CCI-22

Prof. Celso HIRATA

Sala 116 Tel. 347 5987

E mail : hirata@comp.ita.br

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Departamento de Computação Científica

Divisão de Ciência da Computação

12 de dezembro de 2007

Roteiro

1. **Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias**
   - Introdução
   - Método de Euler
   - Métodos de Série de Taylor
   - Métodos de Runge-Kutta
   - Métodos Explícitos (Adams - Bashforth)
   - Métodos Implícitos (Adams - Moulton)
   - Métodos de Previsão-Correção

Roteiro

Introdução

- Objetivo:
  - Estudar métodos de resolução numérica de equações diferenciais ordinárias (EDO), e sistemas de equações diferenciais.
- Motivação:
  - Dificuldade em resolução algébrica de EDO;
  - Solução Computacional: interesse em valor numérico;
  - Entendimento da base dos métodos de resolução de EDO;

- Equação Diferencial Ordinária ou EDO (uma só variável independente):

Exemplos: $y' = x + y \qquad y' = x2 + y \qquad y'' = y' + y$

- Equação Diferencial Parcial (duas ou mais variáveis independentes).

Exemplo: $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$ com $u = u(x, y)$

- Uma EDO de ordem n pode ser escrita na forma:

$$y^{(n)}(x) = f(x, y(x), y'(x), \cdots, y^{(n-1)}(x)), \; a \leq x \leq b$$

- A solução desta equação é qualquer função $y = F(x)$ que é definida em $[a, b]$, tem n derivadas neste intervalo e a satisfaz.

- Resolução algébrica:

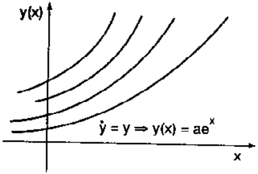
Exemplo: $y' = 2x + 3$

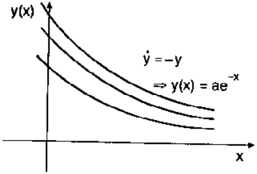
$\int y' dx = \int 2x + 3$

Resultado: Família de curvas

$y = x^2 + 3x + c$

Condições Iniciais: curvas





- Para especificar uma das curvas que formam a família de soluções precisamos impor condições adicionais na função y:

$$y(a) = \eta_1, y'(a) = \eta_2, \cdots, y^{(n-1)}(a) = \eta_n$$

- O problema de achar solução de equação diferencial com as condições é chamado de **problema de valor inicial (PVI)** ou problema de condição inicial.

- ordem 1:

$$y'(x) = f(x, y(x)) , \quad y(a) = \eta, \; a \leq x \leq b$$

- ordem n:

$$y^{(n)}(x) = f(x, y'(x), y''(x), \cdots , y^{(n-1)}(x)) , \quad a \leq x \leq b$$

$$y(a) = \eta_1, \; y'(a) = \eta_2, \; \cdots \; , \; y^{(n-1)}(a) = \eta_n$$

- Exemplo:

$$y'' = -(1 - y^2)y' - y , \quad y(0) = 1, y'(0) = 2$$

Uma EDO é linear se y e suas derivadas aparecem linearmente na equação.

$$xy' = x - y \qquad \text{linear}$$
$$y'' + (1 - y^2)y' + y = 0 \qquad \text{não linear}$$

É fácil transformar uma equação de ordem m num sistema de m equações de ordem 1. Assim:

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

$$\begin{aligned}
z_1 &= u \\
z_1' &= u' = z_2 \\
z_2' &= u'' = z_3 \\
z_3' &= u''' = z_4 \\
z_{m-1}' &= u^{(m-1)} = z_m \\
z_m' &= u^{(m)} = f(x, u, u', u'', \cdots, u^{(m-1)})
\end{aligned}$$

■ Exemplo:

Na equação acima, temos:

$$y'' = -(1 - y^2)y' - y = f(x, y, y')$$

$$\begin{aligned} z_1 &= y \\ z_1' &= y' = z_2 \\ z_2' &= y'' = z_3 \\ -(1 - y^2)y' - y &= f(x, y, y') \end{aligned}$$

com $z_1(0) = 1$ e $z_2(0) = 2$

- Seja $Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y' \end{bmatrix}$ e a equação transformada $Z' = \begin{bmatrix} z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y' \\ y'' \end{bmatrix}$ com $Z(0) = \begin{bmatrix} y(0) \\ y'(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$.

Ou seja, temos de resolver a equação vetorial:

$$Z' = F(x, Z) = \begin{bmatrix} y' \\ -(1 - y^2)y' - y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2 \\ -(1 - z_1^2)z_2 - z_1 \end{bmatrix}$$

com $Z(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$.

- Veremos mais adiante como resolver esse sistema para um método específico. A seguir, vamos apresentar os métodos básicos para resolução de EDO não linear.

Roteiro

Método de Euler

$$y' = f(x,y) \qquad y(x_0) = y_0$$

- Para fazer uma estimativa de y_1 vamos considerar que

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_0,y_0} = f(x_0,y_0)$$

e daí,

$$\frac{y-y_0}{x-x_0} = f(x_0,y_0)$$

- Observando, vemos que, se $h = x_1 - x_0$ tender a zero , teremos que a ordenada do ponto Q , y^* tende a y_1 e daí,

$$y^* = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

ou ainda :

$$y_1 \approx y_0 + hf(x_0, y_0)$$

- Expressão do método Euler:

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

- Exemplo:

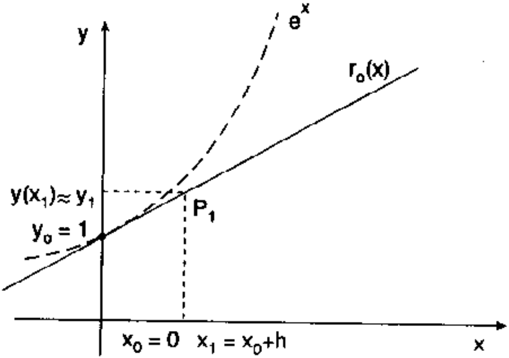
$$y' = y = f(x,y)\,, \quad y(0) = 1$$

- Solução exata : $y = e^x$
- Pelo método de Euler temos:

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

- Tomando $h = 0.5$:

$$\begin{aligned} y_1 = y(0.5) &= y_0 + hy_0 = 1 + 0.5 * 1 = 1.5 \\ y_2 = y(1.0) &= y_1 + hy_1 = 1.5 + 0.5 * 1.5 = 2.25 \end{aligned}$$



$P_1 \notin$ **curva** $y = e^x$ **, mas à curva** $y = ae^x$, $y(x_1) = ae^{x_1}$

$$\begin{aligned} y(0.5) &= ae^{0.5} = a \times 1.6487 \\ y_1 = y(0.5),\ 1.5 &= a \times 1.6487 \Rightarrow a = 0.9098 \end{aligned}$$

- Definição: Um método numérico é de ordem p se existe um número c tal que:

$$|e_{loc}(x_i)| \leq ch^{p+1}$$

- Veremos mais adiante que o método de Euler é de ordem $p = 1$.

- Erro Local e Erro Global
- A cada passo estamos cometendo um erro local, estamos nos distanciando da solução exata. O erro global é o efeito acumulado desses distanciamentos locais.

- Outra forma de deduzir Euler:

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$$

Onde h é algum valor pequeno, mas não fixo.
Introduzindo a notação:
$x_k = a + kh\,, \quad k = 0, 1, \ldots, \quad a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$
Fazendo y_k , $k = 0, 1, \ldots$ representa uma aproximação para $y(x_k)$ onde $y(x)$ é a solução de
$y'(x) = f(x, y)$ então

$$y'(x_k) \approx \frac{y_{k+1} - y_k}{h}$$

Daí

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

com $y_0 = \eta$

- Exemplo:
- Resolver $y' = 2x + 3$, com $y = 1$ quando $x = 1$.
- Queremos y para $x = 1.0(0.1)1.5$.

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

$$f(x, y) = 2x + 3\,, \quad x_0 = 1.0,\ y_0 = 1.0,\ h = 0.1$$

$$
\begin{aligned}
h &= 0.1 \\
y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\
&= 1 + 0.1(2 \times 1 + 3) = 1.50 para x = 1.1 \\
y_2 &= y_1 + hf(x_1, y_1) = \\
&= 1.5 + 0.1(2 \times 1.1 + 3) = 2.02 para x = 1.2 \\
y_3 &= y_2 + hf(x_2, y_2) = 2.56 para x = 1.3 \\
y_4 &= y_3 + hf(x_3, y_3) = 3.12 para x = 1.4 \\
y_5 &= y_4 + hf(x_4, y_4) = 3.70 para x = 1.5
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
h &= 0.01 \\
y_1 &= y0 + hf(x_0, y_0) \\
&= 1 + 0.01(2 \times 1 + 3) = \\
&= 1.050 \text{ para } x = 1.01 \\
y_2 &= 1.5512 \text{ para } x = 1.02 \\
& \dots \\
y_{10} &= 1.509 \text{ para } x = 1.1 \\
y_{20} &= 2.038 \text{ para } x = 1.2 \\
y_{30} &= 2.587 \text{ para } x = 1.3 \\
y_{40} &= 3.156 \text{ para } x = 1.4 \\
y_{50} &= 3.747 \text{ para } x = 1.5
\end{aligned}
$$

Roteiro

Métodos de Série de Taylor

- Suponhamos que, de alguma forma, tenhamos as aproximações $y_1, y_2, \cdots y_n$ para $y(x)$, em $x_1, x_2, \cdots x_n$.
- Se y for suficientemente suave, a série de Taylor de $y(x)$ em torno de $x = x_n$ é:

$$y(x) = y(x_n) + y'(x_n)(x - x_n) + \frac{y''(x_n)(x - x_n)^2}{2!} + \cdots + \frac{y^{(k)}(x_n)(x - x_n)^k}{k!} + E_T$$

onde $E_T = \dfrac{y^{(k+1)}(\xi)(x - x_n)^{k+1}}{(k+1)!}$ e ξ entre x_n e x

- Assim aproximamos $y(x_{n+1}) \approx y_{n+1}$ onde $x_{n+1} = x_n + h$.

$$y_{n+1} = y_n + y'_n\, h + y''_n\, \frac{h^2}{2} + \cdots + y_n^{(k)}\, \frac{h^k}{k!}$$

- Para aplicar o método de Taylor de ordem k, temos que calcular $y''_n, y'''_n, \cdots, y_n^{(k)}$

- Agora,

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

- Assim, por exemplo, o método de série de Taylor de 2a ordem é:

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

$$n = 0, 1, \cdots$$

- Analogamente,

$$
\begin{aligned}
y'''(x) &= f_{xx}(x, y(x)) + f_{xy}(x, y(x))y'(x) \\
&\quad + [f_{yx}(x, y(x)) + f_{yy}(x, y(x))y'(x)]y'(x) + f_y(x, y(x))y''(x) \\
&= f_{xx} + f_{xy}f + f_{yx}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f_y^2 f \\
&= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f
\end{aligned}
$$

- A terceira derivada total já nos mostra a dificuldade nos cálculos.

- Consideremos o método de série de Taylor de ordem $k = 1$, ou seja,

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + E_T$$

- O método de Euler é o método da Série de Taylor de 1ª ordem.

- Exemplo: Calcular $y(2.1)$ usando o método da série de Taylor de 2ª ordem:

$$xy' = x - y\,, \quad y(2) = 2$$

$$y' = \frac{x-y}{x} = 1 - \frac{y}{x}(= f)\,, \text{ com } y'(2) = 1 - \frac{2}{2} = 0$$

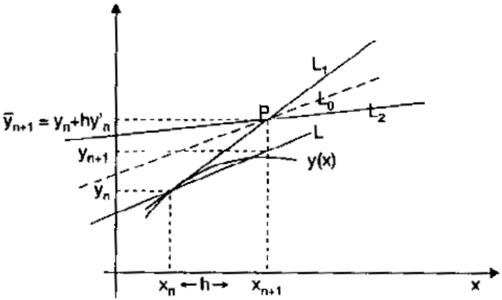
$$\begin{aligned}
y'' &= \frac{y}{x^2} - \frac{y'}{x}\,(= f_x + f_y f) \\
y''(2) &= \frac{2}{4} + 0 = \frac{1}{2} \\
y(x) &= y(2) + (x-2)y'(2) + (x-2)^2\frac{y''(2)}{2} \\
&= 2 + 0 + \frac{1}{4}(x-2)^2 \\
y(2.1) &= 2 + 0.25(0.1)^2 \approx 2.00238
\end{aligned}$$

Roteiro

Métodos de Runge-Kutta

- Possuem 3 propriedades:
  - são de passo um;
  - concordam com a série de Taylor até os termos de ordem h^P;
  - não exigem o cálculo de qualquer derivada de $f(x,y)$; contudo exigem mais computação da função f.

- Método de Runge-Kutta de 1ª ordem - Método de Euler
- Pode-se ver que o método de Euler é um método de série de Taylor de 1ª ordem e que satisfaz as 3 propriedades acima. Assim, ele é também um método de Runge-Kutta de ordem $P = 1$.
- Método de Runge-Kutta de 2ª ordem
- Apresentaremos inicialmente um método particular, o método de Heun, ou o método de Euler Aperfeiçoado. Ele tem uma interpretação geométrica simples.



$$L_1: \quad r(x) = y_n + (x - x_n)f(x_n, y_n)$$

$$L_2: \quad s(x) = (y_n + hy'_n) + [x - (x_n + h)]f(x_n + h, y_n + hy'_n)$$

- O coeficiente angular de L_0 é : $\dfrac{f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hy'_n)}{2}$

$L = t(x) = y_n + (x - x_n)\dfrac{[f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hy'_n)]}{2}$

- Assim,

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

- (Método de Euler aperfeiçoado)

- Concordância com o método da série de Taylor até os termos de 2ª ordem em h:

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

com $eloc(x_n) = \frac{h^3}{3!} y'''(\xi)$

- Devemos trabalhar com o termo $f(x_n + h, y_n + hy'_n)$ do método de Euler Aperfeiçoado. Desenvolvendo $f(x, y)$ por Taylor em torno de (x_n, y_n), temos:

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

com α entre x e x_n e β entre y e y_n. Assim,

$$\begin{aligned} f(x_{n+h}, y_{n+h}y'_n) &= f(x_n,y_n) + f_x(x_n,y_n)h + f_y(x_n,y_n)hy'_n + \frac{h^2}{2}[f_{xx}(\alpha,\beta) \\ & +2f_{xy}(\alpha,\beta)y'_n + f_{yy}(\alpha,\beta)y'^2_n] \end{aligned}$$

- Substituindo na expressão y_{n+1} do método de Euler Aperfeiçoado, temos:

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}\{f(x_n, y_n) + f(x_n, y_n) + hf_x(x_n, y_n) + hf(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n) \\
&+ \frac{h^2}{2}[f_{xx}(\alpha, \beta) + 2f(x_n, y_n)f_{xy}(\alpha, \beta) + f^2(x_n, y_n)f_{yy}(\alpha, \beta)]\} \\
y_{n+1} &= \underbrace{y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2}[f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n)]}_{Taylor} + \\
&+ \frac{h^3}{4}[f_{xx}(\alpha, \beta) + 2f(x_n, y_n)f_{xy}(\alpha, \beta) + f^2(x_n, y_n)f_{yy}(\alpha, \beta)]
\end{aligned}
$$

- Assim o método de Euler Aperfeiçoado concorda com o método de Taylor até os termos de ordem h^2.

- De forma análoga pode-se construir método de 3ª ordem, 4ª ordem, etc.
- Como vimos o método de Runge-Kutta de 2ª ordem é dado por:

$$y_{k+1} = y(x_k) + \frac{h}{2}[f(x_k, y(x_k)) + f(x_{k+1}, y(x_k) + hf(x_k, y(x_k))]$$

ou

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + \frac{k_1 + k_2}{2} \\ k_1 &= hf(x_k, y_k) \\ k_2 &= hf(x_{k+1}, y_k + k_1) \end{aligned}$$

- 3ª ordem:

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{2}{9}\left(k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{4}{9}k_3\right)\\
k_1 &= hf\left(x_n, y_n\right)\\
k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)\\
k_3 &= hf\left(x_n + \frac{3}{4}h, y_n + \frac{3}{4}k_2\right)
\end{aligned}$$

- 4ª ordem:

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\\
k_1 &= hf(x_n, y_n)\\
k_2 &= hf(x_n + h/2, y_n + k_1/2)\\
k_3 &= hf(x_n + h/2, y_n + k_2/2)\\
k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3)
\end{aligned}$$

■ Exemplo:

Resolva $y' = x - y$ tal que $y(0) = 2.0$ e $x = 0(0.2)1.0$

$f(x, y(x)) = x - y$ e $x_0 = 0, y(0) = 2$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{k_1 + k_2}{2}\ ,\ k_1 = hf(x_k, y_k)\ ,\ k_2 = hf(x_{k+1}, y_k + k_1)$$

n	x_k	y_k	k_1	k_2
0	0.0	2.0	-0.4	-0.280
1	0.2	1.66	-0.292	-0.1936
2	0.4	1.4172	-0.20344	-0.122752
3	0.6	1.254104	-0.1308208	-0.0646566
4	0.8	1.1563652	-0.0712738	-1.70186-2
5	1.0	1.1122195		

- Como resolver equações com derivadas de ordem maiores?
- Exemplo:

Dada equação diferencial

$$y'' + 2y^2 = e^x \, , \; y(0) = 0 \, , \; y'(0) = 0$$

Determinar, por Runge-Kutta de 4ª ordem, o valor aproximado de $y(0.5)$ e $y'(0.5)$.

Façamos :

$y' = u$: $f(x, y, u) \quad y(0) = 0$

$u' = e^x - 2y^2$: $g(x, y, u) \quad u(0) = 0$

$x_0 = 0 \quad y_0 = 0 \quad u_0 = 0 \quad h = 0.5$

- Usar a mesma formula para cada equação, mas considerar as dependências entre as variáveis: resolver ”simultaneamente” os k_i, antes de calcular k_{i+1}
- (Não resolver cada equação independentemente)

$$
\begin{aligned}
y_k + 1 &= y_k + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] \\
k_1 &= hf(x_k, y_k) \\
k_{f1} &= hf(x_0, y_0, u_0) = hf(0,0,0) = 0.5 \times 0 = 0 \\
k_{g1} &= hg(x_0, y_0, u_0) = hg(0,0,0) = 0.5 \times (e^0 - 0) = 0.5
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
k_2 &= hf(x_k + h/2, y_k + k_1/2) \\
k_{f2} &= h.f(x_0 + h/2, y_0 + k_{f1}/2, u_0 + k_{g1}/2) \\
&= 0.5.f(0.5/2, 0, 0.5/2) = 0.5 \times 0.5/2 = 0.125 \\
k_{g2} &= h.g(x_0 + h/2, y_0 + k_{f1}/2, u_0 + k_{g1}/2) \\
&= 0.5(0.5/2, 0, 0.25) = 0.5 \times (e^{0.5/2} - 2 \times 0^2) = 0.6420
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
k_3 &= hf(x_k + h/2, y_k + k_2/2) \\
k_{f3} &= h.f(x_0 + h/2, y_0 + k_{f2}/2, u_0 + k_{g2}/2) \\
&= 0.5(0.5/2, 0.125/2, 0.6420/2) = 0.5(0.6420/2) = 0.1605 \\
k_{g3} &= h.g(x_0 + h/2, y_0 + k_{f2}/2, u_0 + k_{g2}/2) \\
&= 0.5g(0.5/2, 0.125/2, 0.642/2) = e^{0.5/2} - 0.125^2/2 = 0.6381
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
k_4 &= hf(x_k + h, yk + k3) \\
k_{f4} &= h.f(x_0 + h, y_0 + k_{f3}, u_0 + k_{g3}) \\
&= 0.5f(0.5, 0.1605, 0.6381) = 0.5 \times 0.6381 = 0.319 \\
k_{g4} &= h.g(x_0 + h, y_0 + k_{f3}, u_0 + k_{g3}) \\
&= 0.5g(0.5, 0.1605, 0.6381) = e^{0.5} - 2(0.1605)^2 = 0.7971
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + \frac{1}{6}(k_{f1} + 2k_{f2} + 2k_{f3} + k_{f4}) \\
&= 0 + \frac{1}{6}(0 + 2 \times 0.125 + 2 \times 0.1605 + 0.319) \\
u_1 &= u_0 + \frac{1}{6}(k_{g1} + 2k_{g2} + 2k_{g3} + k_{g4}) \\
&= 0 + \frac{1}{6}(0.5 + 2 \times 0.6420 + 2 \times 0.6381 + 0.7971)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
y_1 &= 0.148 \rightarrow y(0.5) \\
u_1 &= 0.643 \rightarrow y'(0.5)
\end{aligned}
$$

- Método de um passo usa informação no ponto anterior (x_n e y_n) para calcular y_{n+1}
- Método de passo múltiplo usa informações sobre a solução em mais de um ponto.

Roteiro

Métodos Explícitos (Adams - Bashforth)

$$
\begin{aligned}
y' &= f(x,y) \\
\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))\,\mathrm{d}x \\
y(x_{n+1}) - y(x_n) &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))\,\mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

- Devemos então aproximar $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))$ por integração numérica

- Métodos Explícitos:
- com $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-m}$ para aproximar o integral
- aproximamos $f(x, y(x))$ pelo polinômio de grau m, $p_m(x)$ que interpola $f(x, y)$ em $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-m}$ e então:

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_m(x)\,\mathrm{d}x$$

- Se por exemplo, escolhermos $m = 3$, vamos usar $(x_n, y_n), (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_{n-2}, y_{n-2}), (x_{n-3}, y_{n-3})$ aproximando $f(x, y(x))$ pelo polinômio de grau ≤ 3, $P_3(x)$ que interpola $f(x, y(x))$ nos pontos acima. Chamando:

$$f_{n-j} = f(x_{n-j}, y_{n-j}), \quad j = 0, 1, 2, 3$$

Teremos:

$$
\begin{aligned}
f(x, y(x)) &= y'(x) \approx p_3(x) = \\
&\quad L_{-3}(x) f_{n-3} + L_{-2}(x) f_{n-2} + L_{-1}(x) f_{n-1} + L_0(x) f_n \\
L_{-3}(x) &= [(x - x_{n-2})(x - x_{n-1})(x - x_n)]/(-h)(-2h)(-3h) \\
&= \frac{-1}{6h^3}[(x - x_{n-2})(x - x_{n-1})(x - x_n)] \\
L_{-2}(x) &= \frac{1}{2h^3}[(x - x_{n-3})(x - x_{n-1})(x - x_n)] \\
L_{-1}(x) &= \frac{1}{2h^3}[(x - x_{n-3})(x - x_{n-2})(x - x_n)] \\
L_0(x) &= \frac{1}{6h^3}[(x - x_{n-3})(x - x_{n-2})(x - x_{n-1})]
\end{aligned}
$$

Fazendo:

$$\frac{x - x_n}{h} = s \Rightarrow \mathrm{d}x = h\,\mathrm{d}s \text{ e } x = hs + x_n$$

$$(x - x_{n-3}) = (s+3)h \qquad (x - x_{n-2}) = (s+2)h$$

$$(x - x_{n-1}) = (s+1)h \qquad (x - x_n) = sh$$

Então:

$$\begin{aligned}
L_{-3}(s) &= -\frac{s^3 + 3s^2 + 2s}{6} \\
L_{-2}(s) &= \frac{s^3 + 4s^2 + 3s}{2} \\
L_{-1}(s) &= -\frac{s^3 + 5s^2 + 6s}{2} \\
L_0(s) &= \frac{s^3 + 6s^2 + 11s + 6}{6}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\int_{x_n}^{x_n+1} f(x, y(x))\,\mathrm{d}x &\approx \int_{x_n}^{x_n+1} p_3(x)\,\mathrm{d}x \\
&= -\frac{n}{6} f_{n-3} \int_0^1 (s^3 + 3s^2 + 2s)\,\mathrm{d}s + \cdots \\
&= -\frac{9h}{24} f_{n-3} + \frac{37h}{24} f_{n-2} - \frac{59h}{24} f_{n-1} + \frac{55h}{24}
\end{aligned}
$$

$$
y_{n+1} \approx y_n + \frac{h}{24}\left[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}\right]
$$

- Esse é o método passo múltiplo explícito, pois, para o calculo de y_{n+1}, usamos y_n, y_{n-1}, y_{n-2} e y_{n-3}
- y_{n+1} tem forma explícita em função dos outros y_k , $k = n-1, n-2, n-3$:

$$\begin{aligned}
k = 2 \quad &: \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[3f_n - f_{n-1}] \\
k = 3 \quad &: \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] \\
k = 4 \quad &: \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \\
k = 5 \quad &: \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}[1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} \\
&\quad -1274f_{n-3} + 251f_{n-4}]
\end{aligned}$$

Roteiro

Métodos Implícitos (Adams - Moulton)

- Usamos o ponto $n+1$ também: $n+1, n, n-1, \cdots, n-m$
- Se $m=2$, então os pontos a considerar são:

$(x_{n+1}, y_{n+1}), (x_n, y_n), (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_{n-2}, y_{n-2})$

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_3(x)\,\mathrm{d}x \\
&= y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} \left[L_{-2}(x) f_{n-2} + L_{-1}(x) f_{n-1} + L_0(x) f_n + L_1(x) f_{n+1}\right] \mathrm{d}x \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{24}\left[9 f_{n+1} + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}\right]
\end{aligned}
$$

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

2ª ordem: $$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_{n+1} + f_n]$$

3ª ordem: $$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}]$$

4ª ordem: $$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}[9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}]$$

5ª ordem: $$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}[251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3}]$$

Roteiro

Métodos de Previsão-Correção

- Para $m = 2$ (Adams - Moulton):

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

(a) por meio de um método explícito encontramos uma 1ª aproximação, $y_{n+1}^{(0)}$ para y_{n+1}

(b) calculamos então para f_{n+1} , o valor $f(x_{n+1}, y_{n+1})$

(c) com o valor de f_{n+1} obtida em (b) encontramos uma próxima aproximação para y_{n+1}, $y_{n+1}^{(1)}$ usando agora o método implícito.

(d) voltamos para (b), onde agora calculamos, para $f_{n+1}, f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(1)})$ e assim vamos repetindo o processo até que duas aproximações sucessivas sejam tais que

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

- Exemplo:

$$y' = -y^2 = f(x,y)\,, \quad y(1) = 1\,, \quad \epsilon = 10^{-4}$$

- Sabendo que a solução é $y(x) = 1/x$ vamos usá-la para calcular y_1, y_2, y_3 para usar o previsor-corretor do algoritmo: (No caso normal faríamos por Runge Kutta de 4a ordem)
- Tomamos $h = 0.1$:

$$\begin{aligned} y_0 &= 1 \\ y_1 &= \frac{1}{1.1} = 0.9090909 \\ y_2 &= \frac{1}{1.2} = 0.8333333 \\ y_3 &= \frac{1}{1.3} = 0.7692307 \end{aligned}$$

- Agora $f(x,y) = -y^2$, chamando $f_k = f(x_k, y_k)$:

$$
\begin{aligned}
y_0 &= 1 & \rightarrow \quad f_0 &= -1 \\
y_1 &= 0.9090909 & \rightarrow \quad f_1 &= -0.8264462 \\
y_2 &= 0.8333333 & \rightarrow \quad f_2 &= -0.6944443 \\
y_3 &= 0.7692307 & \rightarrow \quad f_3 &= -0.5917158
\end{aligned}
$$

Então temos

$$
\begin{aligned}
y_4^{(0)} &= y_3 + \frac{h}{24}[55f_3 - 59f_2 + 37f_1 - 9f_0] \\
&= 0.7692307 + \frac{0.1}{24}[55(-0.5917158) - 59(-0.6944443) \\
&\quad +37(-0.8264462) - 9(-1)] \\
&= 0.7144362 \\
f_4^{(0)} &= f(x_4, y_4^{(0)}) = -(y_4^{(0)})2 = -0.510419
\end{aligned}
$$

- Vamos usar o corretor:

$$
\begin{aligned}
y_4^{(1)} &= y + \frac{h}{24}[9f_4^{(0)} + 19f_3 - 5f_2 + f_1] \\
&= 0.7692307 + \frac{0.1}{24}[9(-0.510419) + 19(-0.5917158) \\
&\quad -5(-0.6944443) - 0.8264462] \\
y_4^{(1)} &= 0.7142698 \\
f_4^{(1)} &= f(x_4, y_4^{(1)}) = -(y_4^{(1)})2 = -0.5101814 \\
y_4^{(2)} &= y_3 + \frac{0.1}{24}[9f_4^{(1)} + 19f_3 - 5f_2 + f_1] \\
&= 0.7142787
\end{aligned}
$$

$$\frac{|y_4^{(2)} - y_4^{(1)}|}{|y_4^{(2)}|} = 1.2591374 \times 10^{-5} < \epsilon$$

$$y_4 = y_4^{(2)} = 0.7142787$$

Com y_4 calculamos $f(x_4, y_4)$ e voltamos ao uso do previsor para calcular $y_5^{(0)}$.

- Algumas questões:
  - Sob que condições temos garantia que $\{y_{n+1}^{(k)}\} \rightarrow y_{n+1}$?
  - Quantas iterações do corretor serão necessárias para atingir a convergência na precisão ϵ desejada ?

Teorema

Se $f(x,y)$ e $\partial f/\partial y$ são contínuas em x e y em todo intervalo $[a,b]$, as iterações do método corretor vão convergir, desde que h seja escolhido de tal forma que, para $x = x_n$ e todo y com $|y - y_{n+1}| \leq |y^{(0)}_{n+1} - y_{n+1}|$, $h|\frac{\partial f}{\partial y}| < 2$.

- Se o par previsor-corretor é da mesma ordem, apenas uma ou duas iterações do corretor serão necessárias para atingirmos a convergência, desde que h seja convenientemente escolhido.

- Exemplo (problema anterior):
- Seja o P.V.I.

$$y' = -y^2\,, \quad f(x,y) = -y^2\,, \quad \epsilon = 10^{-4}$$

- Observe que $\partial f/\partial y = -2y$. Então, pelo teorema, h tal que

$$2|y|h < 2 \Leftrightarrow h < \frac{1}{|y|}$$

garante a convergência.
- Como por exemplo $h = 0.1$ tomado no problema.