Cálculo Numérico

Universidade Federal do Rio Grande do Norte
-
DIMAP

Cálculo Numérico
U7 – Equações Diferenciais Ordinárias

Antonio Carlos Gay Thomé

Cálculo Numérico

Introdução

Equações Diferenciais aparecem com grande frequência em problemas que tratam de fenômenos em diversas áreas como, por exemplo, em:

- ✓ mecânica dos fluídos;
- ✓ fluxo de calor;
- ✓ Vibrações;
- ✓ circuitos elétricos;
- ✓ reações químicas e nucleares;
- ✓ Economia;
- ✓ biologia e etc.

Cálculo Numérico

Introdução

Uma ***equação algébrica*** *é uma equação em que as incógnitas são variáveis, enquanto que numa* ***equação diferencial*** *as incógnitas são funções e a equação envolve derivadas destas funções. Numa equação diferencial em que a incógnita é uma função* ***y(t)***, ***t*** *é a variável independente e* ***y*** *é a variável dependente.*

$\boxed{3x + 5x^2 - x^3 = 6}$ ➔ Equação algébrica

$\boxed{\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\,\text{sen}\,\theta = 0.}$ ➔ Equação diferencial

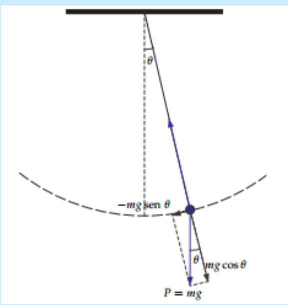
Cálculo Numérico

Introdução

Três Exemplos:

O movimento de um pendulo simples de massa **m** e comprimento $\boldsymbol{\ell}$ é descrito pela função **θ(t)** que satisfaz a equação diferencial

$$\boxed{\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\,\text{sen}\,\theta = 0.}$$



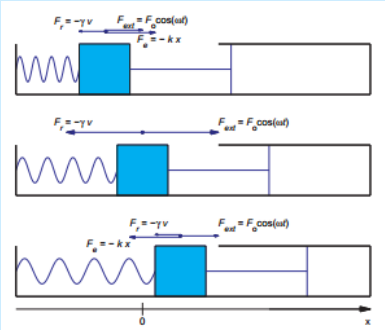
Nesta equação a incógnita é a função ***θ(t)****. Assim* ***θ*** *é a variável dependente e* ***t*** *é a variável independente.*

Cálculo Numérico

Introdução

Três Exemplos:

Um sistema massa-mola composto de um corpo de massa **m** preso a uma mola com constante elástica **k**, sujeita a uma força de resistência $F_r = -\gamma.v = -\gamma.dx/dt$ e uma força externa $F_{ext}(t) = F_0 cos(\omega t)$, o deslocamento da massa $x(t)$ satisfaz a equação diferencial:



$$m\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma\frac{dx}{dt} + kx = F_0\cos(\omega t).$$

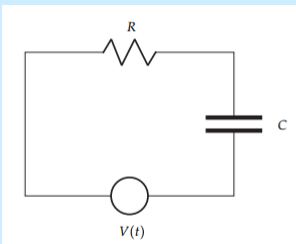
Nesta equação <u>a incógnita</u> é a função ***x(t)****. Assim* ***x*** *é a variável dependente e* ***t*** *é a variável independente.*

Cálculo Numérico

Introdução

Três Exemplos:

Um circuito RC é um circuito que tem um resistor de resistência R, um capacitor de capacitância C e um gerador que gera uma diferença de potencial $V(t)$ ligados em série. A carga $Q(t)$ no capacitor satisfaz a equação diferencial:



$$R\frac{dQ}{dt} + \frac{1}{C}Q = V(t).$$

Nesta equação <u>a incógnita</u> é a função ***Q(t)****. Assim* ***Q*** *é a variável dependente e* ***t*** *é a variável independente.*

Cálculo Numérico

Classificação

As equações diferenciais podem ser classificadas quanto ao ***tipo***, à ***ordem*** e à ***linearidade***.

a) Quanto ao tipo: pode ser ***ordinária*** ou ***parcial***.

ordinária ➔ se as funções incógnitas forem funções de somente uma variável

$$\frac{dy}{dx} = x + y; \quad y' = x^2 + y^2; \quad y'' + (1 - y^2)y' + y = 0$$

parcial ➔ caso contrário

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Cálculo Numérico

Classificação

b) Quanto à ordem: pode ser de 1ª, 2ª , ... , n^{ésima} ordem, dependendo da derivada de maior ordem presente na equação.

$$R\frac{dQ}{dt} + \frac{1}{C}Q = V(t).$$ ➔ Ordem 1

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma\frac{dx}{dt} + kx = F_0\cos(\omega t).$$ ➔ Ordem 2

$$a_0(t)y + a_1(t)\frac{dy}{dt} + a_2(t)\frac{d^2y}{dt^2} + \ldots + a_n(t)\frac{d^ny}{dt^n} = f(t).$$ ➔ Ordem n

Classificação

c) ***Quanto à linearidade***: pode ser ***linear*** ou ***não linear***.

É linear se as incógnitas e suas derivadas aparecem de forma linear na equação, isto é, as incógnitas e suas derivadas aparecem como uma soma em que cada parcela é um produto de alguma derivada das incógnitas com uma função que não depende das incógnitas.

*Por exemplo, uma equação diferencial ordinária linear de ordem **n** é uma equação que pode ser escrita como:*

$$a_0(t)y + a_1(t)\frac{dy}{dt} + a_2(t)\frac{d^2y}{dt^2} + \ldots + a_n(t)\frac{d^ny}{dt^n} = f(t).$$

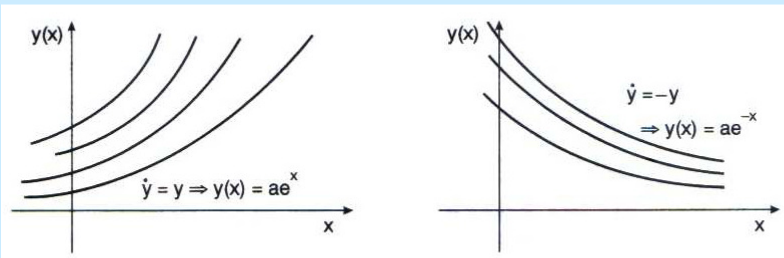
Solução de uma EDO

A solução de uma equação diferencial ordinária é qualquer função da variável independente que satisfaça a equação.

Exemplo: $\dfrac{dy}{dx} = y' = y$

Na realidade tem uma família de soluções.

Tem como solução ➔ $y(x) = ae^x,\ a \in R$



Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

Uma equação diferencial **não** possui solução única e, assim, para individualizar uma solução faz-se necessário impor condições suplementares.

Em geral, uma equação de ordem **m** requer **m** condições adicionais a fim de ter uma solução única.

Se, para uma equação de ordem **m**, a função e suas derivadas até ordem **m-1** são especificadas em <u>*um mesmo ponto*</u>, então temos um ***problema de valor inicial - PVI***.

Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

Exemplos de PVI:

$$a) \begin{cases} y'(x) = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

$$b) \begin{cases} y''' + (x+1)y'' + \cos xy' - (x^2-1)y = x^2 + y^2 \operatorname{sen}(x+y) \\ y(0) = 1.1, \quad y'(0) = 2.2, \quad y''(0) = 3.3 \end{cases}$$

Se em equações de ordem **m**, com **m ≥ 2**, as **m** condições fornecidas para busca da solução única não forem todas dadas sobre um mesmo ponto, então temos um **problema de valor de contorno – PVC**.

Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

Exemplo de PVC:

Um exemplo de PVC é o de uma barra de comprimento **L** sujeita a uma carga uniforme **q**. Se, no ponto $x_0 = 0$ a barra está presa e em $x_L = L$ ela está só apoiada, este problema é descrito por:

$$\begin{cases} y^{(iv)}(x) + ky(x) = q \\ y(0) = y'(0) = 0 \\ y(L) = y''(L) = 0 \end{cases}$$

onde k é uma constante que depende do material da barra.

Ao contrário do que ocorre no PVI, é comum que problemas de contorno não tenham unicidade de solução.

Ex.: para todo $\alpha \in R$, $y(x) = \alpha(1 + x)$ é solução PVC ➔

$$\begin{cases} y'' = 0 \\ y(-1) = 0 \\ y(1) - 2y'(1) = 0 \end{cases}$$

13 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

Nesta unidade vamos nos concentrar nos esquemas numéricos para solução de ***Problemas de Valor Inicial (P.V.I.)*** para equações diferenciais de primeira ordem.

Isto é, achar a função $y(x)$ tal que:

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

Os esquemas numéricos calculam a aproximação de $y(x)$ nos pontos $x_1, x_2, x_3, \ldots$, em que $x_k = x_0 + kh$ para um dado passo $h > 0$.

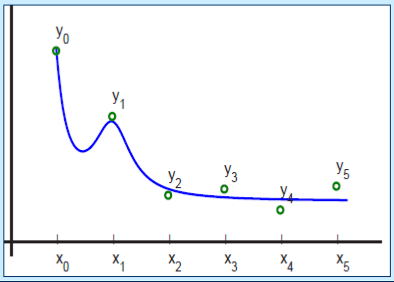
14 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

O valor da função no ponto $\boldsymbol{x_k}$ é aproximado por $\boldsymbol{y_k}$, que é obtido em função dos valores anteriores $y_{k-1}, y_{k-2}, \ldots, y_0$.

Desta forma, os esquemas numéricos determinam a aproximação da função para valores de $\boldsymbol{x > x_0}$, o que justifica o nome de *problema de valor inicial*.



Aproximação de $\boldsymbol{y(x)}$

Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

Os métodos de solução são classificados em duas classes:

Métodos de Passo Simples:

- ✓ São aqueles em que o cálculo de y_k depende apenas de y_{k-1}.

Métodos de Passo Múltiplo:

- ✓ São aqueles em que o cálculo de y_k depende ***m*-valores** anteriores, $y_{k-1}, y_{k-2}, \ldots, y_{k-m}$. Neste caso dizemos que o método é de ***m*-passos**.

Cálculo Numérico

Solução de uma EDO

Métodos de Passo Simples:

Método de Euler
Métodos da Série de Taylor
Métodos de Runge-Kutta

Métodos de Passo Múltiplo:

Métodos de Adams-Bashforth

17 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Método de Euler

Dado o problema de valor inicial: $\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$

Uma forma de aproximar a derivada de uma função no ponto x_1 é dado por:

$$y'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{y(x_0+h) - y(x_0)}{h} \approx \frac{y(x_0+h) - y(x_0)}{h}$$

Uma vez que $x_1 = x_0 + h$ e considerando o PVI,

y'(x0)

expressando y_1 em função de y_0: $\dfrac{y_1 - y_0}{h} = f(x_0, y_0) \Rightarrow y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$

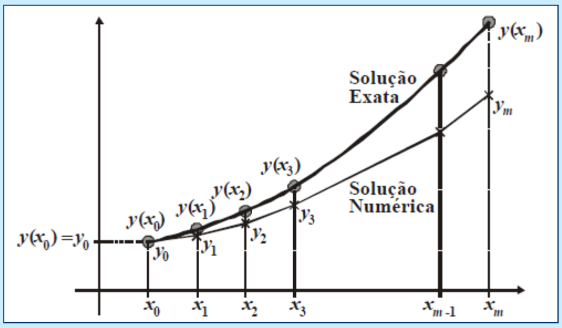
$\boxed{y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k)}$ ← e generalizando temos

18 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Método de Euler

$$\boxed{y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k)}$$ ← e generalizando temos



A solução numérica (aproximada) é dada por segmentos de reta traçados a partir de y_k e coeficiente angular dado por $y'(x_k)$.

Cálculo Numérico

Método de Euler

Exemplo: Considerando o seguinte PVI

$$\begin{cases} y' = x - 2y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad x_0 = 0 \text{ e } y_0 = 1.$$

Empregar o Método de Euler para obter uma aproximação para $\mathbf{y(0.5)}$*, usando* $\mathbf{h = 0.1}$ *(múltiplos passos).*

$$y_1 = y_0 + h(x_0 - 2y_0) = 1 + 0.1(0 - 2*1) = 0.8 \approx y(x_1) = y(0.1)$$

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + h(x_1 - 2y_1) = 0.8 + 0.1(0.1 - 2*0.8) = 0.65 \approx y(x_2) = y(0.2) \\ y_3 &= y_2 + h(x_2 - 2y_2) = 0.65 + 0.1(0.2 - 2*0.65) = 0.54 \approx y(x_3) = y(0.3) \\ y_4 &= y_3 + h(x_3 - 2y_3) = 0.54 + 0.1(0.3 - 2*0.54) = 0.462 \approx y(x_4) = y(0.4) \\ y_5 &= y_4 + h(x_4 - 2y_4) = 0.462 + 0.1(0.4 - 2*0.462) = 0.4096 \approx y(x_5) = y(0.5) \end{aligned}$$

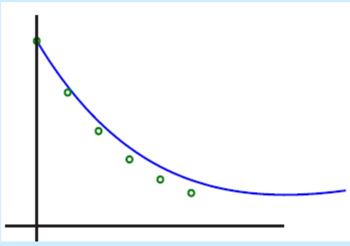
Cálculo Numérico

Método de Euler

Exemplo: Considerando o seguinte PVI

$$\begin{cases} y' = x - 2y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad x_0 = 0 \text{ e } y_0 = 1.$$

Sabendo que a solução analítica do P.V.I. é dada por ***y(x) = (5e^{-2x} + 2x − 1)/4****. Podemos montar um gráfico comparativo:*



Observe que a cada valor calculado o erro aumenta. Isto se deve porque cometemos um "erro local" na aproximação da derivada e este erro vai se acumulando a cada novo valor calculado.

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Consiste em aplicar a **Série de Taylor** na aproximação de ***y(x)*** no problema de valor inicial.

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

Aplicando a série de Taylor para $\boldsymbol{y(x)}$ no ponto $\boldsymbol{x_k}$, temos:

$$y(x) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}(x - x_k) + \frac{y''(x_k)}{2!}(x - x_k)^2 + \cdots + \frac{y^{(n)}(x_k)}{n!}(x - x_k)^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_k)^{n+1}$$

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Calculando no ponto x_{k+1} e considerando que $x_{k+1} - x_k = h$ temos que:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}h + \frac{y''(x_k)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{y^{(n)}(x_k)}{n!}h^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}$$

As demais derivadas podem ser calculadas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} y''(x) &= \frac{d}{d(x)}y' = \frac{d}{d(x)}f(x, y(x)) \\ &= f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)).y'(x) \\ &= f_x + f_y.f \end{aligned}$$

23 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}h + \frac{y''(x_k)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{y^{(n)}(x_k)}{n!}h^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}$$

$$\begin{aligned} y'''(x) &= \frac{d}{d(x)}y'' = \frac{d}{d(x)}\left(f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)).f(x, y(x))\right) \\ &= \frac{d}{d(x)}\left(f_x + f_y.f\right) \\ &= (f_{xx} + f_{xy}.f) + \left(f_{xy}.f + f_{yy}.f^2 + f_y.f'\right) \\ &= f_{xx} + 2f_{xy}.f + f_{yy}.f^2 + f_y.(f_x + f_y.f) \end{aligned}$$

Desta forma podemos obter uma aproximação para o cálculo do P.V.I., substituindo as respectivas derivadas na série de Taylor.

24 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Os métodos podem ser classificados de acordo com o termo de maior ordem usado na série de Taylor.

*Assim, um método para a solução de P.V.I. é de **ordem n** se este coincide com a série de Taylor até o **n-ésimo termo**.*

O erro local cometido por esta aproximação será da forma:

$$\boxed{E_{loc}(x_{k+1}) = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1} \quad \xi \in [x_k, x_{k+1}]}$$

25 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

O ***Método de Euler*** é um método de 1ª ordem, pois este coincide com a série de Taylor até o primeiro termo, logo o erro local é dado por:

$$\boxed{E_{loc}(x_{k+1}) = \frac{y''(\xi)}{2!}h^{2} \quad \xi \in [x_k, x_{k+1}]}$$

Em geral, podemos determinar a ordem de um método pela fórmula do erro. Se o erro depende da ***n-ésima*** potência de ***h*** o método é de ***ordem n−1***.

Quanto ***menor*** for o valor de ***h menor*** *será o erro local.*

26 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Exemplo:

Utilizar o método de 2ª ordem para aproximar $\mathbf{y(0.5)}$*, sendo* $x_0 = 0$ *e usando* $h = 0.1$*, para o P.V.I.*

$$\begin{cases} y' = x - 2y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Neste caso temos que: $\boxed{f(x, y) = x - 2y}$

E, assim: $\boxed{y'' = f_x + f_y f = 1 - 2(x - 2y)}$

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Exemplo:

Substituindo na série de Taylor, temos:

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}h + \frac{y''(x_k)}{2!}h^2 \\ &= y(x_k) + h(x_k - 2y(x_k)) + \frac{h^2}{2}(1 - 2x_k + 4y(x_k)) \end{aligned}$$

Agora, sendo $x_0 = 0$, $y_0 = 1$ e $h = 0.1$, temos:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h(x_0 - 2y_0) + \frac{h^2}{2}(1 - 2x_0 + 4y_0) \\ &= 1 + 0.1(0 - 2*1) + \frac{0.1^2}{2}(1 - 2*0 + 4*1) = 0.825 \end{aligned}$$

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Exemplo: (continuando)

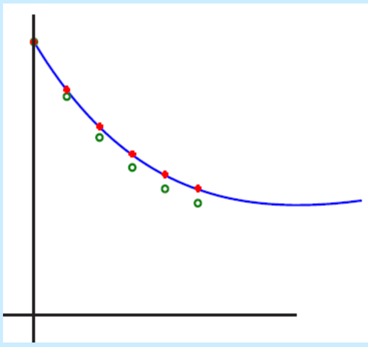
$$\begin{aligned}
y_2 &= y_1 + h(x_1 - 2y_1) + \frac{h^2}{2}(1 - 2x_1 + 4y_1) \\
&= 0.825 + 0.1(0.1 - 2*0.825) + \frac{0.1^2}{2}(1 - 2*0.1 + 4*0.825) = 0.6905 \\
y_3 &= y_2 + h(x_2 - 2y_2) + \frac{h^2}{2}(1 - 2x_2 + 4y_2) \\
&= 0.6905 + 0.1(0.2 - 2*0.6905) + \frac{0.1^2}{2}(1 - 2*0.2 + 4*0.6905) = 0.58921 \\
y_4 &= y_3 + h(x_3 - 2y_3) + \frac{h^2}{2}(1 - 2x_3 + 4y_3) \\
&= 0.58921 + 0.1(0.3 - 2*0.58921) + \frac{0.1^2}{2}(1 - 2*0.3 + 4*0.58921) = 0.515152 \\
y_5 &= y_4 + h(x_4 - 2y_4) + \frac{h^2}{2}(1 - 2x_4 + 4y_4) \\
&= 0.515152 + 0.1(0.4 - 2*0.515152) + \frac{0.1^2}{2}(1 - 2*0.4 + 4*0.515152) = \boxed{0.463425}
\end{aligned}$$

29 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Métodos da Série de Taylor

Exemplo: (continuando)



Comparando os resultados obtidos por este método (pontos em vermelho), com os obtidos pelo método de Euler (bolinhas verde), observa-se que estes são mais precisos.

Ou seja, quanto maior a ordem do método melhor será a aproximação.

A dificuldade está no cálculo da relação de $y^{(n+1)}(x) = [f(x, y)]^{(n)}$.

30 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Métodos de Runge-Kutta

A estratégia dos métodos de Runge-Kutta é aproveitar as qualidades dos métodos da Série de Taylor (escolher a precisão - ordem) sem ter que calcular as derivadas totais de $f(x, y)$.

Range-Kutta de 1ª Ordem

O método de Runge-Kutta de 1ª ordem é o Método de Euler, que coincide com o método da Série de Taylor de 1ª ordem.

$$\boxed{y_{k+1} = y_k + h f(x_k, y_k)}$$

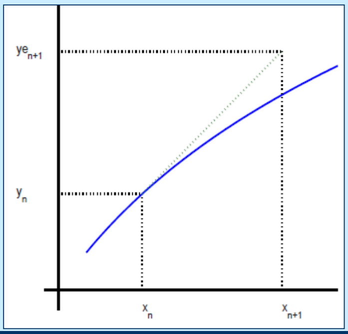
Lembrando que: $\boxed{y'_k = f(x_k, y_k)}$

Métodos de Runge-Kutta

Range-Kutta de 2ª Ordem

O objetivo é determinar um método de 2ª ordem que fosse um método de Euler Melhorado (método de Heun).

A ideia é modificar o método de Euler de tal forma que seja possível obter uma precisão melhor.



Pelo método de Euler, a aproximação em x_{n+1} seria dada por:

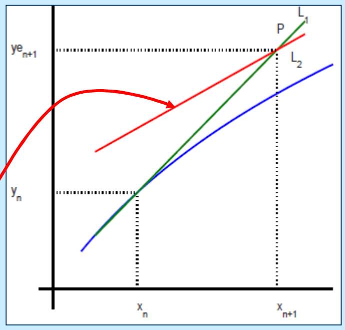
$$\boxed{ye_{n+1} = y_n + h.f(x_n, y_n)}$$

Métodos de Runge-Kutta

A reta L_1, tangente a curva no ponto x_n, tem coeficiente angular dado pela derivada no ponto x_n ($y'(x_n) = f(x_n, y_n)$).

$$L_1(x) = y_n + (x - x_n)y_n'$$

$$L_1(x_{n+1}) = y_n + (x_{n+1} - x_n)y_n' = y_n + h.f(x_n, y_n) = y_{en+1}$$

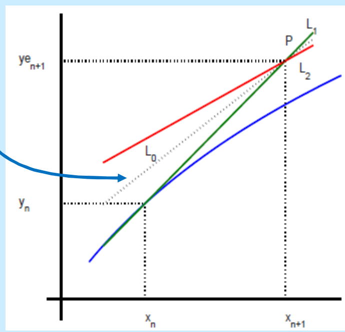


Traça-se, a reta L_2 com coeficiente angular dado por $f(x_{n+1}, ye_{n+1}) = f(x_n, y_n + hy_n')$ que passa pelo ponto P.

$$L_2(x) = ye_{n+1} + (x - x_{n+1})f(x_{n+1}, ye_{n+1})$$

Métodos de Runge-Kutta

A seguir monta-se a reta L_0 que passa por P e tem como coeficiente angular ***a média*** dos coeficientes angular de L_1 e L_2.

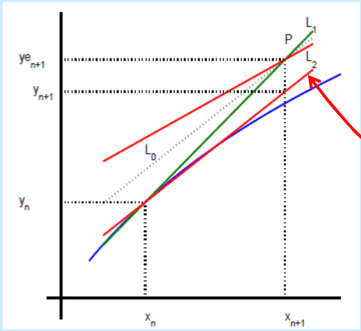


$$L_0(x) = ye_{n+1} + (x - x_{n+1}).1/2(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, ye_{n+1}))$$

Cálculo Numérico

Métodos de Runge-Kutta

Finalmente, traça-se a reta *L(x)* que passa pelo ponto (x_n, y_n) e que é paralela a reta L_0.



L(x)

$$L(x) = y_n + (x - x_n).1/2(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hy_n'))$$

Cálculo Numérico

Métodos de Runge-Kutta

Agora, usando a reta *L(x)*, o ponto y_{n+1} é dado por:

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + h/2(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + hy_n'))}$$

A estimativa do erro local é dado por:

$$\boxed{|E_{loc}(x_n)| \leq \frac{h^3}{6} \max_{\xi \in [x_n, x_{n+1}]} |y'''(\xi)|}$$

Range-Kutta de ordens superiores são derivados a partir da série de Taylor

Métodos de Runge-Kutta

Range-Kutta de 3ª Ordem

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{2}{9}K_1 + \frac{1}{3}K_2 + \frac{4}{9}K_3 \\ K_1 &= hf(x_n, y_n) \\ K_2 &= hf(x_n + h/2, y_n + K_1/2) \\ K_3 &= hf(x_n + 3h/4, y_n + 3K_2/4) \end{aligned}$$

Range-Kutta de 4ª Ordem

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 &= hf(x_n, y_n) \\ K_2 &= hf(x_n + h/2, y_n + K_1/2) \\ K_3 &= hf(x_n + h/2, y_n + K_2/2) \\ K_4 &= hf(x_n + h, y_n + K_3) \end{aligned}$$

Métodos de Adams-Bashforth

São métodos de passos múltiplos baseados na ***integração numérica***.

A estratégia é integrar a equação diferencial no intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.

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

e tomar:

$$\boxed{y(x_{n+1}) = y(x_n) + \underbrace{\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx}_{\text{integração numérica}}}$$

****A integral sobre a função f(x, y) é aproximada pela integral de um polinômio interpolador que pode utilizar pontos que não pertençam ao intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.***

Métodos de Adams-Bashforth

Dependendo da escolha dos pontos para aproximar a função $f(x, y)$ os esquemas podem ser classificados como:

1. Explícito:

Quando utilizamos os pontos $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_{n-m}$ para interpolar a função $f(x, y)$; *(x_{n+1} não está presente)*

2. Implícito:

Quando no conjunto de pontos, sobre os quais interpolamos a função $f(x, y)$, temos o ponto x_{n+1}.

Métodos de Adams-Bashforth

Métodos Explícitos

Considerando o caso em que a função $f(x, y)$ é interpolada sobre os pontos (x_n, f_n) e (x_{n-1}, f_{n-1}), onde $f_n = f(x_n, y_n)$.

Neste caso, o polinômio interpolador na forma de Newton é dado por:

$$\boxed{f(x, y) \approx p(x) = f_{n-1} + (x - x_{n-1}).f[x_{n-1}, x_n]}$$

Tendo p(x), o passo seguinte é integra-lo sobre o intervalo $[x_n, x_{n+1}]$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Métodos Explícitos

$$
\begin{aligned}
\int_{x_n}^{x_{n+1}} p(x)dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f_{n-1} + f[x_{n-1}, x_n](x - x_{n-1})dx \\
&= f_{n-1}(x_{n+1} - x_n) + f[x_{n-1}, x_n]\left(\frac{x_{n+1}{}^2}{2} - x_{n-1}x_{n+1} - \frac{x_n{}^2}{2} + x_{n-1}x_n\right) \\
&= hf_{n-1} + \frac{f_n - f_{n-1}}{h}\,\frac{1}{2}\left(x_{n+1}{}^2 - 2(x_n - h)x_{n+1} - x_n{}^2 + 2(x_n - h)x_n\right) \\
&= hf_{n-1} + \frac{f_n - f_{n-1}}{h}\,\frac{1}{2}\left(x_{n+1}{}^2 - 2x_nx_{n+1} + x_n{}^2 + 2h(x_{n+1} - x_n)\right) \\
&= hf_{n-1} + \frac{f_n - f_{n-1}}{h}\,\frac{1}{2}\left((x_{n+1} - x_n)^2 + 2h^2\right) \\
&= \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})
\end{aligned}
$$

$$\boxed{\int_{x_n}^{x_{n+1}} p(x)dx = \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Métodos Explícitos

Substituindo a aproximação da integral na fórmula proposta pelo método

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

obtemos o seguinte:

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})}$$

1. *Este método é de passo dois, pois y_{n+1} depende de y_n e y_{n-1}; que devem ser obtidos a priori;*
2. *O valor de y_0 é dado no P.V.I.;*
3. *O valor de y_1 deve ser obtido por qualquer método de passo simples.*

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

O erro local, cometido por esta aproximação por um polinômio de grau 1, é dado por:

$$\begin{aligned}\int_{x_n}^{x_{n+1}} E_1(x)dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} (x-x_{n-1})(x-x_n)\frac{f''(\xi,y(\xi))}{2!}dx \\ &= h^3\frac{5}{12}y'''(\xi) \quad \xi\in[x_n,x_{n+1}]\end{aligned}$$

Com isto temos a seguinte estimativa para o erro local

$$\boxed{|E_{loc}(x_{n+1})| \leq h^3\frac{5}{12}\max_{\xi\in[x_n,x_{n+1}]}|y'''(\xi)|}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Exemplo:

Achar uma aproximação para $y(1.1)$ *pelo Método de Adams-Bashforth explícito, de passo dois para o P.V.I. abaixo, usando* $h = 0.2$.

$$\boxed{\begin{cases} y' = -2xy \\ y(0.5) = 1\end{cases}} \quad \Rightarrow x_0 = 0.5 \text{ e } y_0 = 1$$

Uma vez que o Método de Adams-Bashforth é de passo dois, antes de inicia-lo é preciso obter $\mathbf{y_1}$ *por um método de passo simples qualquer.*

Métodos de Adams-Bashforth

O erro local do Método de Adams-Bashforth depende de h^3, assim temos que este método é de 2ª ordem.

Este fato implica que $\mathbf{y_1}$ deve ser obtido por um método de passo simples que também seja de 2ª ordem.

Etapa 1 – Obtendo os valores iniciais (y_1 no caso)

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \frac{h}{2}(f(x_0, y_0) + f(x_1, y_0 + hy_0')) \\ &= 1 + \frac{0.2}{2}(-2*0.5*1 + (-2)*0.7*(1 + 0.2*(-2*0.5*1))) = 0.788 \approx y(0.7) \end{aligned}$$

Como visto, o Método de Euler Melhorado é de 2ª ordem

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Etapa 2 – Calculando y(1.1)

Tendo y_0 e y_1 podemos iniciar o Método de Adams-Bashforth

y_2 = y(0.9)

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + \frac{h}{2}(3f_1 - 2f_0) \\ &= 0.788 + \frac{0.2}{2}(3*(-2)*(0.7)*0.788 - 2*(-2)*0.5*1) = 0.65704 \approx y(0.9) \end{aligned}$$

y_3 = y(1.1)

$$\begin{aligned} y_3 &= y_2 + \frac{h}{2}(3f_2 - 2f_1) \\ &= 0.65704 + \frac{0.2}{2}(3*(-2)*(0.9)*0.65704 - 2*(-2)*0.7*0.788) = 0.52287 \approx y(1.1) \end{aligned}$$

Etapa 3 – Estimando o Erro Local

Métodos de Adams-Bashforth

Etapa 3 – Estimando o Erro Local

$y' = f(x, y) = f = -2xy$

$$|E_{loc}(x_{n+1})| \leq h^3 \frac{5}{12} \max_{\xi \in [x_n, x_{n+1}]} |y'''(\xi)|$$

Temos que:

$$y'''(x) = f_{xx} + 2f_{xy}.f + f_{yy}.f^2 + f_y.(f_x + f_y.f)$$

$$f_x = -2y \ / \ f_y = -2x \ / \ f_{xx} = 0 \ / \ f_{xy} = -2 \ / \ f_{yy} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$y'''(x) = 0 + 2(-2)(-2xy) + 0 - 2x.(-2y + (-2x).(-2xy))$$

$$y'''(x) = 8xy + 4xy - 8x^3y = 4xy(3 - 2x^2)$$

$$\boxed{y'''(x) = 4xy(3 - 2x^2)}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

$$\boxed{y'''(x) = 4xy(3 - 2x^2)}$$

$$y'''(x_n = 0.9) = 3.36 \text{ e } y'''(x_{n+1} = 1.1) = 1.33$$

$$y^{iv} = y(16x^4 - 48x^2 + 12) = 0$$

$x = \pm 1.95$ e $x = \pm 0.44$ / todos fora do intervalo

Logo, o erro local é estimado em :

$$\boxed{|E_{loc}(1.1)| \leq 0.2^3 \frac{5}{12}(3.36) = 0.0112}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Caso tivéssemos aproximado a função $f(x, y)$ por um polinômio de grau 3, sobre os pontos (x_n, f_n), (x_{n-1}, f_{n-1}), (x_{n-2}, f_{n-2}), (x_{n-3}, f_{n-3}) obteríamos o método de passo 4 e ordem 4.

Neste caso seriam necessários quatro valores iniciais, y_0, y_1, y_2 e y_3, que devem ser calculados por um método de passo simples de ordem maior ou igual a quatro (Ex. Runge-Kutta de 4ª ordem).

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left[55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}\right]}$$ ← ***valor de y_{n+1}***

estimativa do erro local →
$$\boxed{\left|E_{loc}(1.1)\right| \leq h^5 \frac{251}{720} \max_{x \in [x_n, x_{n+1}]} \left|y^{v}(x)\right| = 0.0017}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Métodos Implícitos

Nestes casos o ponto (x_{n+1}, f_{n+1}) é um dos ponto, onde a função $f(x, y)$ será interpolada.

Sendo a função $f(x, y)$ interpolada sobre os pontos (x_n, f_n) e (x_{n+1}, f_{n+1}) e considerando o polinômio interpolador na forma de Newton temos:

$$\boxed{f(x, y) \approx p(x) = f_n + (x - x_n).f[x_n, x_{n+1}]}$$

*O passo seguinte é integrar **$p(x)$** sobre o intervalo **$[x_n, x_{n+1}]$***

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Métodos Implícitos

Integrando ***p(x)*** sobre o intervalo ***[x_n, x_{n+1}]*** temos:

$$\begin{aligned}
\int_{x_n}^{x_{n+1}} p(x)dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f_n + f[x_n, x_{n+1}](x - x_n)dx \\
&= f_n(x_{n+1} - x_n) + f[x_n, x_{n+1}]\left(\frac{x_{n+1}^2}{2} - x_n x_{n+1} - \frac{x_n^2}{2} + x_n x_n\right) \\
&= hf_n + \frac{f_{n+1} - f_n}{h}\frac{1}{2}\left(x_{n+1}^2 - 2x_n x_{n+1} + x_n^2\right) \\
&= hf_n + \frac{f_{n+1} - f_n}{h}\frac{1}{2}(x_{n+1} - x_n)^2 \\
&= \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})
\end{aligned}$$

$$\boxed{\int_{x_n}^{x_{n+1}} p(x)dx = \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Métodos Implícitos

Substituindo a aproximação da integral na fórmula proposta pelo método

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

obtemos o seguinte:

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})}$$

A dificuldade dos métodos implícitos é que $\boldsymbol{y_{n+1}}$ *aparece em ambos os lados da equação, pois* $\boldsymbol{f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})}$.

Solução: uso de um Esquema Preditor-Corretor.

Métodos de Adams-Bashforth

Esquema Preditor - Corretor

Preditor: por um método explícito qualquer encontramos uma primeira aproximação para y_{n+1}.

Corretor: o valor inicialmente aproximado de y_{n+1} é corrigido por intermédio do método implícito.

Métodos de Adams-Bashforth

Exemplo:

Calcular ***y(0.2)***, considerando h = 0.1 e o P.V.I. dado por:

$$\begin{cases} y' = -2xy - y^2 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

*Usando um esquema **Preditor** – **Corretor** do tipo:*

$$\begin{aligned} P &: \quad y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad \leftarrow \text{explícito} \\ C &: \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1}) \quad \leftarrow \text{implícito} \end{aligned}$$

Cálculo Numérico

Métodos de Adams-Bashforth

Exemplo:

Sendo $x_0 = 0$; $y_0 = 1$ e $h = 0.1$

$$P \ : \ y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = 1 + 0.1(-2*0*1-1^2) = 0.9$$
$$C \ : \ y_1 = y_0 + \frac{h}{2}(f_0 + f_1) = 1 + \frac{0.1}{2}(-2*0*1-1^2-2*0.1*0.9-0.9^2) = 0.9005 \approx y(0.1)$$

$$P \ : \ y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = 0.9005 + 0.1(-2*0.1*0.9005-(0.9005)^2) = 0.8013$$
$$C \ : \ y_2 = y_1 + \frac{h}{2}(f_1 + f_2) = 0.9005 + \frac{0.1}{2}(-2*0.1*0.9005-(0.9005)^2-2*0.2*0.8013-0.8013^2)$$
$$= 0.8018 \approx y(0.2)$$

$\boxed{y(0.2) \approx 0.8018}$

55 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Equações de Ordem Superior

É comum encontrar equações diferenciais de ordem "**m**" escritas na forma:

$$u^m = f(x, u, u', u'', \ldots, u^{m-1})$$

Exemplo:

$$u''' = f(x, y, y', y'') = x^2 + y^2 sen(x + y) - (x+1)y'' - cos(xy') + (x^2 - 1)y$$

A estratégia é transformar a equação de ***ordem m*** em um sistema de ***m equações de primeira ordem***.

56 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Equações de Ordem Superior

Como exemplo vamos considerar o P.V.I. de terceira ordem dado por:

$$\begin{cases} y''' = x^2 + y^2 - y' - 2y''x \\ y(0) = 1 \\ y'(0) = 2 \\ y''(0) = 3 \end{cases}$$

Para transforma-lo num sistema de primeira ordem devemos usar variáveis auxiliares como:

w = y' ➔ ***w' = y''***

e ***z = w'*** ➔ ***z' = w'' = y'''***

57 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Equações de Ordem Superior

Com as variáveis auxiliares a equação original pode ser representada por:

w = y' ➔ ***w' = y'' / z = w'*** ➔ ***z' = w'' = y'''***

$$\begin{cases} y''' = x^2 + y^2 - y' - 2y''x \\ y(0) = 1 \\ y'(0) = 2 \\ y''(0) = 3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y' = w \\ w' = z \\ z' = x^2 + y^2 - w - 2zx \\ y(0) = 1 \\ w(0) = 2 \\ z(0) = 3 \end{cases}$$

O sistema acima pode ser escrito na forma matricial:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} y' \\ w' \\ z' \end{pmatrix}}_{Y'} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ y & -1 & -2x \end{pmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{pmatrix} y \\ w \\ z \end{pmatrix}}_{Y} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x^2 \end{pmatrix}}_{X}$$

58 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Equações de Ordem Superior

Desta forma temos a seguinte equação vetorial

$$\begin{cases} Y' = AY + X \\ Y(0) = Y_0 \end{cases}$$

onde $Y(0) = (1, 2, 3)^T$.

Aplicando o método de Euler na equação acima obtemos

$$\boxed{Y_{n+1} = Y_n + h(A_n Y_n + X_n)}$$

59 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Equações de Ordem Superior

Assumindo $h = 0.1$, o cálculo de uma aproximação para $y(0.2)$ envolve o cálculo de $Y_1 \approx Y(0.1)$ e $Y_2 \approx Y(0.2)$.

$$\begin{pmatrix} y_{n+1} \\ w_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n \\ w_n \\ z_n \end{pmatrix} + h\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ y_n & -1 & -2x_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_n \\ w_n \\ z_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ {x_n}^2 \end{pmatrix}\right]$$

Cálculo de Y_1

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ w_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ w_0 \\ z_0 \end{pmatrix} + h\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ y_0 & -1 & -2x_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_0 \\ w_0 \\ z_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ {x_0}^2 \end{pmatrix}\right] \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ w_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} + 0.1\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -2*0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0^2 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 1.2 \\ 2.3 \\ 2.9 \end{pmatrix}$$

60 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Métodos da Série de Taylor

Cálculo de Y_2

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ w_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ w_1 \\ z_1 \end{pmatrix} + h\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ y_1 & -1 & -2x_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ w_1 \\ z_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ {x_1}^2 \end{pmatrix}\right] \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ w_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.2 \\ 2.3 \\ 2.9 \end{pmatrix} + 0.1\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1.2 & -1 & -2*0.1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.2 \\ 2.3 \\ 2.9 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.1^2 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 1.430 \\ 2.590 \\ 2.757 \end{pmatrix}$$

Note que não estamos achando apenas o valor aproximado de *y*(0.2), mas também de *y'*(0.2) e *y''*(0.2), sendo:

$$\boxed{\begin{pmatrix} y(0.2) \\ y'(0.2) \\ y''(0.2) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1.430 \\ 2.590 \\ 2.757 \end{pmatrix}}$$