

# Tópico 9 - Resolução Numérica de Equações Diferenciais

João B. Florindo

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica  
Universidade Estadual de Campinas - Brasil  
jbflorindo@ime.unicamp.br

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

# Introdução

- Equações diferenciais (ED) envolvem derivadas de funções
- Focaremos em *Equações diferenciais ordinárias* (EDO): uma variável independente. Ex.:

$$y'' + y' = e^x \quad \cos(x)y'' - y' = 0 \quad y'''' + y'' + y' = 0$$

- Equações com múltiplas variáveis são chamadas de parciais (EDP). Ex.:

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

- Focaremos em EDOs

# Introdução

- Possuem inúmeras aplicações na ciência e áreas técnicas em problemas envolvendo variação de alguma variável
- Ex.: Circuito elétrico contendo indutores e capacitores
- Duas abordagens comuns na prática: simplificação do problema ou aproximação numérica
- Exemplo de simplificação: pêndulo de comprimento  $L$

$$\frac{d^2\theta}{d\theta^2} + \frac{g}{L} \sin \theta = 0,$$

com  $g \approx 10m/s^2$ . Para  $\theta$  pequeno,  $\sin \theta \approx \theta$  e temos

$$\frac{d^2\theta}{d\theta^2} + \frac{g}{L}\theta = 0, \quad \theta(t_0) = \theta_0, \quad \theta'(t_0) = \theta'_0.$$

a qual possui solução exata. Para valores maiores de  $\theta$  isso já não é possível e precisaremos das técnicas de aproximação numérica que estudaremos.

# Introdução

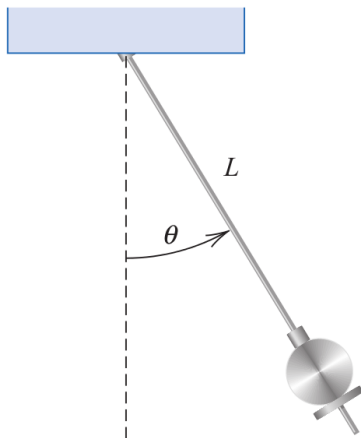


Figura: Fonte: Burden&Faires

# Introdução

- A *ordem* de uma ED é a mais alta ordem de derivação que aparece na equação. No primeiro exemplo, a 1ª e 2ª equações são de segunda ordem, a 3ª é de terceira ordem.
- Uma EDO é linear se a função e suas derivadas aparecem multiplicadas por constantes. A 1ª e 3ª do exemplo são lineares, a 2ª não.
- EDs não possuem solução única, mas uma *família de soluções*. Ex.:

$$y' = y \Rightarrow y = ae^x, \forall a \in \mathbb{R}$$

- Restrições impostas para obter solução única. Ex.:  $y(0) = 1$ ,  $y'(1) = y(0)$ ,  $\int_0^1 y dx = k$ , etc.
- Em geral, ordem  $n \Rightarrow n$  restrições
- Dois tipos de restrição mais comuns: *problema de valor inicial* (PVI) e *problema de valor de contorno* (PVC)

# Introdução

## Problema de valor inicial

Função e derivadas até ordem  $n - 1$  especificadas em um único ponto. Ex.:

$$\begin{cases} y''' + \cos(x)y'' = y \\ y''(0) = 1, \quad y'(0) = 0, \quad y(0) = 10.5 \end{cases}$$

## Problema de valor de contorno

EDO com  $n \geq 2$  e  $n$  condições em pontos distintos Ex.: Barra presa em  $x = 0$  e apoiada em  $x = L$  sujeita a carga  $q$

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

# Introdução

Em geral, PVI possui solução única, PVC, não! Ex.:

$$\begin{cases} y'' = 0 \\ y(-1) = 0 \\ y(1) = 2y'(1) \end{cases} \Rightarrow y(x) = \alpha(1 + x), \forall \alpha \in \mathbb{R}$$



# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial**
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

# Problema de Valor Inicial

- Solução analítica de PVI pode ser difícil
- Teoria pode garantir existência e unicidade mas não obtém a solução de fato

## PVI de 1ª ordem

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

Vamos primeiramente estabelecer condições analíticas para unicidade da solução do PVI e para a robustez a erros de aproximação e arredondamento

# Problema de Valor Inicial

## Definição

Uma função  $f(x, y)$  satisfaz a **condição de Lipschitz** na variável  $y$  no domínio  $D \subset \mathbb{R}^2$  se

$$\exists L > 0 : |f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|, \forall (x, y_1) \text{ e } (x, y_2) \in D$$

$L$  é chamada **constante de Lipschitz** de  $f$ .

Exemplo:  $f(x, y) = x|y|$  satisfaz a condição de Lipschitz em  $D = \{(x, y) | 1 \leq x \leq 2, -3 \leq y \leq 4\}$  com  $L = 2$  pois

$$\begin{aligned} |f(x, y_1) - f(x, y_2)| &= |x|y_1| - x|y_2|| = |x(|y_1| - |y_2|)| = |x|(|y_1| - |y_2|)| \leq \\ &\leq 2|y_1 - y_2| \text{ (desigualdade triangular reversa: } |a - b| \geq ||a| - |b||) \end{aligned}$$

# Problema de Valor Inicial

## Definição

Um conjunto  $D \in \mathbb{R}^2$  é **convexo** se dado qualquer  $(x, y_1)$  e  $(x, y_2)$  em  $D$ , então  $((1 - \lambda)t_1 + \lambda t_2, (1 - \lambda)y_1 + \lambda y_2)$  também pertencem a  $D$ ,  $\forall \lambda \in [0, 1]$ .

Geometricamente, toda reta ligando quaisquer dois pontos de  $D$  estará inteiramente contida em  $D$ .

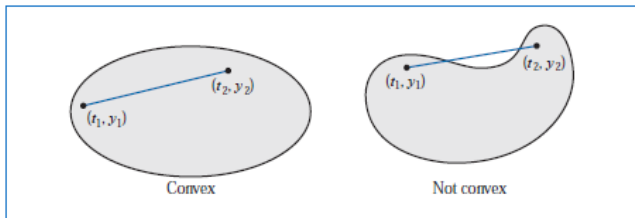


Figura: Fonte: Burden&Faires

# Problema de Valor Inicial

## Teorema 1

Se  $f(x, y)$  é definida em um conjunto convexo  $D \in \mathbb{R}^2$  e

$$\exists L > 0 : \left| \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) \right| \leq L, \forall (x, y) \in D,$$

então  $f$  satisfaz a condição de Lipschitz na variável  $y$  em  $D$  com constante de Lipschitz  $L$ .

Geralmente esta condição é mais fácil de aplicar do que a definição.

Porém, a condição do Teorema é apenas suficiente. Note por exemplo que a função do exemplo inicial satisfaz a condição de Lipschitz mas  $\partial f / \partial y$  não existe em  $y = 0$ .

# Problema de Valor Inicial

## Teorema 2

Seja  $D = \{(x, y) | a \leq x \leq b, -\infty < y < +\infty\}$  e  $f(x, y)$  contínua em  $D$ . Se  $f$  satisfizer a condição de Lipschitz em  $D$  na variável  $y$ , então o PVI

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

tem solução única  $y(x)$  para  $a \leq x \leq b$ .

EXEMPLO: Mostrar que o PVI seguinte tem solução única:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y) = 1 + x \sin(xy), & 0 \leq x \leq 2 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Aplicando o Teorema do Valor Médio a  $f(x, y)$  para  $y_1 < y_2$ :

$$\frac{f(x, y_2) - f(x, y_1)}{y_2 - y_1} = \frac{\partial}{\partial y} f(x, \xi) = x^2 \cos(\xi x)$$

# Problema de Valor Inicial

Portanto:

$$|f(x, y_2) - f(x, y_1)| = |y_2 - y_1| |x^2 \cos(\xi x)| \leq 4|y_2 - y_1|$$

e  $f$  satisfaz a condição de Lipschitz na variável  $y$  com  $L = 4$ . Como  $f$  é contínua em  $D$  o teorema nos garante a unicidade da solução.

# Problema de Valor Inicial

Trataremos agora da sensibilidade a erros de aproximação e arredondamento

## Definição

Um PVI

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

é bem posto se

- 1 O PVI tem uma solução única  $y(x)$  e
- 2 Existem constantes  $\epsilon_0 > 0$  e  $k > 0$ , tais que  $\forall \epsilon, \epsilon_0 > \epsilon > 0$ ,  $\delta(x)$  contínuo com  $|\delta(x)| < \epsilon, \forall x \in [a, b]$  e  $|\delta_0| < \epsilon$ , então o PVI

$$\begin{cases} z'(x) = f(x, z) + \delta(x), & a \leq x \leq b \\ z(a) = \alpha + \delta_0 \end{cases}$$

tem solução  $z(x)$  única satisfazendo

$$|z(x) - y(x)| < k\epsilon, \forall x \in [a, b]$$



## Problema de Valor Inicial

Este segundo PVI é chamado de **perturbado** e simula uma situação de erro.

### Teorema 3

Seja  $D = \{(x, y) | a \leq x \leq b, -\infty < y < +\infty\}$ ,  $f$  contínua e satisfazendo a condição de Lipschitz na variável  $y$  em  $D$ , então o PVI

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

é bem posto.

EXEMPLO: Mostrar que o PVI seguinte é bem posto

$$\begin{cases} y'(x) = y - x^2 + 1, & 0 \leq x \leq 2 \\ y(0) = 0.5 \end{cases}$$

# Problema de Valor Inicial

Como

$$\left| \frac{\partial(y - x^2 + 1)}{\partial y} \right| = |1| = 1,$$

$f(x, y)$  satisfaz a condição de Lipschitz em  $D$  com  $L = 1$  pelo Teorema 1 e como  $f$  é contínua em  $D$  o Teorema 3 garante que o PVI é bem posto.

# Problema de Valor Inicial

## TÉCNICA GERAL DE SOLUÇÃO

Construir pontos  $x_1, x_2, \dots, x_N$  igualmente espaçados ( $(x_{i+1} - x_i) = h$ ) e aproximar  $y_i = y(x_i)$  nestes pontos

**Passo simples** Calcula  $y_j$  usando apenas  $y_{j-1}$

**Passo múltiplo** Usa mais valores: as aproximações iniciais necessárias devem ser obtidas através de outras estratégias (passo simples, p.ex.)

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler**
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

## Método de Euler

Da definição do PVI temos  $x_0$ ,  $y_0 = y(x_0)$  e  $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$

Com isso podemos escrever a equação da reta que passa por  $(x_0, y_0)$  com inclinação  $y'(x_0)$ :

$$r_0(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0)$$

Usamos então esta reta para aproximar  $y_1 = y(x_1)$ :

$$y_1 = y(x_0) + (x_1 - x_0)y'(x_0) = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

Podemos similarmente construir a reta  $r_1(x)$  passando por  $(x_1, y_1)$  com inclinação  $y'(x_1)$  e aproximar  $y_2 = y_1 + h(x_1, y_1)$ . Em geral, temos uma **equação a diferenças**:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k)$$

# Método de Euler

Euler também pode ser derivado por Taylor, dado que a solução  $y(x)$  do PVI é única e com derivadas contínuas até 2ª ordem podemos desenvolver em torno de  $x = x_i$  e escrever

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + (x_{i+1} - x_i)y'(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2}y''(\xi_i), \xi_i \in (x_i, x_{i+1})$$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_i)$$

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

# Método de Euler

Interpretação gráfica

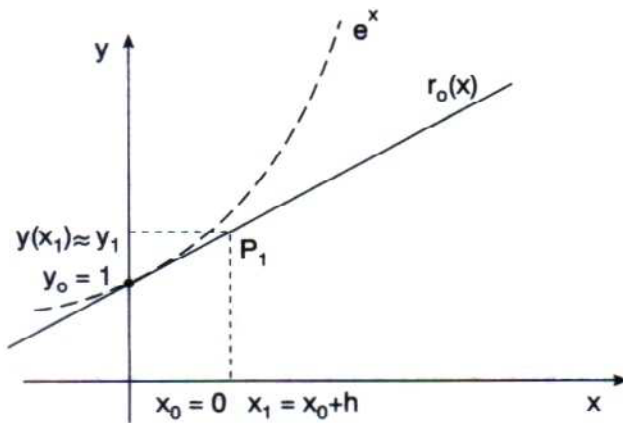


Figura: Fonte: Ruggiero&Lopes

# Método de Euler

EXEMPLO:

$$\begin{cases} y'(x) = y - x^2 + 1, & 0 \leq x \leq 2 \\ y(0) = 0.5 \end{cases}$$

Vamos usar  $h = 0.5$ :

$$y_{k+1} = y_k + h(y_k - x_k^2 + 1)$$

$$y(0) = y_0 = 0.5$$

$$y(0.5) \approx y_1 = y_0 + h(y_0 - x_0^2 + 1) = 0.5 + 0.5(0.5 - 0^2 + 1) = 1.25$$

$$y(1.0) \approx y_2 = 1.25 + 0.5(1.25 - (0.5)^2 + 1) = 2.25$$

$$y(1.5) \approx y_3 = 2.25 + 0.5(2.25 - 1^2 + 1) = 3.375$$

$$y(2.0) \approx y_4 = 3.375 + 0.5(3.375 - (1.5)^2 + 1) = 4.4375$$



# Método de Euler

## LIMITANTE DE ERRO

### Lema 1

Para qualquer  $x \geq -1$  e  $m > 0$ , temos  $0 \leq (1+x)^m \leq e^{mx}$ .

### Lema 2

$\forall s, t > 0$ , se  $\{a_i\}_{i=0}^k$  é uma sequência tal que  $a_0 \geq -t/s$  e

$$a_{i+1} \leq (1+s)a_i + t, i = 0, 1, 2, \dots, k-1$$

então

$$a_{i+1} \leq e^{(i+1)s} \left( a_0 + \frac{t}{s} \right) - \frac{t}{s}$$

# Método de Euler

## Teorema 4

Supondo  $f$  contínua e satisfazendo a condição de Lipschitz com constante  $L$  em

$$D = \{(x, y) | a \leq x \leq b, -\infty < y < +\infty\}$$

Então o PVI

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

deve ter solução única  $x$ . Se existe uma constante  $M$  tal que

$$|y''(x)| \leq M, \forall x \in [a, b]$$

então as aproximações  $y_0, y_1, \dots, y_n$  no método de Euler satisfazem

$$|y(x_i) - y_i| \leq \frac{hM}{2L} [e^{L(x_i-a)} - 1], i = 0, 1, 2, \dots, n$$

# Método de Euler

DEMONSTRAÇÃO:

Para  $i = 0$  o teorema vale pois  $x_0 = a$  e  $y(x_0) = y_0 = \alpha$

Como vimos do desenvolvimento de Taylor:

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

e a iteração de Euler nos dá

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

Subtraindo a 1ª da 2ª:

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

## Método de Euler

e assim pela subaditividade modular

$$|y(x_{i+1}) - y_{i+1}| \leq |y(x_i) - y_i| + h|f(x_i, y(x_i)) - f(x_i, y_i)| + \frac{h^2}{2}|y''(\xi_i)|$$

Como  $f$  satisfaz a condição de Lipschitz em  $y$  com constante  $L$  temos por definição:

$$|y(x_{i+1}) - y_{i+1}| \leq |y(x_i) - y_i| + hL|y(x_i) - y_i| + \frac{h^2}{2}|y''(\xi_i)|$$

e como  $|y''(x)| \leq M$

$$|y(x_{i+1}) - y_{i+1}| \leq (1 + hL)|y(x_i) - y_i| + \frac{h^2 M}{2}$$

Aplicando o Lema 2 com  $s = hL$ ,  $t = h^2 M/2$  e  $a_j = |y(x_j) - y_j|, j = 0, 1, 2, \dots, N$ :

$$|y(x_{i+1}) - y_{i+1}| \leq e^{(i+1)hL} \left( |y(x_0) - y_0| + \frac{h^2 M}{2hL} \right) - \frac{h^2 M}{2hL}$$

# Método de Euler

Como  $|y(x_0) - y_0| = 0$  e  $(i + 1)h = x_{i+1} - x_0 = x_{i+1} - a$ :

$$|y(x_{i+1}) - y_{i+1}| \leq \frac{hM}{2L} [e^{(x_{i+1}-a)L} - 1], i = 0, 1, 2, \dots, N - 1$$

## Método de Euler

O teorema exige que se conheça um limitante para a segunda derivada da solução exata, o que comumente não é possível, fazendo com que apenas estimativas do erro máximo possam ser obtidas.

Porém, dado que  $\partial f/\partial x$  e  $\partial f/\partial y$  existem podemos obter  $y''(x)$  sem calcular explicitamente  $y(x)$ , pela regra da cadeia:

$$y''(x) = \frac{dy'}{dx}(x) = \frac{df}{dx}(x, y(x)) = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y(x)) + \frac{\partial f}{\partial y}(x, y(x)) \cdot f(x, y(x))$$

### EXEMPLO DE APLICAÇÃO DO TEOREMA

Encontre um limitante de erro do PVI

$$y' = y - x^2 + 1, \quad 0 \leq x \leq 2, \quad y(0) = 0.5$$

por Euler com  $h = 0.2$ .

# Método de Euler

SOLUÇÃO:

Neste caso sabemos a solução exata:  $y(x) = (x + 1)^2 - 0.5e^x$  e assim  $y''(x) = 2 - 0.5e^x$  e

$$|y''(x)| \leq 0.5e^2 - 2, \forall x \in [a, b]$$

Aplicando o teorema:

$$|y(x_i) - y_i| \leq 0.1(0.5e^2 - 2)(e^{x_i} - 1)$$

Ou seja:

$$|y(0.2) - y_1| \leq 0.1(0.5e^2 - 2)(e^{0.2} - 1) = 0.03752$$

$$|y(0.4) - y_1| \leq 0.1(0.5e^2 - 2)(e^{0.4} - 1) = 0.08334$$

⋮

# Método de Euler

Esta estimativa costuma ser bem pessimista. Geralmente o erro real é bem menor.

Note a dependência linear de  $h$ : menor passo  $\Rightarrow$  maior precisão.

Nosso teorema não considerou erros de arredondamento:  $h$  pequeno  $\Rightarrow$  mais iterações  $\Rightarrow$  mais erro de arredondamento. Para tratar deste erro usamos uma iteração diferente:

$$u_0 = \alpha + \delta_0,$$

$$u_{i+1} = u_i + hf(x_i, y_i) + \delta_{i+1}, i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

em que  $\delta_i$  é o erro de arredondamento associado a  $u_i$ . Um teorema semelhante existe neste caso:



# Método de Euler

## Teorema 5

Seja  $y(x)$  é solução única do PVI

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

e  $u_0, u_1, \dots, u_n$  as aproximações com arredondamento. Se  $|\delta_i| < \delta, \forall i = 0, 1, 2, \dots, n$  e o Teorema 4 é válido para o PVI, então

$$|y(x_i) - u_i| \leq \frac{1}{L} \left( \frac{hM}{2} + \frac{\delta}{h} \right) [e^{L(x_i-a)} - 1] + |\delta_0| e^{L(x_i-a)}, i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Vamos destacar a parte dependente de  $h$  e chamá-la  $E(h)$ :

$$E(h) = \frac{1}{L} \left( \frac{hM}{2} + \frac{\delta}{h} \right)$$

# Método de Euler

Note que a dependência não é mais linear,  $\lim_{h \rightarrow 0} E(h) = \infty$  e  $E'(h) = (M/2) - (\delta/h^2)$ , fazendo com que o mínimo de  $E(h)$  ocorra para

$$h = \sqrt{\frac{2\delta}{M}}$$

O uso de  $h$  abaixo deste valor tende a aumentar o erro total. Como normalmente  $\delta$  é muito pequeno, essa questão não costuma ser crítica.

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor**
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

# Métodos de Taylor

- Em tese, resolveria qualquer ED
- Na prática o cálculo de derivadas totais costuma ser custoso

Sendo  $y(x)$  suficientemente “suave”, sua série de Taylor em torno de  $x = x_k$  é

$$y(x) = y(x_k) + y'(x_k)(x - x_k) + y''(x_k)\frac{(x-x_k)^2}{2!} + \dots + y^{(n)}(x_k)\frac{(x-x_k)^n}{n!} + y^{(n+1)}(\eta)\frac{(x-x_k)^{n+1}}{(n+1)!}, \eta \text{ entre } x_k \text{ e } x$$

Se o valor de  $y$  é de alguma forma conhecido em  $x_0, x_1, x_2, \dots$  podemos escrever

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + y'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + y''(x_k)\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{2!} + \dots + y^{(n)}(x_k)\frac{(x_{k+1}-x_k)^n}{n!}$$

ou ainda, lembrando que  $x_{k+1} - x_k = h$ :

$$y(x_{k+1}) \approx y_k + y'_k h + y''_k \frac{h^2}{2!} + \dots + y_k^{(n)} \frac{h^n}{n!}$$

# Métodos de Taylor

O erro nesta aproximação é

$$e_k = \frac{y^{(n+1)}(\eta_k)}{(n+1)!} h^{n+1}$$

Se  $y$  tem derivada de ordem  $(n+1)$  no intervalo fechado  $I$  em que a discretização ocorre, então existe  $M_{n+1} = \max_{x \in I} |y^{(n+1)}(x)|$  e assim o erro tem um limite superior:

$$|e_k| \leq \max_{x \in I} |e(x)| \leq \frac{M_{n+1} h^{n+1}}{(n+1)!} = Ch^{n+1}$$

Métodos em que

$$|e(x_{k+1})| < Ch^{p+1},$$

$C$  constante são de *ordem*  $p$ . O método de Taylor tem ordem  $n$ .

## Métodos de Taylor

Temos que  $y'(x) = f(x, y(x))$ . As demais derivadas são as derivadas totais:

$$y''(x) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x))y'(x) = f_x + f_y f$$

e o método de Taylor de 2ª ordem fica

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2}[f_x(x_k, y_k) + f_y(x_k, y_k)f(x_k, y_k)], k = 0, 1, 2, \dots$$

A terceira derivada já possui uma expressão muito complicada, tornando a aplicação do método pouco viável:

$$\begin{aligned} y'''(x) &= f_{xx}(x, y(x)) + f_{xy}(x, y(x))y'(x) + \\ &+ [f_{yx}(x, y(x)) + f_{yy}(x, y(x))y'(x)]y'(x) + f_y(x, y(x))y''(x) = \\ &= f_{xx} + f_{xy}f + (f_{yx} + f_{yy}f)f + f_y(f_x + f_y f) \end{aligned}$$

Note que o método de Taylor de ordem 1 é o método de Euler:

$$y_{k+1} = y_k + hy'_k, \quad e(x_{k+1}) = \frac{y''(\eta_{k+1})}{2} h^2$$

# Métodos de Taylor

EXEMPLO: Usar Taylor de 2ª ordem com  $h = 0.1$  no PVI

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

Re-escrevendo:

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

Calculemos  $y''(2)$ :

$$y''(x) = f_x + f_y f = y/x^2 - \frac{1}{x}(1 - y/x) = \frac{2y(x)}{x^2} - \frac{1}{x}$$

Como  $y(2) = 2$ :

$$y''(2) = \frac{2 \cdot 2}{2^2} - \frac{1}{2} = 1/2$$

# Métodos de Taylor

Substituindo na expressão de Taylor de 2ª ordem em torno de  $x = x_0 = 2$ :

$$\begin{aligned}y(x) &= y(2) + (x - 2)y'(2) + \frac{(x - 2)^2}{2}y''(x) + \frac{(x - 2)^3}{6}y'''(\xi) = \\ &= 2 + \frac{1}{4}(x - 2)^2 + \frac{1}{6}(x - 2)^3y'''(\xi)\end{aligned}$$

Assim:

$$y(2.1) = 2 + 0.25(0.1)^2 + \dots \approx 2.00238$$

Para estimar o erro devemos ainda obter  $y'''$  e verificar se esta possui algum limitante.



# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta**
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

# Runge-Kutta

- Mantém qualidades do método de Taylor, mas sem calcular derivadas
- Após rearranjo dos termos coincide com expansão de Taylor de mesma ordem

Método de Euler é um Runge-Kutta de primeira ordem.

Um exemplo de Runge-Kutta de segunda ordem é o método de Heun (Euler aperfeiçoado). Veja a seguinte figura.

## Runge-Kutta

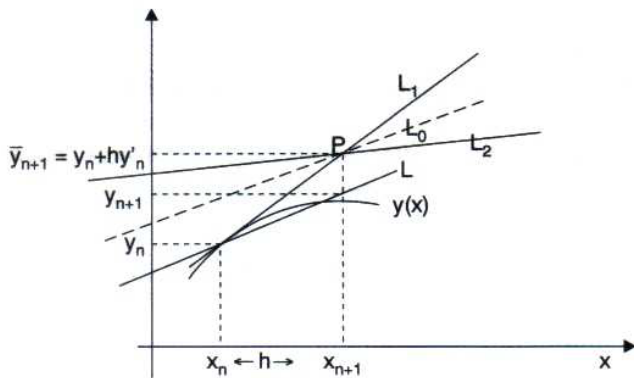


Figura: Fonte: Ruggiero&Lopes

# Runge-Kutta

Por  $(x_k, y_k)$  traçamos a reta  $L_1$  com inclinação  $y'_k = f(x_k, y_k)$  como fizemos em Euler:

$$L_1(x) = y_k + (x - x_k)y'_k$$

Dado o passo  $h$  obtemos  $y_{k+1}$  como em Euler. Para não confundir com o método atual vamos chamar  $y_{k+1}$  em Euler de  $\bar{y}_{k+1}$ :

$$\bar{y}_{k+1} = L_1(x_{k+1}) = y_k + hy'_k$$

Assim obtemos o ponto  $P$  com coordenadas  $(x_k + h, y_k + hy'_k)$ . Por  $P$  agora traçamos a reta  $L_2$  com inclinação

$y'(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1}) = f(x_k + h, y_k + hy'_k)$ :

$$L_2(x) = (y_k + hy'_k) + [x - (x_k + h)]f(x_k + h, y_k + hy'_k)$$

Agora traçamos por  $(x_k, y_k)$  uma reta  $L$  cuja inclinação é a média entre a de  $L_1$  e de  $L_2$ :

$$L(x) = y_k + (x - x_k)[f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hy'_k)]/2$$

# Runge-Kutta

A reta  $L$  é usada para obter os passos no método de Heun:

$$\begin{aligned}
 y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hy'_k)] = \\
 &= y_k + \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hf(x_k, y_k))], \quad k = 0, 1, 2, \dots
 \end{aligned}$$

A expressão acima é de passo um e não contém nenhuma derivada. Resta mostrar que concorda com o método de Taylor até termos de ordem dois, a qual é:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2}f_x(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2}f(x_k, y_k)f_x(x_k, y_k)$$

Vamos desenvolver  $f(x, y)$  por Taylor em torno de  $(x_k, y_k)$ :

$$\begin{aligned}
 f(x, y) &= f(x_k, y_k) + f_x(x_k, y_k)(x - x_k) + f_y(x_k, y_k)(y - y_k) + \\
 &+ \frac{1}{2}[f_{xx}(\alpha, \beta)(x - x_k)^2 + 2f_{xy}(\alpha, \beta)(x - x_k)(y - y_k) + f_{yy}(\alpha, \beta)(y - y_k)^2]
 \end{aligned}$$

com  $\alpha$  entre  $x$  e  $x_k$  e  $\beta$  entre  $y$  e  $y_k$ .

# Runge-Kutta

A expressão  $f(x_k + h, y_k + hy'_k)$  no método simplificado pode ser escrita então como

$$f(x_k + h, y_k + hy'_k) = f(x_k, y_k) + f_x(x_k, y_k)h + f_y(x_k, y_k)hy'_k + \frac{h^2}{2} [f_{xx}(\alpha, \beta) + 2f_{xy}(\alpha, \beta)y'_k + f_{yy}(\alpha, \beta)(y'_k)^2]$$

Substituindo na expressão final do método:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{2} \{ f(x_k, y_k) + f(x_k, y_k) + hf_x(x_k, y_k) + hf(x_k, y_k)f_y(x_k, y_k) + \\ &+ \frac{h^2}{2} [f_{xx}(\alpha, \beta) + 2f(x_k, y_k)f_{xy}(\alpha, \beta) + f^2(x_k, y_k)f_{yy}(\alpha, \beta)] \} = \\ &= y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2} [f_x(x_k, y_k) + f(x_k, y_k)f_y(x_k, y_k)] + \\ &+ \frac{h^3}{4} f_{xx}(\alpha, \beta) + 2f(x_k, y_k)f_{x,y}(\alpha, \beta) + f^2(x_k, y_k)(\alpha, \beta) \end{aligned}$$

a qual de fato concorda com a fórmula de Taylor até 2ª ordem!

# Runge-Kutta

Além de Euler aperfeiçoado existem outros Runge-Kutta de segunda ordem. A forma geral é

$$y_{k+1} = y_k + ha_1 f(x_k, y_k) + ha_2 f(x_k + b_1 h, y_k + b_2 h y'_k)$$

Euler aperfeiçoado é um caso particular em que  $a_1 = 1/2$ ,  $a_2 = a/2$ ,  $b_1 = 1$ ,  $b_2 = 1$ . Os valores válidos para estes parâmetros são obtidos igualando-se à série de Taylor como já fizemos. Desenvolvendo novamente em torno de  $(x_k, y_k)$  até termos de 1ª ordem:

$$f(x_k + b_1 h, y_k + b_2 h y'_k) = f(x_k, y_k) + b_1 h f_x(x_k, y_k) + b_2 h f(x_k, y_k) f_y(x_k, y_k)$$

Substituindo na expressão geral de Runge-Kutta:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + a_1 h f(x_k, y_k) + a_2 h [f(x_k, y_k) + b_1 h f_x(x_k, y_k) + b_2 h f(x_k, y_k) f_y(x_k, y_k)] \\ &= y_k + (a_1 + a_2) h f(x_k, y_k) + (a_2 b_1) h^2 f_x(x_k, y_k) + (a_2 b_2) h^2 f(x_k, y_k) f_y(x_k, y_k) \end{aligned}$$

# Runge-Kutta

De modo que a igualdade com a série de Taylor ocorre se

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = 1 \\ a_2 b_1 = 1/2 \\ a_2 b_2 = 1/2, \end{cases}$$

ou seja, 3 equações, 4 variáveis: infinitas soluções. Em geral, se  $a_2 = w \neq 0$ :

$$a_1 = 1 - w \quad b_1 = b_2 = 1/(2w)$$

levando à seguinte expressão geral:

$$y_{k+1} = y_k + h\left[(1 - w)f(x_k, y_k) + wf\left(x_k + \frac{h}{2w}, y_k + \frac{h}{2w}f(x_k, y_k)\right)\right], k = 0, 1$$



# Runge-Kutta

Outro exemplo de Runge-Kutta de 2ª ordem é o método do ponto médio.

$$a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = 1/2, b_2 = 1/2, w = 1$$

$$y_{k+1} = y_k + hf\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)\right), k = 0, 1, 2, \dots$$

## Runge-Kutta

## EXEMPLO DE APLICAÇÃO

$$y' = y - x^2 + 1, \quad 0 \leq x \leq 2, \quad y(0) = 0.5$$

As equações a diferença serão:

Heun:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)) = 1.22y_k - 0.0088k^2 - 0.008k + 0.216$$

$$\text{Ponto médio: } y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hf(x_k, y_k))] = 1.22y_k - 0.0088k^2 - 0.008k + 0.218$$

$$\text{Heun: } y_1 = 1.22(0.5) - 0.0088(0)^2 - 0.008(0) + 0.216 = 0.826$$

$$\text{Ponto médio: } y_1 = 1.22(0.5) - 0.0088(0)^2 - 0.008(0) + 0.218 = 0.828$$

$$\text{Heun: } y_2 = 1.22(0.826) - 0.0088(0.2)^2 - 0.008(0.2) + 0.216 = 1.20692$$

Ponto médio:

$$y_2 = 1.22(0.828) - 0.0088(0.2)^2 - 0.008(0.2) + 0.218 = 1.21136$$

# Runge-Kutta

Runge-Kutta para ordens maiores podem ser construídos de modo análogo. A seguir as formas gerais para 3ª ordem:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{2}{9}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{4}{9}k_3 \text{ dado que}$$

$$k_1 = hf(x_k, y_k)$$

$$k_2 = hf\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = hf\left(x_k + \frac{3}{4}h, y_k + \frac{3}{4}k_2\right)$$

# Runge-Kutta

e 4ª ordem

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \text{ dado que}$$

$$k_1 = hf(x_k, y_k)$$

$$k_2 = hf(x_k + h/2, y_k + k_1/2)$$

$$k_3 = hf(x_k + h/2, y_k + k_2/2)$$

$$k_4 = hf(x_k + h, y_k + k_3)$$

Um problema de Runge-Kutta é não haver uma estimativa simples para o erro. Isso dificulta a escolha do tamanho ideal do passo  $h$ . Existem variantes que simplificam o cálculo deste erro.

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo**
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

## Passo múltiplo

Métodos vistos até agora usam apenas  $y(x_k)$  para aproximar  $y(x_k + h)$

Exigem porém o cálculo de derivadas ou de  $f(x, y)$  em vários pontos

Métodos de passo múltiplo usam valor de  $y(x)$  em mais de um ponto

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

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx$$

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

e  $\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx$  é obtida por integração numérica.

## Passo múltiplo

- Métodos explícitos: Dependem de  $x_k, x_{k-1}, \dots, x_{k-m}$ . Ex.: Método de Adams-Bashforth 4ª ordem:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24} [55f(x_k, y_k) - 59f(x_{k-1}, y_{k-1}) + 37f(x_{k-2}, y_{k-2}) - 9f(x_{k-3}, y_{k-3})], \quad y_0 = \alpha, y_1 = \alpha_1, y_2 = \alpha_2, y_3 = \alpha_3$$

- Métodos implícitos (fechados): Dependem de  $x_{k+1}, x_k, \dots, x_{k-m}$ . Ex.: Método de Adams-Moulton 4ª ordem:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24} [9f(x_{k+1}, y_{k+1}) + 19f(x_k, y_k) - 5f(x_{k-1}, y_{k-1}) + f(x_{k-2}, y_{k-2})], \quad y_0 = \alpha, y_1 = \alpha_1, y_2 = \alpha_2$$

As aproximações iniciais  $\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  podem ser obtidas por métodos como Taylor ou Runge-Kutta de 4ª ordem (deve ter a mesma precisão do passo múltiplo)

# Passo múltiplo

## MÉTODOS DE PREVISÃO-CORREÇÃO

Em geral, métodos implícitos são mais precisos, mas exigem o cálculo de  $y_{k+1}$ , o que muitas vezes exige processos complexos (aproximação por Newton ou secante, por exemplo)

Na prática, métodos implícitos costumam ser combinados com explícitos

A ideia é calcular uma primeira aproximação de  $y_{k+1}$  usando um método explícito e em seguida refinar esta aproximação usando o método implícito, e ir repetindo este procedimento até a precisão desejada



## Passo múltiplo

Como exemplo, podemos obter uma previsão  $y_{4p}$  por Adams-Bashforth:

$$y_{4p} = y_3 + \frac{h}{24} [55f(x_3, y_3) - 59f(x_2, y_2) + 37f(x_1, y_1) - 9f(x_0, y_0)]$$

e uma aproximação mais precisa para  $y_4$  por Adams-Moulton:

$$y_4 = y_3 + \frac{h}{24} [9f(x_4, y_4) + 19f(x_3, y_3) - 5f(x_2, y_2) + f(x_1, y_1)]$$

Em seguida, usamos novamente Adams-Bashforth para estimar  $y_{5p}$  e Adams-Moulton para obter  $y_5$  e assim sucessivamente.

### TEOREMA

Se  $f(x, y)$  e  $\partial f / \partial y$  são contínuas em  $x$  e  $y$  no intervalo  $[a, b]$ , o método de previsão-correção convergirá se  $h$  for escolhido tal que para todo  $y$  com

$$|y - y_{k+1}| \leq |y_{(k+1)p} - y_{k+1}|,$$

$$h \left| \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y) \right| < 2$$

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior**
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor

# Equações de ordem superior

EDs de ordem superior são comuns e sempre podem ser escritas como

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

A ideia é transformar um PVI com esta equação em um sistema de  $m$  equações de ordem 1:

$$\left\{ \begin{array}{l} z_1 = u \\ z_1' = u' = z_2 \\ z_2' = u'' = z_3 \\ z_3' = u''' = z_4 \\ \vdots \\ z_{m-1}' = u^{(m-1)} = z_m \\ z_m' = u^{(m)} = f(x, u, u', \dots, u^{(m-1)}) \end{array} \right.$$

em que os valores de  $u, u', u'', \dots, u^{(m-1)}$  são conhecidos em um mesmo ponto.

## Equações de ordem superior - Unicidade

Uma função  $f(x, y_1, \dots, y_m)$  definida no domínio

$D = \{(x, u_1, \dots, u_m) \mid a \leq x \leq b, -\infty < u_i < +\infty, i = 1, \dots, m\}$  satisfaz a **condição de Lipschitz** em  $D$  nas variáveis  $u_1, \dots, u_m$  se existe uma constante  $L$  tal que

$$|f(x, u_1, \dots, u_m) - f(x, z_1, \dots, z_m)| \leq L \sum_{j=1}^m |u_j - z_j|,$$

para todo  $(x, u_1, \dots, u_m)$  e  $(x, z_1, \dots, z_m)$  em  $D$ .

Pelo Teorema do Valor Médio ainda podemos dizer que  $f$  satisfaz a condição e Lipschitz em  $D$  com constante  $L$  se  $f$  e suas primeiras derivadas parciais forem contínuas em  $D$  e

$$\left| \frac{\partial f(x, u_1, \dots, u_m)}{\partial u_i} \right| \leq L,$$

para todo  $i = 1, \dots, m$  e  $(t, u_1, \dots, u_m)$  em  $D$ .

# Equações de ordem superior - Unicidade

## TEOREMA

Seja o domínio

$D = \{(x, u_1, \dots, u_m) \mid a \leq x \leq b, -\infty < u_i < +\infty, i = 1, \dots, m\}$  e  $f_i(x, u_1, \dots, u_m)$ , para  $i = 1, \dots, m$  funções contínuas e satisfazendo a condição de Lipschitz em  $D$ .

Então o sistema de 1ª ordem com as funções  $f_i$  e condições iniciais no ponto  $x = a$  tem solução única  $u_1(x), \dots, u_m(x)$ , para  $a \leq x \leq b$ .

## Equações de ordem superior - Exemplo

$$y'' = 4y' - 3y - x, \quad y(0) = 4/9, \quad y'(0) = 7/3, \quad \text{com } h = 0.25$$

Transformando em sistema:

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = f(x, y, z) = 4z - 3y - x \end{cases}$$

Trataremos estas equações como vetoriais, definindo  $Y = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}$  podemos reescrever o PVI:

$$\begin{cases} \dot{Y} = \begin{pmatrix} y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ f(x, y, z) \end{pmatrix} = F(x, Y) = F(x, \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}) \\ Y(0) = \begin{pmatrix} y(0) \\ z(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y'_0 \end{pmatrix} = Y_0 \end{cases}$$

Podemos resolver por qualquer método como Runge-Kutta ou Taylor, por exemplo, mas exemplificaremos com Euler aperfeiçoado. No caso tínhamos:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hy'_k)]$$

## Equações de ordem superior - Exemplo

Na forma vetorial:

$$Y_{k+1} = Y_k + \frac{h}{2}[F(x_k, Y_k) + f(x_k + h, Y_k + hY'_k)]$$

Dado que:

$$F(x_k, Y_k) = \begin{pmatrix} z_k \\ f(x_k, y_k, z_k) \end{pmatrix}$$

e

$$\begin{aligned} F(x_k + h, Y_k + hY'_k) &= F \left[ x_k + h, \begin{pmatrix} y_k \\ z_k \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} z_k \\ f(x_k, y_k, z_k) \end{pmatrix} \right] = \\ &= F \left[ (x_k + h), \begin{pmatrix} y_k + hz_k \\ z_k + hf(x_k, y_k, z_k) \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} z_k + hf(x_k, y_k, z_k) \\ f(x_k + h, y_k + hz_k, z_k + hf(x_k, y_k, z_k)) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

## Equações de ordem superior - Exemplo

Temos então:

$$\begin{aligned}
 Y_{k+1} &= \begin{pmatrix} y_k \\ z_k \end{pmatrix} + \frac{h}{2} \left[ \begin{pmatrix} z_k \\ f(x_k, y_k, z_k) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} z_k + hf(x_k, y_k, z_k) \\ f(x_k + h, y_k + hz_k, z_k + hf(x_k, y_k, z_k)) \end{pmatrix} \right] \\
 &= \begin{pmatrix} y_k + \frac{h}{2}[2z_k + hf(x_k, y_k, z_k)] \\ z_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k, z_k) + f(x_k + h, y_k + hz_k, z_k + hf(x_k, y_k, z_k)) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Para simplificar podemos ainda definir

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_k, y_k, z_k) \\ k_2 = hf(x_k + h, y_k + hz_k, z_k + k_1) \end{cases} \quad \text{e resolver } Y_{k+1} = \begin{pmatrix} y_k + hz_k + \frac{h}{2}k_1 \\ z_k + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{pmatrix}$$



## Equações de ordem superior - Exemplo

Voltando ao nosso exemplo:

$$k_1 = hf(x_0, y_0, z_0) = h(4z_0 - 3y_0 - x_0) = 0.25(4 * \frac{7}{3} - 3 * \frac{4}{9} - 0) =$$

$$0.25 * \frac{24}{3} = 0.25 * 8 = 2.0$$

$$k_2 = hf(x_0 + h, y_0 + hz_0, z_0 + k_1) = hf(0.25, \frac{4}{9} + 0.25 * \frac{7}{3}, \frac{7}{3} + 2) =$$

$$= 0.25f(0.25, 1.028, 4.333) = 0.25(4 * 4.333 - 3 * 1.028 - 0.25) =$$

$$= 0.25 * 13.998 = 3.4995$$

Assim:

$$Y_1 = \begin{pmatrix} y_0 + hz_0 + \frac{h}{2}k_1 \\ z_0 + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{9} + 0.25 * \frac{7}{3} + \frac{0.25}{2} * 2 \\ \frac{7}{3} + \frac{1}{2}(2 + 3.4995) \end{pmatrix}$$

$$\approx \begin{pmatrix} 1.278 \\ 5.083 \end{pmatrix}$$

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas**
- 9 Equação do Calor

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Problemas de contorno em geral são representados por

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ a_1 y(a) + b_1 y'(a) = \gamma_1 \\ a_2 y(b) + b_2 y'(b) = \gamma_2 \end{cases}$$

em que  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  são constantes reais conhecidas, tais que nem  $a_1$  e  $b_1$  nem  $a_2$  e  $b_2$  sejam nulas ao mesmo tempo.

Se  $f(x, y, y') \equiv 0$ ,  $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$  o sistema é chamado *homogêneo* e  $y \equiv 0$  é sempre solução.

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

## LEMBRETE

Uma função  $g(h)$  é  $\mathcal{O}(h^p)$  se  $\exists C > 0 : |g(h)| \leq C|h^p|$

Transformar equação diferencial em um sistema de equações.

Vamos definir  $x_0 = a$ ,  $x_n = b$  e dividir o intervalo  $[a, b]$  em  $n$  partes iguais de comprimento  $h = (b - a)/n$  tal que

$$x_k = x_0 + kh, k = 0, 1, \dots, (n-1) \text{ e } y_k = y(x_k) = y(x_0 + kh), k = 0, 1, \dots, n$$

O sistema será linear ou não dependendo de  $f(x, y, y')$  ser ou não linear em  $y$  e  $y'$  e poderá ser resolvido pelos métodos já vistos.

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

A derivada de  $y$  em  $x_i$  pode ser aproximada por

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \equiv \text{diferença avançada}$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \equiv \text{diferença atrasada}$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \equiv \text{diferença centrada}$$

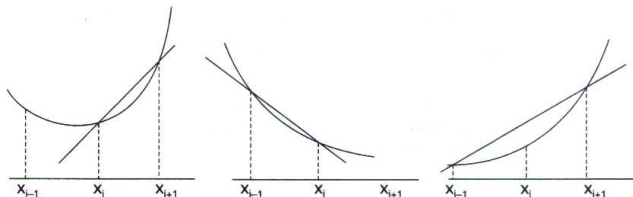


Figura: Fonte: Ruggiero&Lopes

## Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Vamos usar a série de Taylor de  $y(x)$  em torno de  $x_i$  até a 1ª ordem para estimar o erro da 1ª aproximação:

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(\eta)}{2}(x - x_i)^2, \text{ para algum } \eta \text{ entre } x \text{ e } x_i$$

No ponto  $x_{i+1} = x_i + h$ :

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(\eta)}{2}(x_{i+1} - x_i)^2$$

fazendo com que

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = y'(x_i)h + \frac{h^2}{2}y''(\eta)$$

ou ainda

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + \frac{h}{2}y''(\eta)$$

## Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Se  $y''(x)$  for limitada em  $[a, b]$ , ou seja,

$\exists M > 0 : |y''(x)| \leq M, \forall x \in [a, b]$ , então o erro de  $y'(x_i)$  é  $\mathcal{O}(h)$  pois

$$|g(h)| = \left| y'(x_i) - \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \right| = \left| \frac{y''(\eta)}{2} h \right| \leq \frac{M}{2} |h|$$

Mostra-se de modo análogo que a 2ª aproximação também tem erro  $\mathcal{O}(h)$ .

Já para a 3ª vamos usar Taylor até 2ª ordem:

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 + \frac{y'''(\eta)}{3!}(x - x_i)^3$$

Aplicando em  $x = x_{i+1}$ :

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 + \frac{y'''(\eta)}{6}h^3 \quad (1)$$

e em  $x = x_{i-1}$ :

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 - \frac{y'''(\eta)}{6}h^3 \quad (2)$$

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Fazendo (1)-(2):

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = 2y'(x_i)h + \frac{h^3}{6} [y'''(\eta_{i+1}) + y'''(\eta_{i-1})]$$

Aplicando na nossa 3ª aproximação da derivada:

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} - \frac{h^2}{12} [y'''(\eta_{i+1}) + y'''(\eta_{i-1})]$$

e se  $y'''(x)$  for limitada em  $[a, b]$  mostra-se que o erro é  $\mathcal{O}(h^2)$ . Como  $h < 1$  esta 3ª fórmula é mais precisa e é a mais usada na prática.



## Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Procedimento similar ao que acabamos de ver pode ser usado para aproximar a segunda derivada. Usando Taylor de 3ª ordem em torno de  $x_i$ ; vamos aproximar  $y(x_{i+1})$  e  $y(x_{i-1})$ :

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}y^{(iv)}(\eta_{i+1}) \quad (3)$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) - \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}y^{(iv)}(\eta_{i-1}) \quad (4)$$

Fazendo (3) + (4):

$$y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) = 2y(x_i) + y''(x_i)h^2 + \frac{h^4}{24} \left[ y^{(iv)}(\eta_{i+1}) + y^{(iv)}(\eta_{i-1}) \right]$$

levando à aproximação seguinte:

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

com erro  $\mathcal{O}(h^2)$  se  $y^{(iv)}(x)$  for limitada em  $[a, b]$ .

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

EXEMPLO:

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

Dividimos o intervalo  $[0, 1]$  em  $n$  partes iguais  $h = 1/n$  tal que tenhamos  $x_0 = 0, x_1 = h, \dots, x_j = jh, \dots, x_n = 1$ . Conhecemos  $y_0 = y(x_0)$  e  $y_n = y(x_n)$  e queremos encontrar  $y_1, y_2, \dots, y_{n-1}$ . Usaremos as derivadas aproximadas:

$$y''(x_i) \approx (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})/h^2 \quad y'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_{i-1})/2h$$

Equação discretizada:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{h} + y_i = x_i$$

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Reescrevendo:

$$y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} + hy_{i+1} - hy_{i-1} + h^2y_i = h^2x_i$$

Dado que  $x_i = ih$ :

$$(1 - h)y_{i-1} + (h^2 - 2)y_i + (1 + h)y_{i+1} = ih^3$$

Substituindo  $i$  por  $2, 3, \dots, n - 1$  caímos no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} (h^2 - 2)y_1 + (1 + h)y_2 & = h^3 \\ \vdots & \\ (1 - h)y_{i-1} + (h^2 - 2)y_i + (1 + h)y_{i+1} & = ih^3, 2 \leq i \leq (n - 2): \\ (1 - h)y_{n-2} + (h^2 - 2)y_{n-1} & = (n - 1)h^3 + h + 1 \end{cases}$$

# Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas

Trata-se de um sistema tridiagonal de ordem  $(n - 1)$ :

$$\begin{bmatrix} d_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & d_2 & c_2 & & & & \\ & a_3 & d_3 & c_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & a_{n-2} & d_{n-2} & c_{n-2} & \\ & & & & a_{n-1} & d_{n-1} & \end{bmatrix}$$

em que

$$d_i = (h^2 - 2), 1 \leq i \leq (n - 1)$$

$$c_i = (1 + h), 1 \leq i \leq (n - 2)$$

$$a_i = (1 - h), 2 \leq i \leq (n - 1)$$

NOTA: Similarmente, um PVC não-linear resulta em um sistema de equações não-lineares.

# Outline

- 1 Introdução
- 2 Problema de Valor Inicial
- 3 Método de Euler
- 4 Métodos de Taylor
- 5 Runge-Kutta
- 6 Passo múltiplo
- 7 Equações de ordem superior
- 8 Problemas de Valor de Contorno - Diferenças finitas
- 9 Equação do Calor**

# Equação do Calor

Diferenças finitas também podem ser usadas em EDPs

EX.: Equação do Calor - Encontrar função  $u(x, t)$  da temperatura no tempo  $t$  em um ponto  $x$  de uma barra fina de comprimento  $L$ :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, 0 \leq x \leq L, 0 \leq t \leq T$$

condição inicial

$$u(x, 0) = q(x), 0 \leq x \leq L$$

e condições de contorno

$$u(0, t) = \gamma_1, u(L, t) = \gamma_2, 0 < t \leq T$$

Solução analítica amplamente estudada e conhecida embora nem sempre trivial: séries de Fourier.

## Equação do Calor

Solução numérica usa diferenças finitas como fizemos no PVC, dividindo o intervalo  $[0, L]$  na variável  $x$  em  $n + 2$  pontos:

$$x_i = h_i, \quad h = \frac{L}{n+1}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n+1$$

assim como o intervalo em  $t$ :

$$t_j = j\Delta t, \quad \Delta t = \frac{T}{m}, \quad m = 0, 1, \dots, m$$

Definimos também a aproximação  $u_{ij}$  para a solução exata de  $u(x_i, t_j)$ .

Da condição inicial temos que

$$u_{i0} = q(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n+1$$

# Equação do Calor

A derivada  $u_{xx}$  pode ser aproximada por analogia ao que já vimos mantendo  $t$  constante:

$$u_{xx}(x_i, t_j) \approx \frac{u(x_i - h, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i + h, t_j)}{h^2}$$

com erro  $\mathcal{O}(h^2)$ .

Usando a versão aproximada:

$$u_{xx}(x_i, t_j) \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2}$$

Já a derivada em  $t$  pode ser aproximada usando-se *diferença avançada* (método explícito) ou *atrasada* (método implícito)



# Equação do Calor - Método Explícito

Na diferença avançada temos

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u(x_i, t_j + \Delta t) - u(x_i, t_j)}{\Delta t}$$

com erro  $\mathcal{O}(\Delta t)$ .

Isso substituído na aproximação nos dá

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{\Delta t}$$

# Equação do Calor - Método Explícito

Substituindo no conjunto da equação diferencial teremos

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{\Delta t} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2}$$

para  $i = 1, 2, \dots, n$  e  $j = 0, 1, \dots, m - 1$ . Rearranjando os termos:

$$u_{i,j+1} = \alpha u_{i-1,j} + (1 + 2\alpha)u_{ij} + \alpha u_{i+1,j}$$

em que

$$\alpha = \frac{\Delta t}{h^2}$$

## Equação do Calor - Método Explícito

Esta é uma equação a diferenças que também pode ser convertida em um sistema linear tridiagonal usando os valores conhecidos no contorno:

$$u_{j+1} = Au_j + b, j = 0, 1, \dots, m-1$$

dado que considerando as condições de contorno teremos

$$A = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & & & & & \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \\ & & & & \alpha & 1-2\alpha & \end{bmatrix} \quad u = \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{n-1,j} \\ u_{n,j} \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} \alpha\gamma_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha\gamma_2 \end{bmatrix}$$

com a seguinte condição inicial:

$$u_0 = \begin{bmatrix} q(x_1) \\ q(x_2) \\ \vdots \\ q(x_{n-1}) \\ q(x_n) \end{bmatrix}$$

# Equação do Calor - Método Explícito

Pode-se mostrar que uma boa aproximação exige que

$$\alpha = \frac{\Delta t}{h^2} < \frac{1}{2}$$

o que é uma condição severa. Por exemplo, se  $h = 0.01$  precisamos de  $\Delta t < 20000$ .

# Equação do Calor - Método Implícito

No método implícito usamos a diferença atrasada:

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_j - \Delta t)}{\Delta t}$$

com erro novamente  $\mathcal{O}(\Delta t)$ .

Isso substituído na aproximação nos dá

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t}$$

# Equação do Calor - Método Implícito

Substituindo no conjunto da equação diferencial teremos

$$\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2}$$

para  $i = 1, 2, \dots, n$  e  $j = 0, 1, \dots, m - 1$ . Rearranjando os termos:

$$u_{i,j-1} = -\alpha u_{i-1,j} + (1 + 2\alpha)u_{i,j} - \alpha u_{i+1,j}$$

em que

$$\alpha = \frac{\Delta t}{h^2}$$

## Equação do Calor - Método Implícito

Esta é uma equação a diferenças que também pode ser convertida em um sistema linear tridiagonal usando os valores conhecidos no contorno:

$$Au_j = u_{j-1} + b, j = 1, \dots, m - 1$$

dado que considerando as condições de contorno teremos

$$A = \begin{bmatrix} 1 + 2\alpha & -\alpha & & & \\ -\alpha & 1 + 2\alpha & -\alpha & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\alpha & 1 + 2\alpha & -\alpha \\ & & & -\alpha & 1 + 2\alpha \end{bmatrix} \quad u = \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{n-1,j} \\ u_{n,j} \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} \alpha\gamma_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha\gamma_2 \end{bmatrix}$$

com a seguinte condição inicial:

$$u_0 = \begin{bmatrix} q(x_1) \\ q(x_2) \\ \vdots \\ q(x_{n-1}) \\ q(x_n) \end{bmatrix}$$

# Equação do Calor - Método Implícito

No caso do método implícito, não há restrição para o tamanho de  $h$  e  $\Delta t$ . Demonstra-se que  $u_{ij}$  converge para a solução exata  $u(x_i, t_j)$  quando  $h \rightarrow 0$  e  $\Delta t \rightarrow 0$ , ou seja, forem suficientemente pequenos.