \bar{u} \leq M$ , and the intermediate value theorem implies that  $\bar{u} = u(c)$  for some  $c$  in  $[a, b]$ .  $\square$

# Teorema sobre o erro de interpolação

## Theorem (Teorema do erro de interpolação)

Seja  $f(x)$  contínua em  $[a, b]$  e suponhamos que  $f^{(n+1)}(x)$  exista em cada ponto  $(a, b)$ . Se  $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ , então:

$$R_n(f; x) = f(x) - p_n(f; x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)}{(n + 1)!} f^{(n+1)}(\xi), \quad (37)$$

onde  $\min\{x, x_0, x_1, \dots, x_n\} < \xi < \max\{x, x_0, x_1, \dots, x_n\}$ . O ponto  $\xi$  depende de  $x$ .

Os métodos explícitos desta classe são obtidos quando trabalhamos com  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-m}$  para aproximar a integral do slide anterior.

Aproximamos  $f(x, y(x))$  pelo polinômio de grau  $m$ ,  $p_m(x)$  que interpola  $f(x, y)$  em  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-m}$  e então

$$y(x_{n+1}) = y_{x_n} + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_m(x) dx. \quad (38)$$

# Aproximação por polinômio de grau 3

Se, por exemplo, escolhermos  $m = 3$ , a função  $f(x, y(x))$  será aproximada pelo polinômio  $p_3(x)$  que a interpola nos pontos  $(x_n, y_n)$ ,  $(x_{n-1}, y_{n-1})$ ,  $(x_{n-2}, y_{n-2})$ ,  $(x_{n-3}, y_{n-3})$ , chamamos  $f_{n-j} = f(x_{n-j}, y_{n-j})$ ,  $j = 0, 1, 2, 3$ , teremos:

$$f(x, y(x)) = y'(x) \approx p_3(x), \quad (39)$$

onde

$$p_3(x) = L_{n-3}(x)f_{n-3} + L_{n-2}(x)f_{n-2} + L_{n-1}(x)f_{n-1} + L_n(x)f_n \quad (40)$$

e

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^3 \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)} \quad (41)$$

Assim, o método de passo múltiplo por nós escolhido é

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} [55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \quad (42)$$

que é um método de passo múltiplo explícito pois, para o cálculo de  $y_{n+1}$  usaremos  $y_n$ ,  $y_{n-1}$ ,  $y_{n-2}$  e  $y_{n-3}$ . ( $y_{n+1}$  tem forma explícita em função dos outros  $y_k$ ,  $k = n, n-1, n-2, n-3$ .)

Observamos que, neste caso, precisamos de quatro valores para iniciar o método.



# Exemplos

## Example

Utilize as ideias discutidas anteriormente para derivar o método de Adams-Bashforth explícito de 3 passos.

## Example

Seja o problema de valor inicial

$$y' = y - t^2 + 1, \quad 0 \leq t \leq 2, \quad y(0) = 0.5. \quad (43)$$

Utilizando o método de Runge-Kutta de ordem 4 e  $h = 0.2$  obtemos as seguintes aproximações  $y(0) = 0.5$  (condição inicial),  $y(0.2) \approx 0.8292933$ ,  $y(0.4) \approx 1.2140762$  e  $y(0.6) \approx 1.6489220$ . Utilize estes valores como valores iniciais do método explícito de ordem 4 de Adams-Bashforth para aproximar os valores de  $y(0.8)$  e  $y(1.0)$  e compare estas aproximações com as obtidas pelo método de Runge-Kutta de ordem 4.

# Métodos implícitos

Os métodos implícitos, da classe de métodos de passo múltiplo, são obtidos quando trabalhamos com  $x_{n+1}, x_n, \dots, x_{n-m}$ .

O método análogo ao que vimos anteriormente é quando trabalhamos com quatro pontos; portanto,  $m = 2$  e vamos usar  $(x_{n+1}, y_{n+1}), (x_n, y_n), (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_{n-2}, y_{n-2})$  da mesma forma como fizemos anteriormente:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_3(x) dx \\ &= y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} [L_{n-2}(x)f_{n-2} + L_{n-1}(x)f_{n-1} + L_n(x)f_n + L_{n+1}(x)f_{n+1}] dx \end{aligned} \quad (44)$$

onde

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=n-p \\ i \neq k}}^{n+1} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}. \quad (45)$$

Fazendo a mudança  $\frac{x-x_n}{h} = s$ , obtemos, de maneira análoga,

$$\begin{aligned}L_{n-2}(x) &= -\frac{1}{6} (s^3 - s) \\L_{n-1}(x) &= \frac{1}{2} (s^3 + s^2 - 2s) \\L_n(x) &= -\frac{1}{2} (s^3 + 2s^2 - s - 2) \\L_{n+1}(x) &= \frac{1}{6} (s^3 + 3s^2 + 2s) .\end{aligned}\tag{46}$$

# Fórmula para o método de 4 passos implícito

Assim,

$$y_{n+1} = y_n - \frac{h}{6}f_{n-2} \int_0^1 (s^3 - s) ds + \frac{h}{2}f_{n-1} \int_0^1 (s^3 + s^2 - 2s) ds - \frac{h}{2}f_n \int_0^1 (s^3 + 2s^2 - s - 2) ds + \frac{h}{6}f_{n+1} \int_0^1 (s^3 + 3s^2 + 2s) ds, \quad (47)$$

que resulta em

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} [9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] \quad (48)$$

que é um método de passo múltiplo implícito pois, no cálculo de  $y_{n+1}$  aparece  $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$ , ou seja, a fórmula não é explícita para  $y_{n+1}$ ; ele aparece em  $f(x_{n+1}, y_{n+1})$  no segundo membro.

Esta é a grande dificuldade dos métodos implícitos. Veremos como eles são utilizados nos métodos de previsão-correção, assunto da próxima aula.

## Example

Seja o PVI

$$\begin{cases} y' = 0.04y \Rightarrow f(x, y) = 0.04y \\ y(0) = 1000 \end{cases} \quad (49)$$

para o qual queremos usar o método de Adams-Bashforth explícito (desenvolvido em aula), para aproximar  $y(2)$ , com  $h = 0.2$ . Já observamos que, para iniciar este método precisamos de quatro valores. Como conhecemos a solução exata  $y(x) = 1000e^{0.04x}$ , vamos usar esta solução para encontrar  $y_0, y_1, y_2$  e, a partir de  $y_4$ , usar a fórmula explícita desenvolvida em aula.

## Example

Consider the initial-value problem

$$y' = y - t^2 + 1, \quad 0 \leq t \leq 2, \quad y(0) = 0.5. \quad (50)$$

Use the exact values given from  $y(t) = (t + 1)^2 - 0.5e^t$  as starting values and  $h = 0.2$  to compare the approximations from (a) by the explicit Adams-Bashforth four-step method and (b) Adams-Moulton three-step method.

# Erro dos métodos de passo múltiplo - Método explícito

A fórmula que estabelecemos

$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$  foi obtida quando aproximamos  $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_3(x) dx$  onde  $p_3(x)$  é o polinômio que interpola  $f(x, y(x))$  em  $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}$  e  $x_{n-3}$ . Sabemos, da teoria da interpolação, que:

$$f(x, y(x)) = p_3(x) + \frac{(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2})(x - x_{n-3})}{(3 + 1)!} f^{(iv)}(\xi_x, y(\xi_x)), \quad (51)$$

onde  $x_{n-3} < \xi < x_n$ .

# Construção do erro - método explícito

Integrando a equação do slide anterior, resulta em

$$\begin{aligned} \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_3(x) dx + \\ &+ \frac{1}{4!} \int_{x_n}^{x_{n+1}} (x - x_{n-3})(x - x_{n-2})(x - x_{n-1})(x - x_n) f^{(iv)}(\xi_x, y(\xi_x)) dx. \end{aligned} \quad (52)$$

Assim, o erro cometido é

$$\begin{aligned} e(x_{n+1}) &= \frac{1}{4!} \int_{x_n}^{x_{n+1}} (x - x_{n-3})(x - x_{n-2})(x - x_{n-1})(x - x_n) f^{(iv)}(\xi_x, y(\xi_x)) dx = \\ &= \frac{h^5}{4!} \int_0^1 (s+3)(s+2)(s+1)s f^{(iv)}(\xi_s, y(\xi_s)) ds. \end{aligned} \quad (53)$$



# Erro - método explícito

Como  $g(s) = s(s+1)(s+2)(s+3)$  não muda de sinal em  $[0, 1]$ , o Teorema do Valor Médio para integrais nos garante que existe  $\eta \in (0, 1)$  tal que:

$$\begin{aligned} \frac{h^5}{4!} \int_0^1 g(s) f^{(iv)}(\xi_s, y(\xi_s)) ds &= \frac{h^5}{4!} f^{(iv)}(\eta, y(\eta)) \int_0^1 g(s) ds = \\ \frac{h^5}{4!} f^{(iv)}(\eta, y(\eta)) \frac{251}{30}. \end{aligned} \quad (54)$$

Portanto:

$$e(x_{n+1}) = h^5 f^{(iv)}(\eta, y(\eta)) \frac{251}{720} = h^5 y^{(v)} \frac{251}{720}. \quad (55)$$

# Erro do método implícito

De forma completamente análoga obtemos uma expressão para o erro cometido no método visto aqui:

$$\begin{aligned}e(x_{n+1}) &= \frac{1}{4!} \int_{x_n}^{x_{n+1}} (x - x_{n-2})(x - x_{n-1})(x - x_n)(x - x_{n+1}) f^{(iv)}(\xi_x, y(\xi_x)) dx \\ &= \frac{h^5}{4!} \int_0^1 g(s) y^{(v)}(\xi_s) ds,\end{aligned}\tag{56}$$

onde  $g(s) = (s+2)(s+1)s(s-1) = (s+2)s(s^2-1)$  que é sempre menor ou igual a zero em  $[0, 1]$ . Assim, existe  $\eta \in (0, 1)$  tal que:

$$e(x_{n+1}) = \frac{h^5}{24} y^{(v)}(\eta) \left( -\frac{19}{30} \right) = -h^5 y^{(v)}(\eta) \frac{19}{720}.\tag{57}$$

# Considerações finais sobre os métodos de passo múltiplo - Parte 1

Podemos deduzir inúmeros métodos de passo múltiplo baseados em integração numérica, conforme fizemos aqui. Se, por exemplo, em vez de integrar  $f(x, y)$  de  $x_n$  até  $x_{n+1}$ , integrarmos de  $x_{n-p}$  até  $x_{n+1}$  para algum inteiro  $p \geq 0$ , e novamente aproximarmos  $f(x, y) = y'(x) \approx p_m(x)$  que interpola  $f$  em  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-m}$ , obteremos os métodos explícitos da forma:

$$y_{n+1} = y_{n-p} + h \int_{-p}^1 p_m(s) ds. \quad (58)$$

Note que se  $p = 0$  e  $m = 3$  teremos o método de Adams-Bashforth que deduzimos em aula.

# Considerações finais sobre os métodos de passo múltiplo - Parte 2

Uma das principais desvantagens de fórmulas de passo múltiplo é que, como dissemos, elas não se auto-iniciam. No exemplo passado, como conhecíamos a solução exata, usamos os valores dados por ela para iniciar nosso método; em geral os valores iniciais são obtidos por algum outro método do tipo série de Taylor ou Runge-Kutta; devemos, no entanto, tomar o cuidado de usar métodos que nos forneçam valores iniciais, pelo menos tão precisos quanto os que o método de passo múltiplo que vamos usar vai nos fornecer.

# Métodos de Previsão-Correção

Anteriormente falamos sobre métodos deduzidos por integração numérica. Tratamos com mais detalhes de uma classe particular de métodos explícitos de passo múltiplo. Em geral, fórmulas deduzidas por interpolação de  $f(x, y(x))$  em  $x_n$  e pontos anteriores são conhecidos como fórmulas do tipo abertas.

Deduzimos também um método implícito; métodos desse tipo, onde usamos também  $x_{n+1}$  para construir o polinômio de interpolação de  $f(x, y(x))$  são conhecidos como fórmulas fechadas.

A fórmula implícita que deduzimos é

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \quad (59)$$

e, a menos que  $f(x, y)$  seja uma função linear, em geral não seremos capazes de resolver a expressão acima para  $y_{n+1}$ .

# Métodos de previsão-correção: fórmula iterativa

O que fazemos então é tentar obter  $y_{n+1}$  da seguinte forma iterativa:

- i) por meio de um método explícito (corretamente escolhido) encontramos uma primeira aproximação  $y_{n+1}^{(0)}$  para  $y_{n+1}$ ;
- ii) calculamos então, para  $f_{n+1}$ , o valor  $f(x_{n+1}, y_{n+1}^0)$ ;
- iii) com o valor de  $f_{n+1}$  obtido em ii) encontramos uma próxima aproximação para  $y_{n+1}$ ,  $y_{n+1}^{(1)}$ , usando agora o método implícito que escolhemos;
- iv) voltamos para ii), onde agora calculamos, para  $f_{n+1}$ ,  $f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)})$  e assim vamos repetindo o processo até que duas aproximações sucessivas sejam tais que

$$|y_{n+1}^{(k)} - y_{n+1}^{(k-1)}| / |y_{n+1}^{(k)}| < \epsilon \quad (60)$$

onde  $\epsilon$  é a precisão desejada.

# Método previsor-corretor: algumas considerações

Observamos que, ao escolher  $\epsilon$  temos de considerar o erro da fórmula usada para calcular  $y_{n+1}^{(0)}$  bem como o tamanho do passo  $h$ .

Suponhamos que para achar  $y_{n+1}^{(0)}$  para a fórmula implícita que deduzimos desejamos usar o método de Adams-Bashforth:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}). \quad (61)$$

Quando usamos um par de fórmulas como o par acima, a fórmula explícita, tipo aberta, é chamada um previsor e a fórmula implícita, tipo fechada, é chamada um corretor.

A fórmula implícita que descrevemos é conhecida como a fórmula de Adams-Moulton de 4ª ordem.

# Algoritmo:

O par previsor-corretor, dado por Adams-Bashforth e Adams-Moulton, pode ser sintetizado no algoritmo abaixo: Dado um PVI e  $\epsilon > 0$ , e, determinados, de alguma forma,  $y_1$ ,  $y_2$  e  $y_3$ , para  $n = 3, 4, 5, \dots, N$ , faça:

a) calcule  $y_{n+1}^{(0)}$ , por

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}); \quad (62)$$

b) calcule  $f_{n+1}^{(0)} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})$ ;

c) para  $k = 1, 2, \dots$ , calcule

$$y_{n+1}^{(k)} = y_n + \frac{h}{24} [9f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}) + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}]. \quad (63)$$

d) continue as iterações até atingir um número máximo de iterações ou até que

$$|y_{n+1}^{(k)} - y_{n+1}^{(k-1)}| / |y_{n+1}^{(k)}| < \epsilon. \quad (64)$$



# Previsor-corretor: algumas considerações

Observamos que  $n$  é o número de nós que precisamos; por exemplo, se num PVI temos  $y(0)$  e queremos  $y(1)$ , com  $h = 0.1$ , então  $N = 10$ .

É natural questionarmos: i) Sob que condições temos garantia que  $\{y_{n+1}^{(k)}\}$  converge para  $y_{n+1}$ ? ii) Quantas iterações do corretor serão necessárias para atingir a convergência na precisão  $\epsilon$  desejada?

A experiência responde o item (ii) dizendo que, se o par previsor-corretor é da mesma ordem, apenas uma ou duas iterações do corretor serão necessárias para atingirmos a convergência, desde que  $h$  seja convenientemente escolhido.

A resposta à questão (i) se encontra no teorema a seguir, cuja demonstração pode ser encontrada em outras referências.

# Teorema - convergência do método predictor-corrector

## Theorem

*Se  $f(x, y)$  e  $\frac{\partial f}{\partial y}$  são contínuas em  $x$  e  $y$  em todo o intervalo  $[a, b]$ , as iterações do método corretor vão convergir, desde que  $h$  seja escolhido de tal forma que, para  $x = x_n$  e todo  $y$  com*

$$|y - y_{n+1}| \leq |y_{n+1}^{(0)} - y_{n+1}|, \quad h \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| < 2. \quad (65)$$

## Example

Seja o PVI:

$$\begin{cases} y' = -y^2 \\ y(1) = 1 \end{cases} \quad (66)$$

Sabendo que a solução é  $y(x) = \frac{1}{x}$  vamos usá-la para calcular  $y_1$ ,  $y_2$  e  $y_3$  para usar o previsor corretor do algoritmo. Para isto, use  $\epsilon = 10^{-4}$ .