

Introdução à Computação Numérica

Solução aproximada de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs)

Prof. Daniel G. Alfaro Vigo
dgalfaro@ic.ufrj.br
DCC-IC-UFRJ



CIÊNCIA DA
COMPUTAÇÃO

Parte I

Exemplos e conceitos básicos

Anteriormente estudamos vários métodos para o cálculo aproximado de integrais definidas:

$$I = \int_a^b f(x)dx.$$

Pela fórmula de Newton-Leibniz:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a),$$

onde $F(x)$ é uma primitiva de $f(x)$, ou seja $F'(x) = f(x)$ para todo x em $[a, b]$.

Como $F(x)$ não está definida de forma única podemos considerar que $F(a) = 0$, logo $I = F(b)$. Dessa forma chegamos no seguinte problema.

Calcular $y(b)$, sabendo que a função $y(x)$ satisfaz:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x) & \text{para } a \leq x \leq b, \\ y(a) = 0. \end{cases}$$

Como $F(x)$ não está definida de forma única podemos considerar que $F(a) = 0$, logo $I = F(b)$. Dessa forma chegamos no seguinte problema.

Calcular $y(b)$, sabendo que a função $y(x)$ satisfaz:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x) & \text{para } a \leq x \leq b, \\ y(a) = 0. \end{cases}$$

- Nesse problema temos que achar a função $y(x)$ conhecendo informação da sua derivada e seu valor em $x = a$.
- **Nem sempre é possível determinar analiticamente a função $y(x)$.**

A equação $y'(x) = f(x)$ é um caso particular de um tipo geral de equações conhecidas como **equações diferenciais ordinárias (EDOs)**, onde a função incógnita deve ser determinada a partir de uma equação envolvendo essa função e suas derivadas.

Em geral, a solução desse tipo de equação corresponde a uma família de funções e para obter uma função individual é necessário indicar condições adicionais.

Exemplo 1: Crescimento populacional (modelo de Malthus)

Determinar o tamanho de uma população: P , como função do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = rP, & t \geq 0 \\ P(0) = P_0 \end{cases}$$

onde r representa a taxa de crescimento e é uma constante positiva conhecida.

O tamanho inicial da população: P_0 é conhecido.

Exemplo 1: Crescimento populacional (modelo de Malthus)

Determinar o tamanho de uma população: P , como função do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = rP, & t \geq 0 \\ P(0) = P_0 \end{cases}$$

onde r representa a taxa de crescimento e é uma constante positiva conhecida.

O tamanho inicial da população: P_0 é conhecido.

A solução é dada por

$$P(t) = P_0 e^{rt}$$

Exemplo 2: Crescimento populacional (modelo de Verhulst)

Determinar o tamanho de uma população: P , como função do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{P_m} \right), & t \geq 0 \\ P(0) = P_0 \end{cases}$$

onde a taxa de crescimento máxima r e a capacidade de carga P_m são constantes positivas conhecidas.

O tamanho inicial da população: P_0 é conhecido.

Exemplo 2: Crescimento populacional (modelo de Verhulst)

Determinar o tamanho de uma população: P , como função do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{P_m} \right), & t \geq 0 \\ P(0) = P_0 \end{cases}$$

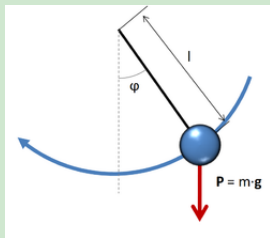
onde a taxa de crescimento máxima r e a capacidade de carga P_m são constantes positivas conhecidas.

O tamanho inicial da população: P_0 é conhecido.

A solução é dada por

$$P(t) = \frac{P_0 e^{rt}}{1 + (P_0/P_m)(e^{rt} - 1)}$$

Exemplo 3: Pêndulo simples



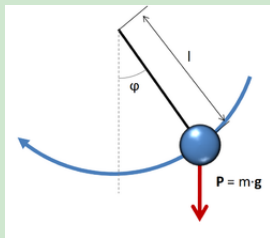
Calcular o ângulo φ como função do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi}{dt^2} = -\frac{g}{l} \operatorname{sen} \varphi, & t \geq 0 \\ \varphi(0) = \varphi_0 \\ \frac{d\varphi}{dt}(0) = w_0 \end{cases}$$

onde m é a massa do corpo, g a aceleração da gravidade e l a distância do corpo até o ponto de apoio.

O ângulo inicial φ_0 e a velocidade angular inicial w_0 são conhecidos.

Exemplo 3: Pêndulo simples



Calcular o ângulo φ como função do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi}{dt^2} = -\frac{g}{l} \sin \varphi, & t \geq 0 \\ \varphi(0) = \varphi_0 \\ \frac{d\varphi}{dt}(0) = w_0 \end{cases}$$

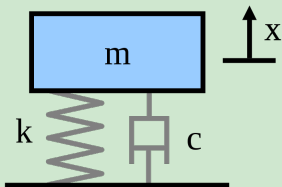
onde m é a massa do corpo, g a aceleração da gravidade e l a distância do corpo até o ponto de apoio.

O ângulo inicial φ_0 e a velocidade angular inicial w_0 são conhecidos.

Não é possível achar a solução usando funções elementares!

Exemplo 4: Sistema massa-mola com amortecimento

Calcular a posição x como função do tempo t , satisfazendo

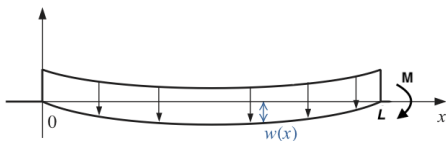


$$\begin{cases} m \frac{d^2 x}{dt^2} + c \frac{dx}{dt} + k x = 0, & t \geq 0 \\ x(0) = x_0 \\ \frac{dx}{dt}(0) = v_0 \end{cases}$$

onde m é a massa do corpo, k a rigidez da mola e c o coeficiente de amortecimento (constantes positivas).

A posição inicial x_0 e a velocidade inicial v_0 são conhecidos.

Exemplo 5: Deflexão de uma viga (Equação de Euler-Bernoulli)

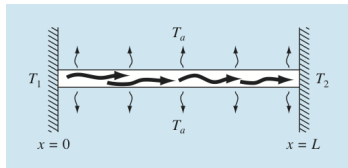


Calcular a deformação w como função da posição x , satisfazendo

$$\begin{cases} EI \frac{d^4 w}{dx^4} = q(x), & 0 \leq x \leq L \\ w(0) = \frac{dw}{dx}(0) = 0 & \text{(extremo engastado)} \\ w(L) = 0, \quad \frac{d^2 w}{dx^2}(L) = \frac{M}{EI} & \text{(extremo fixo, sob momento fletor)} \end{cases}$$

onde E é o modulo de Young, I o momento de inércia da seção transversal, L o comprimento da viga e $q(x)$ a carga distribuída.

Exemplo 6: Distribuição estacionária de temperatura em uma barra uniforme



Calcular a temperatura T como função da posição x , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{d^2 T}{dx^2} + h_0(T_a - T) = 0, & 0 \leq x \leq L \\ T(0) = T_1, \quad T(L) = T_2 \end{cases}$$

onde h_0 é o coeficiente de transferência de calor, T_a a temperatura do ar envolta da barra e L o comprimento da barra.

As temperaturas nos extremos da barra T_1 e T_2 são conhecidas.

Ordem da EDO

A ordem de uma EDO corresponde à ordem da derivada mais alta que aparece nela.

Ordem da EDO

A ordem de uma EDO corresponde à ordem da derivada mais alta que aparece nela.

Exemplos:

- Primeira ordem: [Exemplo 1](#) e [Exemplo 2](#).
- Segunda ordem: [Exemplo 3](#), [Exemplo 4](#) e [Exemplo 6](#).
- Quarta ordem: [Exemplo 5](#).

Linearidade e não linearidade

- A EDO é dita linear quando essa equação em relação à função incógnita e suas derivadas representa um polinômio de primeiro grau (que depende de várias variáveis).
- Em caso contrário a EDO é não linear.

Linearidade e não linearidade

- A EDO é dita linear quando essa equação em relação à função incógnita e suas derivadas representa um polinômio de primeiro grau (que depende de várias variáveis).
 - Em caso contrário a EDO é não linear.
-
- EDOs lineares: [Exemplo 1](#), [Exemplo 4](#), [Exemplo 5](#) e [Exemplo 6](#).
 - EDOs não lineares: [Exemplo 2](#) e [Exemplo 3](#).

Problemas de Valor Inicial para EDOs

- Para determinar uma solução individual de uma EDO, é necessário indicar **condições adicionais**.
- A quantidade de condições adicionais necessárias para isto é igual à ordem da EDO.

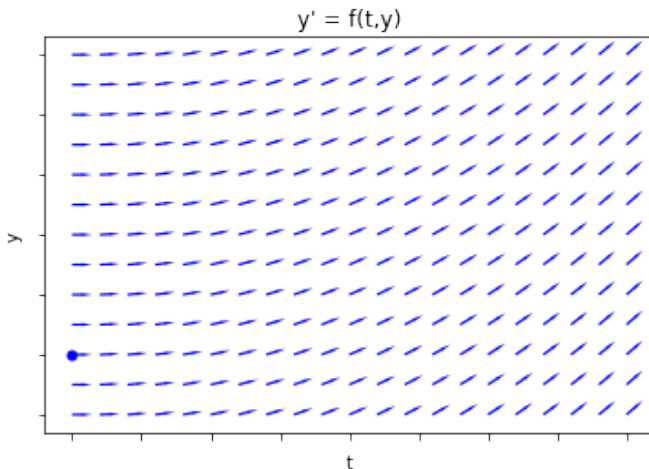
Problemas de Valor Inicial para EDOs

- Para determinar uma solução individual de uma EDO, é necessário indicar **condições adicionais**.
- A quantidade de condições adicionais necessárias para isto é igual à ordem da EDO.

Problema de Valor Inicial (PVI)

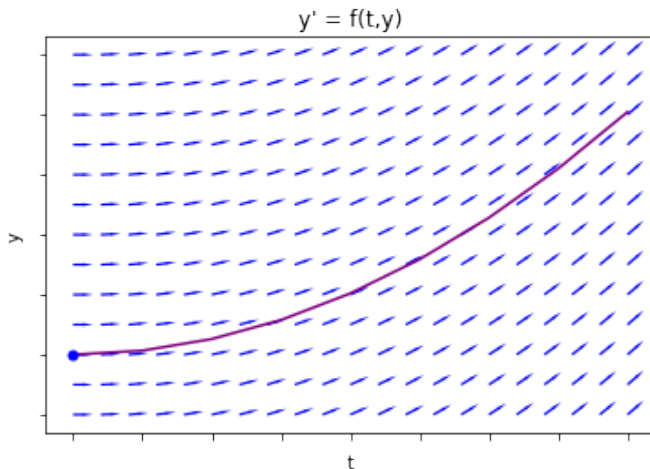
- Um **problema de valor inicial** para uma EDO consiste em determinar a solução da EDO conhecendo os valores da função incógnita e suas derivadas (de ordem menor que a ordem da EDO) apenas no extremo inicial do intervalo de interesse.
- Nesse caso as condições adicionais são denominadas de **condições iniciais** ou **dados iniciais**.

Problemas de Valor Inicial para EDOs



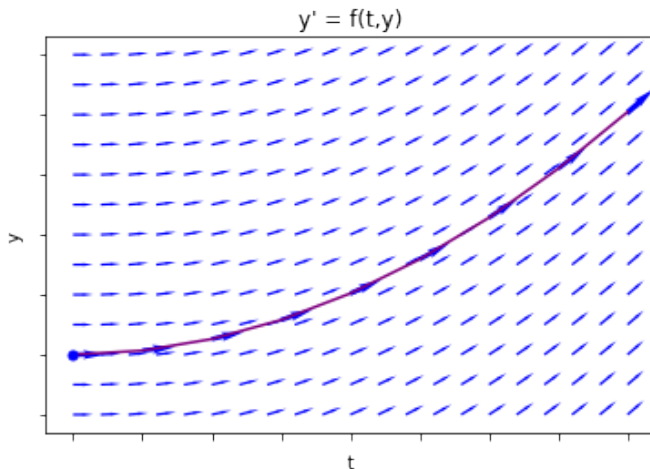
PVI: EDO + Dado inicial

Problemas de Valor Inicial para EDOs



PVI: EDO + Dado inicial \Rightarrow Solução individual (única!)

Problemas de Valor Inicial para EDOs



PVI: EDO + Dado inicial \Rightarrow Solução individual (única!)

Geralmente, nas aplicações um PVI está associado à determinação da evolução temporal de um sistema cuja dinâmica é governada por EDOs.

Exemplos de PVIs:

- ▶ Exemplo 1 ,
- ▶ Exemplo 2 ,
- ▶ Exemplo 3 ,
- ▶ Exemplo 4 .

Problema de Valor de Contorno (PVC)

- Um **problema de valor de contorno** para uma EDO consiste em determinar a solução da EDO quando as **condições adicionais** envolvem os valores da função incógnita e suas derivadas **nos dois extremos do intervalo** de definição da função incógnita.
- Nesse caso as condições adicionais são denominadas de **condições de contorno**.

Exemplos de PVCs:

- ▶ Exemplo 5 ,
- ▶ Exemplo 6 .

EDOs de ordens superiores e sistemas de EDOs

Uma EDO de ordem $m \geq 2$ pode ser re-escrita como um sistema de m EDOs de primeira ordem.

EDOs de ordens superiores e sistemas de EDOs

Uma EDO de ordem $m \geq 2$ pode ser re-escrita como um sistema de m EDOs de primeira ordem.

Exemplo: Considere a EDO que governa o movimento do pêndulo simples (Exemplo 3)

$$\varphi'' = -\frac{g}{l} \operatorname{sen} \varphi.$$

Introduzindo as funções incógnitas $y_1 = \varphi$ e $y_2 = \varphi'$ obtemos

$$\left. \begin{aligned} y_1' &= \varphi' = y_2 \\ y_2' &= \varphi'' = -\frac{g}{l} \operatorname{sen} \varphi = -\frac{g}{l} \operatorname{sen} y_1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{aligned} y_1' &= y_2 \\ y_2' &= -\frac{g}{l} \operatorname{sen} y_1 \end{aligned} \right.$$

Portanto, o PVI do Exemplo 3 toma a seguinte forma.

Calcular $y_1 = \varphi$ e $y_2 = \varphi'$, como funções do tempo $t \geq 0$, satisfazendo o sistema de EDOs de primeira ordem

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -\frac{g}{l} \sin y_1 \end{cases}$$

e as condições iniciais

$$y_1(0) = \varphi_0,$$

$$y_2(0) = w_0.$$

O ângulo inicial φ_0 e a velocidade angular inicial w_0 são conhecidos.

Exemplo 7: Sistema presa-predador (sistema de Lotka-Volterra)

Calcular o tamanho das populações de presas e predadores x_1 e x_2 , respectivamente, como funções do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_1 (a - b x_2), & t \geq 0 \\ \frac{dx_2}{dt} = (c x_1 - d) x_2 \\ x_1(0) = x_{10}, \quad x_2(0) = x_{20} \end{cases}$$

onde a é a taxa de crescimento da população de presas, d a taxa de mortes da população de predadores, e b, c as taxas que caracterizam os efeitos da interação presa-predador na morte das presas e no crescimento dos predadores, respectivamente.

A quantidade inicial de presas e predadores: x_{10} e x_{20} , são conhecidos.

Exemplo 8: Modelo epidemiológico SIR

Calcular as frações s , i e r de indivíduos suscetíveis, infectados e recuperados de uma população, respectivamente, como funções do tempo t , satisfazendo

$$\begin{cases} \frac{ds}{dt} = -\beta s i, & t \geq 0 \\ \frac{di}{dt} = \beta s i - \gamma i, \\ \frac{dr}{dt} = \gamma i, \\ s(0) = s_0, \quad i(0) = 0, \quad r(0) = r_0 \end{cases}$$

onde β é a taxa de contágio e γ a taxa de recuperação (constantes positivas conhecidas).

O tamanho inicial das frações: s_0 , i_0 e r_0 , são conhecidos.

Observações importantes

- EDOs são úteis para modelar as leis da natureza e outras relações quantitativas do mundo real.
- Elas estão por todo lado!
- Porém, em geral, **não é possível achar a solução analítica exata** para qualquer EDO.

- EDOs são úteis para modelar as leis da natureza e outras relações quantitativas do mundo real.
- Elas estão por todo lado!
- Porém, em geral, **não é possível achar a solução analítica exata** para qualquer EDO.

Precisamos de métodos aproximados!

Parte II

Solução aproximada de PVIs para EDOs

Forma genérica do PVI

$$(PVI) \quad \begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), & t_0 \leq t \leq t_f \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 \end{cases}$$

Observações

- Intervalo de interesse limitado ($t_f < +\infty$).
- EDO de primeira ordem, escrita na forma normal (a derivada de ordem mais alta está isolada no lado esquerdo).
- Para **sistemas de EDOs** consideramos que \mathbf{y} e \mathbf{f} são **funções vetoriais**.
- EDOs de ordens superiores podem ser re-escritas como sistemas de EDOs de primeira ordem.

Discretização do PVI

- Escolher uma **quantidade finita de pontos** no intervalo de interesse onde procuramos a função incógnita.
- Obter **relações quantitativas** apropriadas, partindo da EDO, para **calcular aproximações da solução** nesse conjunto discreto de pontos.
- Garantir que aumentando progressivamente a quantidade de pontos vamos obter aproximações cada vez melhores da solução.

- Consideramos um inteiro $N \geq 1$, definimos

$$\Delta t = \frac{t_f - t_0}{N},$$

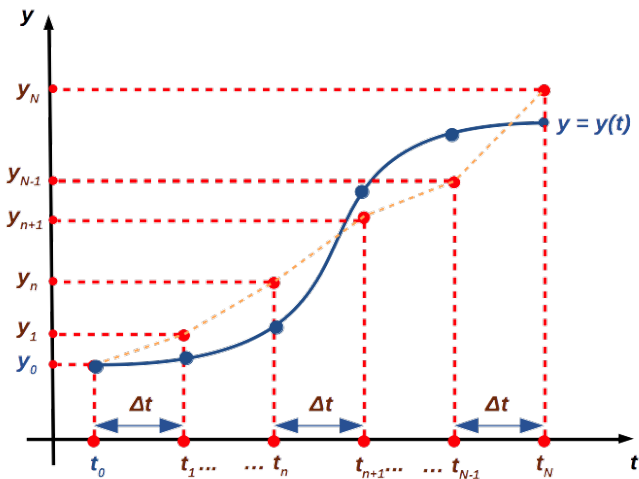
e discretizamos o intervalo $[t_0, t_f]$:

$$t_n = t_0 + n \Delta t, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

- Representamos por $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N$ as aproximações de $\mathbf{y}(t_1), \dots, \mathbf{y}(t_N)$, respectivamente.
- O objetivo é determinar:** $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N$, de forma tal que

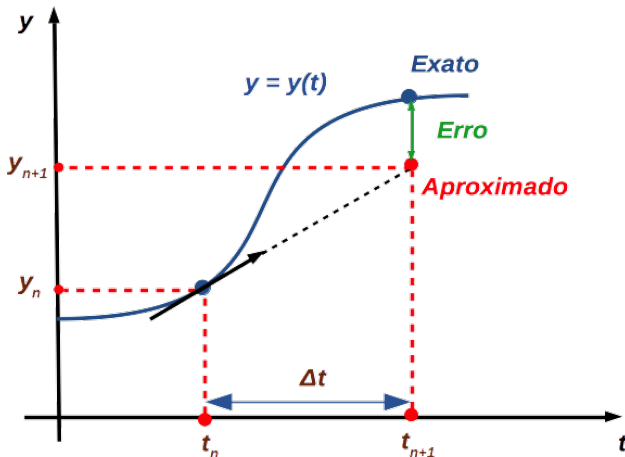
$$\mathbf{y}(t_1) \approx \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}(t_N) \approx \mathbf{y}_N.$$

Discretização do PVI: ideia geométrica



Método de Euler: ideia geométrica

Este famoso método foi publicado por L. Euler na sua obra *Institutionum Calculi Integralis* em 1768.



Método de Euler: dedução

- Suponha que conhecemos $\mathbf{y}(t_n)$ e queremos achar uma aproximação para $\mathbf{y}(t_{n+1})$.
- Usamos a **aproximação linear** de $\mathbf{y}(t)$ em torno de t_n .

Método de Euler: dedução

- Suponha que conhecemos $\mathbf{y}(t_n)$ e queremos achar uma aproximação para $\mathbf{y}(t_{n+1})$.
- Usamos a **aproximação linear** de $\mathbf{y}(t)$ em torno de t_n .

Da expansão de Taylor temos que

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t \mathbf{y}'(t_n) + \frac{1}{2} \mathbf{y}''(\tau_n) (\Delta t)^2,$$

donde $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Método de Euler: dedução

- Suponha que conhecemos $\mathbf{y}(t_n)$ e queremos achar uma aproximação para $\mathbf{y}(t_{n+1})$.
- Usamos a **aproximação linear** de $\mathbf{y}(t)$ em torno de t_n .

Da expansão de Taylor temos que

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t \mathbf{y}'(t_n) + \frac{1}{2} \mathbf{y}''(\tau_n) (\Delta t)^2,$$

donde $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Truncando e usando a EDO segue que

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) \approx \mathbf{y}(t_n) + \Delta t \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}(t_n)).$$

Método de Euler: dedução

- Suponha que conhecemos $\mathbf{y}(t_n)$ e queremos achar uma aproximação para $\mathbf{y}(t_{n+1})$.
- Usamos a **aproximação linear** de $\mathbf{y}(t)$ em torno de t_n .

Da expansão de Taylor temos que

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t \mathbf{y}'(t_n) + \frac{1}{2} \mathbf{y}''(\tau_n) (\Delta t)^2,$$

donde $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Truncando e usando a EDO segue que

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) \approx \mathbf{y}(t_n) + \Delta t \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}(t_n)).$$

Substituindo $\mathbf{y}(t_n)$ pela sua aproximação \mathbf{y}_n obtemos

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n).$$

Método de Euler

Dado y_0 , para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, calcular:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n).$$

Método de Euler

Dado y_0 , para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, calcular:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_n, y_n).$$

Observações:

- Consiste em calcular sucessivamente as aproximações y_1, \dots, y_N , a partir da condição inicial y_0 .
- y_{n+1} é obtida usando apenas y_n , ou seja, avançando no tempo a solução aproximada um passo de tamanho Δt .
- Δt é denominado de **tamanho do passo** de tempo;
- N representa o **número de passos** no tempo.

Exemplo

Dado o PVI:

$$\begin{cases} y' = 0.04 y, \\ y(0) = 1000. \end{cases}$$

Use o método de Euler para determinar $y(1)$ e ache também o erro cometido nessa aproximação comparando com o valor exato:

$$y(1) = 1000 e^{0.04} \approx 1040.810774192388.$$

- a) Com o passo $\Delta t = 1$.
- b) Com o passo $\Delta t = 0.1$.

Exemplo: solução

Temos $f(t, y) = 0.04y$ (observe que o t não aparece explicitamente no lado direito da EDO), $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $y_0 = 1000$.

$$\text{a) } \Delta t = (t_f - t_0)/N \Rightarrow 1 = 1/N \Rightarrow N = 1$$

Assim $t_1 = 1$ e y_1 será a aproximação de $y(1)$.

Exemplo: solução

Temos $f(t, y) = 0.04y$ (observe que o t não aparece explicitamente no lado direito da EDO), $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $y_0 = 1000$.

$$\text{a) } \Delta t = (t_f - t_0)/N \Rightarrow 1 = 1/N \Rightarrow N = 1$$

Assim $t_1 = 1$ e y_1 será a aproximação de $y(1)$.

Usando a fórmula do método

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_n, y_n) = y_n + \Delta t (0.04y_n) = (1 + 0.04\Delta t) y_n,$$

para $n = 0$ obtemos:

$$y(1) \approx y_1 = (1 + 0.04 \cdot 1) 1000 = 1040,$$

$y(1) \approx 1040.$

Exemplo: solução

Temos $f(t, y) = 0.04y$ (observe que o t não aparece explicitamente no lado direito da EDO), $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $y_0 = 1000$.

$$a) \Delta t = (t_f - t_0)/N \Rightarrow 1 = 1/N \Rightarrow N = 1$$

Assim $t_1 = 1$ e y_1 será a aproximação de $y(1)$.

Usando a fórmula do método

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_n, y_n) = y_n + \Delta t (0.04y_n) = (1 + 0.04\Delta t) y_n,$$

para $n = 0$ obtemos:

$$y(1) \approx y_1 = (1 + 0.04 \cdot 1) 1000 = 1040,$$

$y(1) \approx 1040.$

Para o erro absoluto obtemos:

$$\text{Erro} = |y(1) - y_1| \approx |1040.810774192388 - 1040| \approx 0.81.$$

Exemplo: solução (cont.)

$$\text{b) } \Delta t = (t_f - t_0)/N \quad \Rightarrow \quad 0.1 = 1/N \quad \Rightarrow \quad N = 10$$

Assim $t_1 = 0.1, t_2 = 0.2, \dots, t_{10} = 1$ e y_{10} será a aproximação de $y(1)$.

Exemplo: solução (cont.)

$$\text{b) } \Delta t = (t_f - t_0)/N \Rightarrow 0.1 = 1/N \Rightarrow N = 10$$

Assim $t_1 = 0.1, t_2 = 0.2, \dots, t_{10} = 1$ e y_{10} será a aproximação de $y(1)$.

$$n = 0 : y_1 = (1 + 0.04 \cdot 0.1)y_0 = 1.004 \cdot 1000 = 1004,$$

$$n = 1 : y_2 = 1.004 y_1 = 1.004 \cdot 1004 = 1008.016,$$

$$\vdots$$

$$n = 8 : y_9 = 1.004 y_8 = 1.004 \cdot 1032.451601977459 = 1036.581408385369,$$

$$n = 9 : y_{10} = 1.004 y_9 = 1.004 \cdot 1036.581408385369 = 1040.72773401891,$$

$$y(1) \approx 1040.72773401891.$$

Exemplo: solução (cont.)

$$\text{b) } \Delta t = (t_f - t_0)/N \Rightarrow 0.1 = 1/N \Rightarrow N = 10$$

Assim $t_1 = 0.1, t_2 = 0.2, \dots, t_{10} = 1$ e y_{10} será a aproximação de $y(1)$.

$$n = 0 : y_1 = (1 + 0.04 \cdot 0.1)y_0 = 1.004 \cdot 1000 = 1004,$$

$$n = 1 : y_2 = 1.004 y_1 = 1.004 \cdot 1004 = 1008.016,$$

$$\vdots$$

$$n = 8 : y_9 = 1.004 y_8 = 1.004 \cdot 1032.451601977459 = 1036.581408385369,$$

$$n = 9 : y_{10} = 1.004 y_9 = 1.004 \cdot 1036.581408385369 = 1040.72773401891,$$

$$y(1) \approx 1040.72773401891.$$

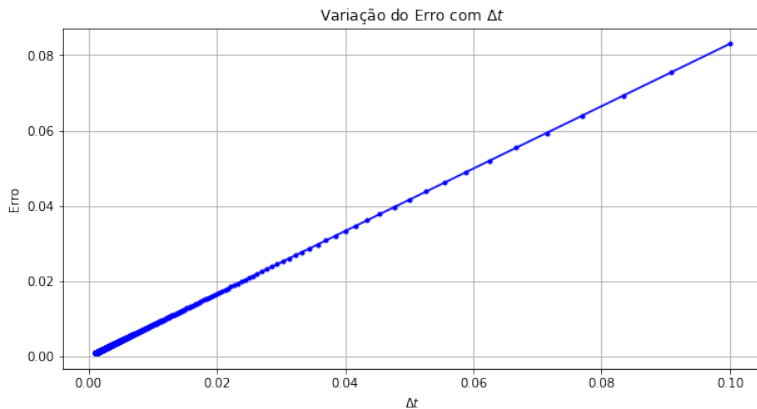
Para o erro absoluto obtemos:

$$\text{Erro} = |y(1) - y_{10}| \approx 0.083.$$

Exemplo: discussão

- Mudando o tamanho do passo Δt de 1 para 0.1, a aproximação de $y(1)$ melhorou, diminuindo o erro aproximadamente em 10 vezes.
- Para $\Delta t = 0.01$ obtemos a aproximação $y(1) \approx y_{100} = 1040.802449959209$ com erro absoluto aproximadamente igual a 0.0083, e para $\Delta t = 0.001$ obtemos que $y(1) \approx y_{1000} = 1040.809941566347$ com um erro absoluto aproximadamente igual a 0.00083.
- De novo, diminuindo em 10 vezes o tamanho do passo o erro também diminuiu aproximadamente em 10 vezes.
- Se continuarmos a diminuir progressivamente o tamanho do passo Δt , aumentando o número de passos N , as aproximações de $y(1)$ irão ficar cada vez melhores.

Exemplo: discussão



Comportamento do erro: $|y(1) - y_N|$ vs $\Delta t = 1/N$.

Dado o PVI:

$$\begin{cases} x z' = z + 2x e^{-z/x}, \\ z(1) = 0. \end{cases}$$

Use o método de Euler para determinar $z(3)$ e ache também o erro cometido nessa aproximação comparando com o valor exato:

$$z(3) = 2 \log(2 \log 3 + 1) \approx 3.486849341652001.$$

- a) Com o tamanho do passo 1.
- b) Com o tamanho do passo 0.2.

Mais um exemplo: solução

A função incógnita na EDO é $z(x)$, re-escrevendo na forma normal obtemos $f(x, z) = z/x + 2e^{-z/x}$. Nesse PVI: $x_0 = 1$, $x_f = 3$ e $z_0 = 0$.

Mais um exemplo: solução

A função incógnita na EDO é $z(x)$, re-escrevendo na forma normal obtemos $f(x, z) = z/x + 2e^{-z/x}$. Nesse PVI: $x_0 = 1$, $x_f = 3$ e $z_0 = 0$.

a) $\Delta x = (x_f - x_0)/N \Rightarrow 1 = 2/N \Rightarrow N = 2$

Assim $x_1 = 2$, $x_2 = 3$ e z_2 será a aproximação de $z(3)$.

Mais um exemplo: solução

A função incógnita na EDO é $z(x)$, re-escrevendo na forma normal obtemos $f(x, z) = z/x + 2e^{-z/x}$. Nesse PVI: $x_0 = 1$, $x_f = 3$ e $z_0 = 0$.

a) $\Delta x = (x_f - x_0)/N \Rightarrow 1 = 2/N \Rightarrow N = 2$

Assim $x_1 = 2$, $x_2 = 3$ e z_2 será a aproximação de $z(3)$.

Usando a fórmula do método

$$z_{n+1} = z_n + \Delta x f(x_n, z_n) = z_n + \Delta x (z_n/x_n + 2e^{-z_n/x_n}),$$

obtemos:

$$n = 0 : z_1 = 0 + 1 \cdot (0/1 + 2 \cdot e^{-0/1}) = 2,$$

$$n = 1 : z_2 = 2 + 1 \cdot (2/2 + 2 \cdot e^{-2/2}) = 3.7357588823428847$$

$$z(3) \approx 3.7357588823428847.$$

Mais um exemplo: solução

A função incógnita na EDO é $z(x)$, re-escrevendo na forma normal obtemos $f(x, z) = z/x + 2e^{-z/x}$. Nesse PVI: $x_0 = 1$, $x_f = 3$ e $z_0 = 0$.

a) $\Delta x = (x_f - x_0)/N \Rightarrow 1 = 2/N \Rightarrow N = 2$

Assim $x_1 = 2$, $x_2 = 3$ e z_2 será a aproximação de $z(3)$.

Usando a fórmula do método

$$z_{n+1} = z_n + \Delta x f(x_n, z_n) = z_n + \Delta x (z_n/x_n + 2e^{-z_n/x_n}),$$

obtemos:

$$n = 0 : z_1 = 0 + 1 \cdot (0/1 + 2 \cdot e^{-0/1}) = 2,$$

$$n = 1 : z_2 = 2 + 1 \cdot (2/2 + 2 \cdot e^{-2/2}) = 3.7357588823428847$$

$$z(3) \approx 3.7357588823428847.$$

Para o erro absoluto obtemos:

$$\text{Erro} = |z(3) - z_2| \approx 0.25.$$

Mais um exemplo: solução (cont.)

$$\text{b) } \Delta x = (x_f - x_0)/N \Rightarrow 0.2 = 2/N \Rightarrow N = 10$$

Assim $x_1 = 1.2, x_2 = 1.4, \dots, x_{10} = 3$ e z_{10} será a aproximação de $z(3)$.

Mais um exemplo: solução (cont.)

$$\text{b) } \Delta x = (x_f - x_0)/N \Rightarrow 0.2 = 2/N \Rightarrow N = 10$$

Assim $x_1 = 1.2, x_2 = 1.4, \dots, x_{10} = 3$ e z_{10} será a aproximação de $z(3)$.

$$\begin{aligned} n = 0 : z_1 &= z_0 + \Delta x (z_0/x_0 + 2e^{-z_0/x_0}) = 0 + 0.2 \cdot (0/1 + 2 \cdot e^{-0/1}) \\ &= 0.4 \end{aligned}$$

$$n = 1 : z_2 = 0.4 + 0.2 \cdot (0.4/1.2 + 2 \cdot e^{-0.4/1.2}) = 0.7532791908961824,$$

\vdots

$$n = 8 : z_9 = 3.160461908791895,$$

$$n = 9 : z_{10} = 3.515585868207156,$$

$$z(3) \approx 3.515585868207156.$$

Mais um exemplo: solução (cont.)

$$b) \Delta x = (x_f - x_0)/N \Rightarrow 0.2 = 2/N \Rightarrow N = 10$$

Assim $x_1 = 1.2, x_2 = 1.4, \dots, x_{10} = 3$ e z_{10} será a aproximação de $z(3)$.

$$\begin{aligned} n = 0 : z_1 &= z_0 + \Delta x (z_0/x_0 + 2e^{-z_0/x_0}) = 0 + 0.2 \cdot (0/1 + 2 \cdot e^{-0/1}) \\ &= 0.4 \end{aligned}$$

$$n = 1 : z_2 = 0.4 + 0.2 \cdot (0.4/1.2 + 2 \cdot e^{-0.4/1.2}) = 0.7532791908961824,$$

\vdots

$$n = 8 : z_9 = 3.160461908791895,$$

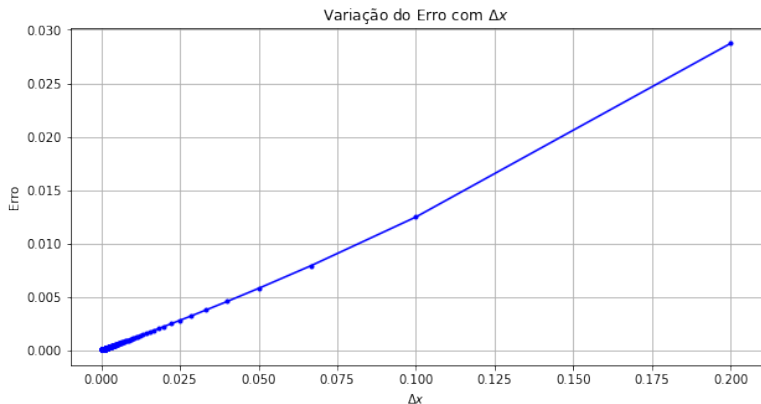
$$n = 9 : z_{10} = 3.515585868207156,$$

$$z(3) \approx 3.515585868207156.$$

Para o erro absoluto obtemos:

$$\text{Erro} = |z(3) - z_{10}| \approx 0.029.$$

Mais um exemplo: discussão



Comportamento do erro: $|z(3) - z_N|$ vs $\Delta x = 2/N$.

Definição do erro global

Definimos o erro global do método a partir das diferenças entre a solução exata $y(t_k)$ e o valor aproximado y_k ($k = 0, 1, \dots, N$):

$$E_{\text{global}} = \max_{t_0 \leq t_k \leq t_f} |y(t_k) - y_k|.$$

Este erro depende de Δt e da solução exata $y(t)$.

Análise do erro do Método de Euler: Erro global

Limitante para o erro global do método de Euler

Se a função f é suficientemente regular, temos que

$$E_{\text{global}} = \max_{t_0 \leq t_k \leq t_f} |y(t_k) - y_k| \leq A \Delta t$$

em que a constante $A > 0$ não depende de Δt .

Podemos afirmar que

$$E_{\text{global}} = \mathcal{O}(\Delta t)$$

quando $\Delta t \approx 0$.

Convergência do método

Quando $\Delta t \rightarrow 0$ (ou seja, $N \rightarrow \infty$) temos que o erro global:

$$E_{\text{global}} \rightarrow 0.$$

- No método de Euler o erro global é proporcional ao tamanho do passo Δt !
- Para melhorá-lo vamos obter um método com erro global proporcional a $(\Delta t)^2$. Assim a convergência do erro para zero será mais rápida!
- Vamos usar o **polinômio de Taylor de segundo grau**!

Melhorando o método de Euler (cont.)

Para a EDO $y' = \lambda y$, obtemos que

$$y(t_{n+1}) = y(t_n + \Delta t) \approx y(t_n) + \Delta t y'(t_n) + \frac{(\Delta t)^2}{2} y''(t_n).$$

Usando que

$$y'(t_n) = \lambda y(t_n) \quad \Rightarrow \quad y''(t_n) = \lambda y'(t_n) = \lambda^2 y(t_n),$$

obtemos

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + \lambda \Delta t y(t_n) + \frac{(\lambda \Delta t)^2}{2} y(t_n),$$

portanto chegamos no seguinte método:

$$y_{n+1} = y_n \left(1 + \lambda \Delta t + \frac{(\lambda \Delta t)^2}{2} \right).$$

Vamos resolver o exemplo inicial, agora aplicando este novo método:

$$y_{n+1} = (1 + 0.04\Delta t + (0.04\Delta t)^2/2) y_n.$$

a) Como $\Delta t = 1$ para $n = 0$ obtemos:

$$y(1) \approx y_1 = (1 + 0.04 \cdot 1 + (0.04 \cdot 1)^2/2) 1000 = 1040.8$$

$$\boxed{y(1) \approx 1040.8}$$

Para o erro absoluto dessa aproximação temos

$$\text{Erro}_a = |y(1) - y_1| \approx 0.011.$$

De volta ao exemplo inicial (cont.)

b) $\Delta t = 0.1$, $N = 10$ e y_{10} será a aproximação de $y(1)$.

$$\begin{aligned}n = 0 : y_1 &= (1 + 0.04 \cdot 0.1 + (0.04 \cdot 0.1)^2/2)y_0 \\ &= 1.004008 \cdot 1000 = 1004.008\end{aligned}$$

$$n = 1 : y_2 = 1.004008 y_1 = 1008.032064064$$

$$n = 2 : y_3 = 1.004008 y_2 = 1012.072256576768$$

$$\vdots$$

$$n = 8 : y_9 = 1.004008 y_8 = 1036.655747270047$$

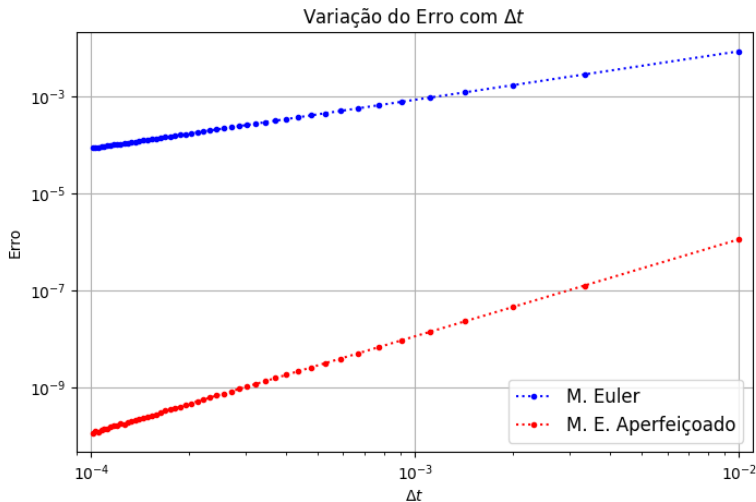
$$n = 9 : y_{10} = 1.004008 y_9 = 1040.810663505105$$

$$y(1) \approx 1040.810663505105$$

Para o erro absoluto dessa aproximação obtemos

$$\text{Erro}_b = |y(1) - y_{10}| \approx 1.1 \times 10^{-4}.$$

De volta ao exemplo inicial: discussão



Comportamento do erro: $|y(1) - y_N|$ vs $\Delta t = 1/N$.

Método da série de Taylor de segunda ordem

Usando o polinômio de Taylor de segundo grau para aproximar $y(t_{n+1})$ obtemos

$$y(t_{n+1}) = y(t_n + \Delta t) \approx y(t_n) + \Delta t y'(t_n) + \frac{(\Delta t)^2}{2} y''(t_n)$$

Da EDO $y' = f(t, y)$, aplicando a regra da cadeia obtemos que

$$y''(t) = \frac{df(t, y(t))}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t}(t, y(t)) + \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t)) y'(t)$$

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

Portanto chegamos no seguinte método:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_n, y_n) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} f \right) (t_n, y_n).$$

Método da série de Taylor

Usando o polinômio de Taylor de ordem $p \geq 1$, e calculando as derivadas da solução até a ordem p .

Método da série de Taylor de ordem p

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \bar{y}'_n + \frac{(\Delta t)^2}{2} \bar{y}''_n + \cdots + \frac{(\Delta t)^p}{p!} \bar{y}_n^{(p)},$$

em que

$$\bar{y}'_n = f(t_n, y_n),$$

$$\bar{y}''_n = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} f \right) (t_n, y_n)$$

$$\vdots$$

$$\bar{y}_n^{(p)} = \left(\frac{\partial^{p-1} f}{\partial t^{p-1}} + \cdots + \frac{\partial^{p-1} f}{\partial y^{p-1}} f^{p-1} \right) (t_n, y_n)$$

Foi introduzido por L. Euler no *Institutionum Calculi Integralis*!

Método da série de Taylor (cont.)

Da expansão de Taylor, temos o erro local

$$y(t_{n+1}) - \left(y(t_n) + y'(t_n) \Delta t + \cdots + \frac{y^{(p)}(t_n) (\Delta t)^p}{p!} \right) = \frac{y^{(p+1)}(\tau_n)}{(p+1)!} (\Delta t)^{p+1},$$

em que $t_n < \tau_n < t_{n+1}$, e o erro global $E_{\text{global}} \approx A (\Delta t)^p$ em que a constante $A > 0$ não depende de Δt .

Limitante do erro do método da série de Taylor de orden p

Se a função f é suficientemente regular então

$$E_{\text{global}} = \mathcal{O}(\Delta t)^p.$$

- Todos os métodos apresentados podem ser escritos na forma

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \Phi(t_n, y_n, \Delta t)$$

em que $\Phi()$ representa uma expressão envolvendo a função f e suas derivadas.

- Um método aproximado para resolver um PVI é dito de **passo simples**, se pode ser escrito na forma indicada acima.
- Nesses métodos a aproximação da função incógnita para o tempo t_{n+1} é obtida a partir da aproximação no tempo t_n e as aproximações para tempos anteriores não são usadas explicitamente.

Definição: ordem do método

O método possui **ordem** p se para qualquer solução $y(t)$ da EDO, o **erro local** satisfaz

$$|y(t + \Delta t) - (y(t) + \Delta t \Phi(t, y(t), \Delta t))| \leq C(\Delta t)^{p+1},$$

onde a constante C não depende de Δt .

Definição: ordem do método

O método possui **ordem** p se para qualquer solução $y(t)$ da EDO, o **erro local** satisfaz

$$|y(t + \Delta t) - (y(t) + \Delta t \Phi(t, y(t), \Delta t))| \leq C(\Delta t)^{p+1},$$

onde a constante C não depende de Δt .

Ordem de convergência

Se as funções f e Φ são suficientemente regulares e o método possui ordem p , então as aproximações satisfazem que

$$E_{global} = \max_{t_0 \leq t_k \leq t_f} |y(t_k) - y_k| \leq A(\Delta t)^p$$

em que a constante $A > 0$ não depende de Δt .

Como construir bons métodos de passo simples sem usar as derivadas de f ?

Como construir bons métodos de passo simples sem usar as derivadas de f ?

- Essa é uma **tarefa bem complicada** se não usamos as derivadas da função f .
- C. Runge e W. Kutta, no período de 1895–1901, mostraram que é possível recuperar com boa precisão o polinômio de Taylor sem usar as derivadas da função f !
- Eles dividiram o cálculo de cada passo em vários estágios, em cada um deles a função f era avaliada em pontos intermediários selecionados apropriadamente.
- Na fase final, a aproximação é obtida fazendo uma média ponderada dos valores calculados.

Métodos de Runge-Kutta (R-K)

Algúns exemplos desse tipo de método.

Método R-K de 1ª ordem:

Coincide com o **Método de Euler**

Métodos de Runge-Kutta (R-K)

Alguns exemplos desse tipo de método.

Método R-K de 1a ordem:

Coincide com o **Método de Euler**

Método R-K de 2a ordem: **Método de Euler aperfeiçoado (ou Método de Heun)**

$$\begin{cases} y_{n+1}^E = y_n + \Delta t f(t_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^E)) \end{cases}$$

pode ser re-escrito na forma

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t f(t_n, y_n) \\ k_2 = \Delta t f(t_{n+1}, y_n + k_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2} (k_1 + k_2) \end{cases}$$

Integrando $y'(t)$ no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ vamos obter que

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t) dt.$$

Usando a regra do trapézio chegamos em

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \frac{\Delta t}{2} (y'(t_n) + y'(t_{n+1})) - \frac{y'''(\tau_n)}{12} (\Delta t)^3,$$

onde $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Usando a EDO: $y'(t) = f(t, y(t))$ e truncando, temos que

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + \frac{\Delta t}{2} (f(t_n, y(t_n)) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))).$$

Substituindo $y(t_n)$ e $y(t_{n+1})$ pelas suas aproximações, chegamos em

$$y_{n+1} \approx y_n + \frac{\Delta t}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})).$$

Substituindo $y(t_n)$ e $y(t_{n+1})$ pelas suas aproximações, chegamos em

$$y_{n+1} \approx y_n + \frac{\Delta t}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})).$$

Para deixar y_{n+1} isolado no lado esquerdo, introduzimos no lado direito uma aproximação intermediária dada pelo método de Euler e obtemos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^E)),$$

onde

$$y_{n+1}^E = y_n + \Delta t f(t_n, y_n).$$

Método de Heun: ordem de convergência

Da dedução acima, considerando $y_n = y(t_n)$ obtemos que o erro local satisfaz

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) - y_{n+1} &= \frac{\Delta t}{2} (f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, y_n^E)) - \frac{y'''(\tau_n)}{12} (\Delta t)^3 \\ &= \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, \tilde{y}_n) (y(t_{n+1}) - y_n^E) - \frac{y'''(\tau_n)}{12} (\Delta t)^3 \end{aligned}$$

em que \tilde{y}_n está entre $y(t_{n+1})$ e y_n^E , e $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Método de Heun: ordem de convergência

Da dedução acima, considerando $y_n = y(t_n)$ obtemos que o erro local satisfaz

$$\begin{aligned}y(t_{n+1}) - y_{n+1} &= \frac{\Delta t}{2} (f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, y_n^E)) - \frac{y'''(\tau_n)}{12} (\Delta t)^3 \\&= \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, \tilde{y}_n) (y(t_{n+1}) - y_n^E) - \frac{y'''(\tau_n)}{12} (\Delta t)^3\end{aligned}$$

em que \tilde{y}_n está entre $y(t_{n+1})$ e y_n^E , e $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Sabemos que $y(t_{n+1}) - y_n^E = \frac{1}{2} y''(\tilde{\tau}_n) (\Delta t)^2$ onde $t_n < \tilde{\tau}_n < t_{n+1}$.

Logo

$$y(t_{n+1}) - y_{n+1} = \left(\frac{1}{4} y''(\tilde{\tau}_n) \frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, \tilde{y}_n) - \frac{y'''(\tau_n)}{12} \right) (\Delta t)^3.$$

\Rightarrow Portanto, o método de Heun é de segunda ordem!

Método de Heun: ordem de convergência

Para a EDO $y' = \lambda y$, esse método coincide com o método da série de Taylor de segunda ordem.

$$k_1 = \lambda \Delta t y_n$$

$$\begin{aligned} k_2 &= \lambda \Delta t (y_n + k_1) = \lambda \Delta t (y_n + \lambda \Delta t y_n) \\ &= \lambda \Delta t y_n + (\lambda \Delta t)^2 y_n \end{aligned}$$

\Downarrow

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2} (\lambda \Delta t y_n + \lambda \Delta t y_n + (\lambda \Delta t)^2 y_n) \\ &= y_n + \frac{1}{2} (2\lambda \Delta t y_n + (\lambda \Delta t)^2 y_n) \end{aligned}$$

$$y_{n+1} = y_n \left(1 + \lambda \Delta t + \frac{(\lambda \Delta t)^2}{2} \right)$$

Método R-K de 3a ordem: **Método de Ralston**

$$\begin{cases} \bar{y}_1 = y_n \\ \bar{y}_2 = y_n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n, \bar{y}_1) \\ \bar{y}_3 = y_n + \frac{3\Delta t}{4} f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{y}_2) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{9} \left(2f(t_n, \bar{y}_1) + 3f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \bar{y}_2) + 4f(t_n + \frac{3\Delta t}{4}, \bar{y}_3) \right) \end{cases}$$

ou na forma

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t f(t_n, y_n) \\ k_2 = \Delta t f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = \Delta t f(t_n + \frac{3}{4}\Delta t, y_n + \frac{3}{4}k_2) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{9} (2k_1 + 3k_2 + 4k_3) \end{cases}$$

Método R-K de 4a ordem: **Método “RK4 clássico”**

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{y}_1 = y_n \\ \bar{y}_2 = y_n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n, \bar{y}_1) \\ \bar{y}_3 = y_n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{y}_2) \\ \bar{y}_4 = y_n + \Delta t f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{y}_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{6} \left(f(t_n, \bar{y}_1) + 2f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \bar{y}_2) \right. \\ \quad \left. + 2f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \bar{y}_3) + f(t_n + \Delta t, \bar{y}_4) \right) \end{array} \right.$$

ou na forma

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = \Delta t f(t_n, y_n) \\ k_2 = \Delta t f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = \Delta t f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, y_n + \frac{1}{2}k_2) \\ k_4 = \Delta t f(t_n + \Delta t, y_n + k_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{array} \right.$$

Exemplo

Vamos resolver o exemplo inicial, agora aplicando o método de Ralston.

a) Como $\Delta t = 1$ e $f(t, y) = 0.04y$, para $n = 0$ obtemos:

$$k_1 = \Delta t f(t_0, y_0) = 1 \cdot 0.04 \cdot 1000 = 40$$

$$k_2 = \Delta t f(t_0 + \frac{1}{2}\Delta t, y_0 + \frac{1}{2}k_1) = 1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 40/2) = 40.8$$

$$k_3 = \Delta t f(t_0 + \frac{3}{4}\Delta t, y_0 + \frac{3}{4}k_2) = 1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 3/4 \cdot 40.8) = 41.224$$

$$y(1) \approx y_1 = y_0 + (2k_1 + 3k_2 + 4k_3)/9$$

$$= 1000 + 1 \cdot (2 \cdot 40 + 3 \cdot 40.8 + 4 \cdot 41.224)/9$$

$$= 1040.810666666667$$

$y(1) \approx 1040.810666666667$

Para o erro absolutos obtemos

$$\text{Erro} = |y(1) - y_1| \approx 1.1 \times 10^{-4}$$

Exemplo (cont.)

b) $\Delta t = 0.1$, $N = 10$ e y_{10} será a aproximação de $y(1)$.

$$n = 0 : k_1 = 0.1 \cdot 0.04 \cdot 1000 = 4$$

$$k_2 = 0.1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 4/2) = 4.008$$

$$k_3 = 0.1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 3/4 \cdot 4.008) = 4.012024$$

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + (2k_1 + 3k_2 + 4k_3)/9 \\ &= 1000 + 1 \cdot (2 \cdot 40 + 3 \cdot 40.8 + 4 \cdot 41.224)/9 \\ &= 1004.008010666667 \end{aligned}$$

$$n = 1 : k_1 = 4.016032042666667, k_2 = 4.024064106752$$

$$k_3 = 4.028104234986922, y_2 = 1008.032085482837$$

$$n = 2 : k_1 = 4.03212834193135, k_2 = 4.040192598615213$$

$$k_3 = 4.044248919727195, y_3 = 1012.072288833795$$

Exemplo: solução (cont.)

\vdots

$$n = 7 : k_1 = 4.113582737379534, k_2 = 4.121809902854293$$

$$k_3 = 4.125948167088097, y_8 = 1032.517505217292$$

$$n = 8 : k_1 = 4.130070020869167, k_2 = 4.138330160910905$$

$$k_3 = 4.1424850113519, y_9 = 1036.655846391723$$

$$n = 9 : k_1 = 4.14662338556689, k_2 = 4.154916632338024$$

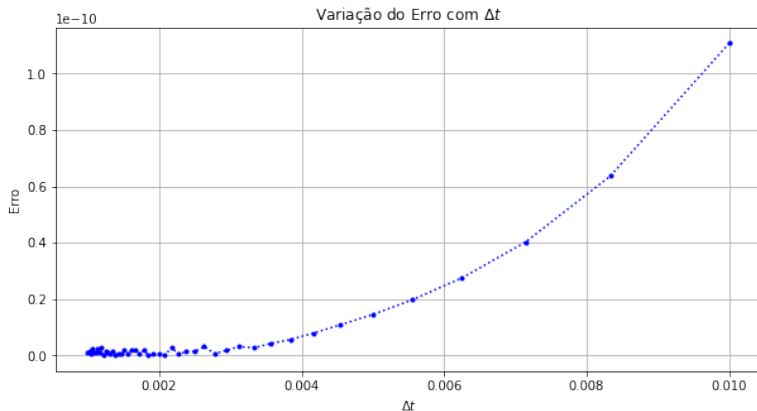
$$k_3 = 4.159088135463906, y_{10} = 1040.810774081723$$

$y(1) \approx 1040.810774081723$

Para o erro absoluto obtemos

$$\text{Erro} = |y(1) - y_{10}| \approx 1.1 \times 10^{-7}.$$

Exemplo: discussão



Comportamento do erro: $|y(1) - y_N|$ vs $\Delta t = 1/N$.

Exemplo: Comparação dos métodos de R-K

N	M. Euler	M. Heun	M. Ralston
1	1040 0.81	1040.8 0.011	1040.8106666666667 1.1×10^{-4}
10	1040.72773401891 0.083	1040.810663505105 1.1×10^{-4}	1040.810774081723 1.1×10^{-7}
100	1040.802449959209 8.3×10^{-3}	1040.810773082514 1.1×10^{-6}	1040.810774192259 1.3×10^{-10}
1000	1040.809941566347 8.3×10^{-4}	1040.810774181397 1.1×10^{-8}	1040.81077419249 1.0×10^{-10}

Tabela: Valores aproximados de $y(1)$ e o erro cometido quando variamos o número de passos N .

Um último exemplo

Um biólogo marinho estimou que no início do ano a biomassa de hadoque no Golfo do Maine era de 150 kt e a do seu predador natural o cação galhudo de 50 kt . Considerando que a variação temporal da população do hadoque (H) e do cação galhudo (C) é governada pelo seguinte sistema de Lotka-Volterra, use o método de Euler para estimar o tamanho dessas populações ao final do ano avançando 5 passos no tempo.

$$\begin{cases} \frac{dH}{dt} = H (0.5 - 0.01 C) \\ \frac{dC}{dt} = (0.001 H - 0.2) C \end{cases}$$

Um último exemplo: solução

Temos que $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $N = 5$, então $\Delta t = (t_f - t_0)/N = 1/5 = 0.2$. Estamos interessados nas aproximações finais $H(1) \approx H_5$ e $C(1) \approx C_5$ partindo de $H_0 = 150$ e $C_0 = 50$.

Um último exemplo: solução

Temos que $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $N = 5$, então $\Delta t = (t_f - t_0)/N = 1/5 = 0.2$. Estamos interessados nas aproximações finais $H(1) \approx H_5$ e $C(1) \approx C_5$ partindo de $H_0 = 150$ e $C_0 = 50$.

Para este sistema a fórmula do método fica na forma vetorial:

$$\overbrace{\begin{bmatrix} H_{n+1} \\ C_{n+1} \end{bmatrix}}^{\mathbf{y}_{n+1}} = \overbrace{\begin{bmatrix} H_n \\ C_n \end{bmatrix}}^{\mathbf{y}_n} + \Delta t \overbrace{\begin{bmatrix} H_n (0.5 - 0.01 C_n) \\ (0.001 H_n - 0.2) C_n \end{bmatrix}}^{f(t_n, \mathbf{y}_n)}.$$

Para $n = 0$ obtemos:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} H_1 \\ C_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 150 \\ 50 \end{bmatrix} + 0.2 \begin{bmatrix} 150 (0.5 - 0.01 \cdot 50) \\ (0.001 \cdot 150 - 0.2) 50 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 150 + 0.2 \cdot 150(0.5 - 0.5) \\ 50 + 0.2(0.15 - 0.2)50 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 150 \\ 49.5 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Um último exemplo: solução

Para $n = 1$:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} H_2 \\ C_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 150 \\ 49.5 \end{bmatrix} + 0.2 \begin{bmatrix} 150(0.5 - 0.01 \cdot 49.5) \\ (0.001 \cdot 150 - 0.2) 49.5 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 150 + 0.2 \cdot 150(0.5 - 0.495) \\ 49.5 + 0.2(0.15 - 0.2)49.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 150.15 \\ 49.005 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

\vdots

Para $n = 4$:

$$\begin{bmatrix} H_5 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 151.48803794 \\ 47.563855 \end{bmatrix}$$

Concluimos que no final do ano haverá aproximadamente 151.488 *kt* de biomassa hadoque e 47.564 *kt* de cação galhudo.

Um último exemplo: gráfico

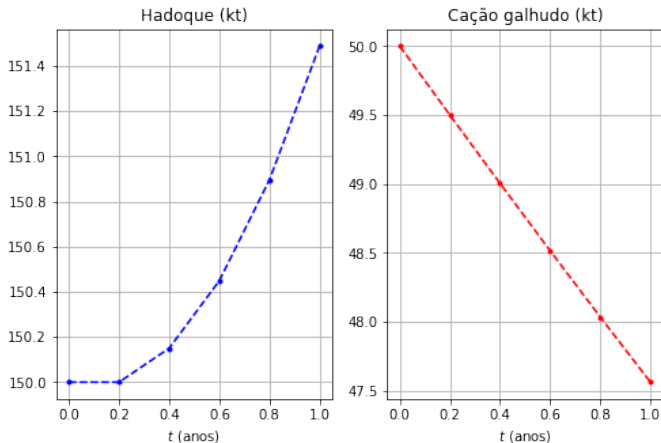


Gráfico da solução aproximada.

Um último exemplo: previsão de longo prazo

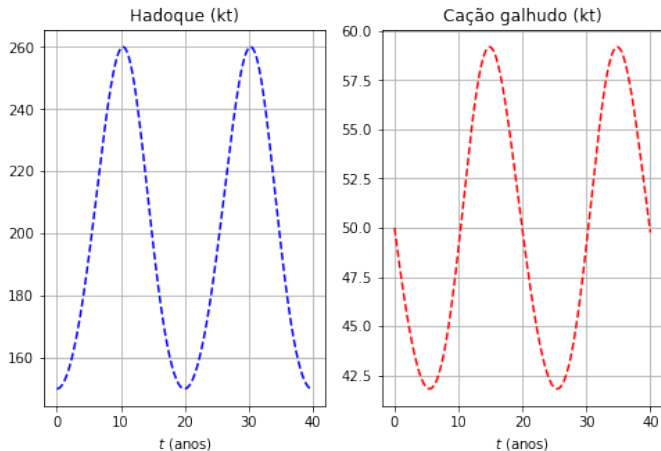


Gráfico da solução aproximada.

A classe dos métodos de passo simples é muito rica e versátil.

- Métodos com alta ordem de convergência;
- Métodos adaptativos e com passo variável;
- Métodos flexíveis que podem levar em conta as particularidades específicas da EDO.
- O desenvolvimento e análise desse tipo de método é uma área de pesquisa muito ativa!

A classe dos métodos de passo simples é muito rica e versátil.

- Métodos com alta ordem de convergência;
- Métodos adaptativos e com passo variável;
- Métodos flexíveis que podem levar em conta as particularidades específicas da EDO.
- O desenvolvimento e análise desse tipo de método é uma área de pesquisa muito ativa!

Outras classes de métodos para PVIs

- Métodos lineares de passo múltiplo
- Métodos baseados na fórmula de diferenciação regressiva (BDF)
- Métodos híbridos

- Nesses métodos para calcular a aproximação da solução usaremos as aproximações em vários tempos anteriores. Por exemplo, para obter y_{n+2} usamos diretamente y_n e y_{n+1} .
- De modo geral um método aproximado é dito de s passos ($s \geq 1$) se para calcular y_{n+s} , usamos y_n, \dots, y_{n+s-1} . No caso $s = 1$, temos um método de passo simples.
- A forma mais comum de construir esse tipo de métodos consiste em usar polinômios interpoladores associados com os pontos da nossa discretização.

Método de Adams-Bashforth (A-B) de 2 passos

A partir da EDO: $y'(t) = f(t, y(t))$, integrando no intervalo $[t_{n+1}, t_{n+2}]$ vamos obter que

$$y(t_{n+2}) = y(t_{n+1}) + \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} f(t, y(t)) dt.$$

Considerando o polinômio interpolador da função $g(t) = f(t, y(t))$ sob os pontos t_n e t_{n+1} vamos ter que

$$f(t, y(t)) \approx f_n + \frac{f_{n+1} - f_n}{\Delta t} (t - t_n)$$

onde $f_n = f(t_n, y(t_n))$ e $f_{n+1} = f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))$.

Método de Adams-Bashforth de 2 passos

Logo

$$\begin{aligned}y(t_{n+2}) &\approx y(t_{n+1}) + \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} \left(f_n + \frac{f_{n+1} - f_n}{\Delta t} (t - t_n) \right) dt \\&\approx y(t_{n+1}) + \Delta t f_n + \frac{3(\Delta t)^2}{2} \left(\frac{f_{n+1} - f_n}{\Delta t} \right) \\&\approx y(t_{n+1}) + \frac{\Delta t}{2} (3f_{n+1} - f_n) .\end{aligned}$$

Obtemos assim o

Método de Adams-Bashforth de 2 passos

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{\Delta t}{2} (3f_{n+1} - f_n), \quad n = 0, 1, \dots, N-2$$

onde $f_k = f(t_k, y_k)$ com $k = n, n+1$.

Método de Adams-Bashforth de 2 passos

- O método permite calcular as aproximações y_2, \dots, y_N a partir de y_0 e y_1 .
- **É preciso conhecer uma aproximação de $y(t_1)$ além do dado inicial $y(t_0)$.** A aproximação y_1 pode ser obtida por exemplo usando um método de passo simples.
- Esse método é de segunda ordem, já que se consideramos $y_n = y(t_n)$ e $y_{n+1} = y(t_{n+1})$ para aproximação y_{n+2} obtida temos que

$$|y(t_{n+2}) - y_{n+2}| \leq C(\Delta t)^3,$$

onde a constante $C > 0$ não depende de Δt (mas depende da solução $y(t)$).

- Como consequência, se a aproximação y_1 satisfaz que $|y(t_1) - y_1| \leq C_1(\Delta t)^2$ onde a constante C_1 não depende de Δt , então para $k = 0, 1, \dots, N$

$$|y(t_k) - y_k| \leq A(\Delta t)^2$$

em que a constante $A > 0$ não depende de Δt .

Esses métodos são obtidos seguindo o mesmo procedimento. Para o método de s passos, aproximamos a função $g(t) = f(t, y(t))$ usando um polinômio interpolador $P_{s-1}(t)$ de grau $s - 1$ sobre os pontos t_n, \dots, t_{n+s-1} .

Assim

$$P_{s-1}(t) = f_n L_0(t) + \dots + f_{n+s-1} L_{s-1}(t)$$

onde $f_k = f(t_k, y(t_k))$ com $k = n, \dots, n + s - 1$ e $L_j(t)$ ($j = 0, \dots, s - 1$) são os polinômios correspondentes à base de Lagrange.

Vamos obter então as aproximações

$$\begin{aligned}y(t_{n+s}) &= y(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} f(t, y(t)) dt \\&\approx y(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} P_{s-1}(t) dt \\&\approx y(t_{n+s-1}) + \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} (f_n L_0(t) + \cdots + f_{n+s-1} L_{s-1}(t)) dt \\&\approx y(t_{n+s-1}) + \Delta t (\beta_0 f_{n+s-1} + \cdots + \beta_{s-1} f_n)\end{aligned}$$

em que $(\Delta t)\beta_j = \int_{t_{n+s-1}}^{t_{n+s}} L_{n+s-1-j}(t) dt$, $j = 0, \dots, s-1$. Logo o método terá a forma

$$y_{n+s} = y_{n+s-1} + \Delta t (\beta_0 f_{n+s-1} + \cdots + \beta_{s-1} f_n)$$

onde $f_k = f(t_k, y_k)$ com $k = n, \dots, n+s-1$.

Adams-Bashforth de terceira ordem (3 passos)

Para $n = 0, \dots, N - 3$:

$$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{\Delta t}{12} (23f_{n+2} - 16f_{n+1} + 5f_n),$$

onde $f_k = f(t_k, y_k)$ com $k = n, n + 1, n + 2$.

Adams-Bashforth de quarta ordem (4 passos)

Para $n = 0, \dots, N - 4$:

$$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{\Delta t}{24} (55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n),$$

onde $f_k = f(t_k, y_k)$ com $k = n, n + 1, n + 2, n + 3$.

Métodos de Adams-Bashforth: observações

- Antes de podermos usar um método de A-B de s passos diretamente, é preciso calcular y_1, \dots, y_{s-1} . Para isto podemos usar um método de passo simples.
- Os cálculos da função f sempre podem ser reaproveitados no próximo passo. Isto é uma vantagem desses métodos em relação aos métodos de R-K.

Limitante para o erro e convergência

Para os métodos de A-B de s passos (com $s = 2, 3, 4$) seja $p = s$. Se as aproximações iniciais y_1, \dots, y_{s-1} satisfazem que $|y(t_j) - y_j| \leq C_1 (\Delta t)^p$ para $j = 1, \dots, s-1$ onde a constante C_1 não depende de Δt , então para $k = 0, 1, \dots, N$ temos que

$$|y(t_k) - y_k| \leq A (\Delta t)^p$$

em que a constante $A > 0$ não depende de Δt .

Exemplo

Agora pelo método de A-B de 2a ordem apenas para $\Delta t = 0.1$.

b) $y(1) \approx y_{10}$, calculamos y_1 pelo método de Euler.

$$y_1 = y_0 + \Delta t f(t_0, y_0) = 1000 + 0.1 (0.04 \cdot 1000) = 1000.4$$

$$n = 0 : y_2 = y_1 + \frac{\Delta t}{2} (3f_1 - f_0)$$

$$= y_1 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_1 - 0.04 \cdot y_0) = 1008.024$$

$$n = 1 : y_3 = y_2 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_2 - 0.04 \cdot y_1) = 1012.064144$$

$$n = 2 : y_4 = y_3 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_3 - 0.04 \cdot y_2) = 1016.120480864$$

$$n = 3 : y_5 = y_4 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_4 - 0.04 \cdot y_3) = 1020.193075461184$$

$$n = 4 : y_6 = y_5 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_5 - 0.04 \cdot y_4) = 1024.281992952223$$

$$n = 5 : y_7 = y_6 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_6 - 0.04 \cdot y_5) = 1028.387298759014$$

$$n = 6 : y_8 = y_7 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_7 - 0.04 \cdot y_6) = 1032.509058565664$$

$$n = 7 : y_9 = y_8 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_8 - 0.04 \cdot y_7) = 1036.64733831954$$

$$n = 8 : y_{10} = y_9 + \frac{0.1}{2} (3 \cdot 0.04 \cdot y_9 - 0.04 \cdot y_8) = 1040.802204232325$$

Exemplo: solução (cont.)

$$y(1) \approx 1040.802204232325$$

c) Erro absoluto da aproximação: $\text{Erro} = |y(1) - y_{10}| \approx 8.6 \times 10^{-3}$

Considerando $\Delta t = 0.01$ vamos obter a aproximação

$$y(1) \approx y_{100} = 1040.810688186014$$

com erro absoluto aproximadamente igual a 8.6×10^{-5} , e para $\Delta t = 0.001$ a aproximação será

$$y(1) \approx y_{1000} = 1040.810773332018$$

e o erro absoluto aproximadamente igual a 8.6×10^{-7} .

Exemplo

Agora pelo método de A-B de 3a ordem com $\Delta t = 0.1$.

b) $y(1) \approx y_{10}$, calculamos y_1 e y_2 pelo método de Euler aperfeiçoado.

$$y_1 = 1004.008, \quad y_2 = 1008.032064064$$

$$\begin{aligned} n = 0 : y_3 &= y_2 + \frac{\Delta t}{12} (23f_2 - 16f_1 + 5f_0) \\ &= y_2 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_2 - 16 \cdot 0.04 y_1 + 5 \cdot 0.04 y_0) \\ &= 1012.072267221824 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n = 1 : y_4 &= y_3 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_3 - 16 \cdot 0.04 y_2 + 5 \cdot 0.04 y_1) \\ &= 1016.128663595517 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n = 2 : y_5 &= y_4 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_4 - 16 \cdot 0.04 y_3 + 5 \cdot 0.04 y_2) \\ &= 1020.201318031339 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n = 3 : y_6 &= y_5 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_5 - 16 \cdot 0.04 y_4 + 5 \cdot 0.04 y_3) \\ &= 1024.290295709106 \end{aligned}$$

Exemplo: solução (cont.)

$$\begin{aligned}n = 4 : y_7 &= y_6 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_6 - 16 \cdot 0.04 y_5 + 5 \cdot 0.04 y_4) \\&= 1028.395662052702\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}n = 5 : y_8 &= y_7 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_7 - 16 \cdot 0.04 y_6 + 5 \cdot 0.04 y_5) \\&= 1032.517482748043\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}n = 6 : y_9 &= y_8 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_8 - 16 \cdot 0.04 y_7 + 5 \cdot 0.04 y_6) \\&= 1036.655823744345\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}n = 7 : y_{10} &= y_9 + \frac{0.1}{12} (23 \cdot 0.04 y_9 - 16 \cdot 0.04 y_8 + 5 \cdot 0.04 y_7) \\&= 1040.81075125515\end{aligned}$$

$y(1) \approx 1040.81075125515$

c) Erro absoluto da aproximação: $\text{Erro} = |y(1) - y_{10}| \approx 2.3 \times 10^{-5}$

Exemplo: solução (cont.)

Considerando $\Delta t = 0.01$ vamos obter a aproximação

$$y(1) \approx y_{100} = 1040.810774169212$$

com erro absoluto aproximadamente igual a 2.3×10^{-8} , e para $\Delta t = 0.001$ a aproximação será

$$y(1) \approx y_{1000} = 1040.810774192364$$

e o erro absoluto aproximadamente igual a 2.4×10^{-11} .

Exemplo: Comparação dos métodos de A-B

N	A-B 2a ordem	A-B 3a ordem	A-B 4a ordem
10	1040.802204232325 8.6×10^{-3}	1040.81075125515 2.3×10^{-5}	1040.810774156601 3.6×10^{-8}
100	1040.810688186014 8.6×10^{-5}	1040.810774169212 2.3×10^{-8}	1040.810774192384 3.7×10^{-12}
1000	1040.810773332018 8.6×10^{-7}	1040.810774192364 2.4×10^{-11}	1040.810774192387 6.8×10^{-13}

Métodos de Adams-Moulton (A-M)

Outros métodos de passo múltiplo podem ser obtidos usando uma ideia análoga, mas considerando o polinômio interpolador P_s sobre os pontos t_n, \dots, t_{n+s} . Vamos obter

Adams-Moulton de terceira ordem (2 passos)

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{\Delta t}{12} (5f_{n+2} + 8f_{n+1} - f_n), \quad n = 0, 1, \dots, N-2$$

onde $f_k = f(t_k, y_k)$ com $k = n, n+1, n+2$.

Adams-Moulton de quarta ordem (3 passos)

$$y_{n+3} = y_{n+2} + \frac{\Delta t}{24} (9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n), \\ n = 0, 1, \dots, N-3$$

onde $f_k = f(t_k, y_k)$ com $k = n, n+1, n+2, n+3$.

- Para usar esses métodos da mesma forma que com os métodos de A-B, também é preciso fornecer outras aproximações iniciais além do dado inicial.
- Em geral para calcular a aproximação de interesse é necessário resolver uma equação não linear. Por exemplo, no método A-M de 3a ordem a grandeza de interesse y_{n+2} aparece nos dois lados da equação, no lado direito ela está no termo f_{n+2} que representa $f(t_{n+2}, y_{n+2})$.
- Por causa de isto esse tipo de método é caracterizado como **método implícito**. Quando isso não acontece o método é caracterizado como **explícito**.
- Os métodos de R-K que apresentamos assim como os de A-B são caracterizados como explícitos.