MAP3122: Métodos numéricos e aplicações

Quadrimestral 2022

Antoine Laurain

Métodos para Equações Diferenciais Ordinárias (EDO)

Teoria dos Problemas de Valor Inicial

Seja (t_0, y_0) um ponto de um aberto D de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ e uma solução $y : I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ de $y'(t) = f(t, y(t))$, onde $f : \Omega \subset D \to \mathbb{R}$ com Ω aberto. Se $t_0 \in I$ e também $y(t_0) = y_0$, dizemos que esta solução satisfaz a condição inicial ou então o problema de valor inicial

$$\text{(PVI):} \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \\ y(t_0) = y_0. \end{cases}$$

Motivação: Considere o PVI

$$\begin{cases} y'(t) = \sin(t^2 y(t) + \pi), \\ y(0) = 1. \end{cases} \tag{1}$$

Observe que a eq. (1) é não linear em y e não pode ser resolvida de maneira explícita, isto é, não é homogênea, separável ou exata. Neste caso, precisamos de um método numérico para aproximar a solução $y(t)$. O objetivo é determinar uma aproximação em um conjunto de pontos finitos

$$t_k = a + kh, \text{ com } h = \frac{b-a}{n}, \text{ para } t_0 = a \text{ e } t_n = b.$$

Para tanto, o primeiro passo que devemos seguir é o de mostrar a existência e unicidade da solução para o (PVI). Mais a frente veremos que isto terá uma grande importância para a aproximação numérica também.

Condição de Lipschitz

Definição: Diz-se que $f(t, y)$ satisfaz uma condição de Lipschitz na variável y em $D \subset \mathbb{R}^2$ se existe um $L > 0$ com

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leqslant L|y_1 - y_2|$$

sempre que $(t, y_1), (t, y_2) \in D$. A constante L chama-se constante de Lipschitz.

Exemplo: Seja $D = [1, 2] \times [-3, 4]$ e pontos $(t, y_1), (t, y_2) \in D$. Se $f : D \to \mathbb{R}$ é uma função definida como $f(t, y) = t|y|$ então

$$\begin{aligned} |f(t, y_1) - f(t, y_2)| &= |\, t|y_1| - t|y_2|\, | \\ &= |t|\, |\, |y_1| - |y_2|\, | \leqslant 2|y_1 - y_2|. \end{aligned}$$

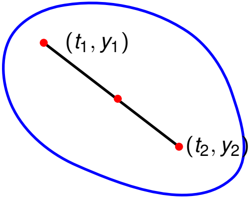
Logo, f satisfaz uma condição de Lischitz em D com a constante $L = 2$. O menor valor possível de L é 2, uma vez que

$$|f(2, 1) - f(2, 0)| = |2 - 0| = 2|1 - 0| = 2.$$

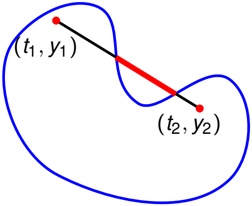
Condição de Lipschitz

Definição: Diz-se que um subconjunto $D \subset \mathbb{R}^2$ é convexo se, e somente se, para qualquer par de pontos $(t_1, y_1), (t_2, y_2) \in D$ o seguimento de reta que une estes pontos está inteiramente contido em D. Isto é, se todos os pontos do tipo

$$((1-\lambda)t_1 + \lambda t_2, (1-\lambda)y_1 + \lambda y_2) \in D, \quad \forall \lambda \in [0,1].$$



Convexo



Não Convexo

Teorema: Seja $f(t,y)$ definida em $D \subset \mathbb{R}^2$, com D convexo. Se existe um $L > 0$ com

$$\left| \frac{\partial f}{\partial y}(t,y) \right| \leqslant L, \quad \forall (t,y) \in D$$

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

Observação: Em geral é mais fácil verificar $\left| \frac{\partial f}{\partial y}(t,y) \right| \leqslant L$ do que verificar que f é Lipschitz diretamente. Atenção ao utilizar este critério, pois f pode ser Lipschitz, sem que $\left| \frac{\partial f}{\partial y}(t,y) \right| \leqslant L$.

Teorema (Picard-Lindelöf ou Cauchy-Lipschitz): Seja $D = \{(t, y) \mid a \leqslant t \leqslant b, -\infty \leqslant y \leqslant \infty\}$ e $f : D \to \mathbb{R}$ contínua. Se f satisfaz uma condição de Lipschitz em D na variável y, então o (PVI)

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y), \quad a \leqslant t \leqslant b \\ y(a) = \alpha, \end{cases}$$

tem uma solução única $y(t)$ para $a \leqslant t \leqslant b$.

Exemplo:

$$(PVI) : \begin{cases} y'(t) = 1 + t\sin(ty), \quad 0 \leqslant t \leqslant 2 \\ y(0) = 0, \end{cases}$$

Aplicamos o teorema do valor intermediário com $f(t, y) = 1 + t\sin(ty)$ e para $y_1 \leqslant y_2$, então existe um $\xi \in (y_1, y_2)$ com

$$\begin{aligned} \frac{f(t, y_2) - f(t, y_1)}{y_2 - y_1} &= \frac{\partial}{\partial y} f(t, \xi) = t^2 \cos(\xi t) \\ &\implies |f(t, y_2) - f(t, y_1)| = |y_2 - y_1| \cdot |t^2 \cos(\xi t)| \leqslant 4|y_2 - y_1|. \end{aligned}$$

Podemos concluir da desigualdade acima que f é contínua em D e f é Lipschitz com constante $L = 4$. O Teorema de Picard-Lindelöf permite-nos concluir que o (PVI) tem solução única.

Método de Euler

Sejam $t_i = a + ih,\ i = 0, 1, 2, \ldots, N$ e $h = \frac{b-a}{N}$ o tamanho do passo e considere o

$$(PVI) : \begin{cases} y'(t) = f(t, y) & t \in [a, b], \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

A ideia fundamental para definir métodos numéricos para resolver um (PVI) é o uso do Teorema de Taylor. Suponha que o (PVI) tem uma solução única $y(t)$ e que $y'(t), y''(t)$ são contínuas em $[a, b]$. Então o Teorema de Taylor fornece a expansão

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + (t_{i+1} - t_i)y'(t_i) + \frac{(t_{i+1} - t_i)^2}{2} y''(\xi_i) \quad \forall i = 0, 1, 2, \ldots, N-1,$$

para algum $\xi_i \in (t_i, t_{i+1})$. Como $h = t_{i+1} - t_i$, então

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\,y'(t_i) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_i) \quad \forall i = 0, 1, 2, \ldots, N-1.$$

O fato de $y(t)$ satisfazer o (PVI) implica em

$$y'(t_i) = f(t_i, y_i) \quad \forall i = 0, 1, 2, \ldots, N-1,$$

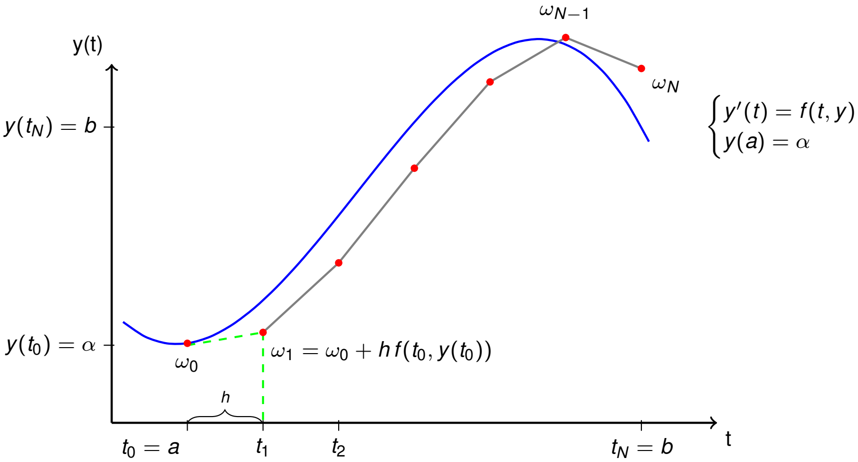
$$\implies y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\,f(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_i) \quad \forall i = 0, 1, 2, \ldots, N-1.$$

O método de Euler constrói uma aproximação $\omega_i \approx y(t_i)$ para cada $i = 1, 2, \ldots, N$ que satisfaz

$$\begin{cases} \omega_{i+1} = \omega_i + h\,f(t_i, \omega_i), \quad \forall i = 0, 1, 2, \ldots, N-1, \\ \omega_0 = \alpha \end{cases}$$

Observação: A variável ω_{i+1} satisfaz a mesma equação que $y(t_{i+1})$ mas sem o termo de ordem superior $\frac{h^2}{2}\, y''(\xi_i)$.

Interpretação Geométrica:



Erro do método de Euler

Lema 1: Dado $x \geqslant -1$ e m um número real positivo, temos $0 \leqslant (1+x)^m \leqslant e^{mx}$.
Ideia da demonstração: Utilizar o teorema de Taylor aplicado à função $f(x) = e^x$.

Lema 2: Sejam $s > 0, t > 0$ e $\{a_i\}_{i=0}^{k}$ uma sequência, tal que $a_0 \geq -\frac{t}{s}$ e $a_{i+1} \leqslant (1+s)a_i + t, \quad \forall i = 0, 1, 2, \ldots, k$, então

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

Teorema: Suponhamos f contínua e Lipschitz (com a constante de Lipschitz L) em $D = \{(t, y) \mid a \leqslant t \leqslant b, -\infty \leqslant y \leqslant \infty\}$ e que exista um M com $|y''(t)| \leqslant M$ para todo $t \in [a, b]$. Seja $y(t)$ a única solução do (PVI)

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y), \quad a \leqslant t \leqslant b \\ y(a) = \alpha \end{cases}$$

e sejam $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_N$ as aproximações geradas pelo método de Euler para algum N inteiro positivo. Então, $\forall i = 0, 1, \ldots, N$

$$|y(t_i) - \omega_i| \leqslant \frac{hM}{2L}[e^{L(t_i - a)} - 1],$$

onde $h = \frac{b-a}{N}$.

Demonstração: Para $i = 0$ a demonstração é trivial, uma vez que $y(t_0) = \omega_0 = \alpha$. Nos casos em que $i = 1, 2, \ldots, N$ temos

$$\begin{cases} y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\, f(t, y(t_i)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_i) \\ \omega_{i+1} = \omega_i + h\, f(t_i, \omega_i) \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \quad |y_{i+1} - \omega_{i+1}| \leqslant |y_i - \omega_i| + h \underbrace{|f(t_i, y_i) - f(t_i, w_i)|}_{\substack{\leqslant L|y_i - \omega_i| \\ \text{condição de Lipschitz}}} + \underbrace{\frac{h^2}{2} |y''(\xi_i)|}_{\leqslant M}.$$

Usando o Lema 2 acima com $s = h\,L$, $t = \frac{h^2 M}{2}$ e $a_{i+1} = |y_{i+1} - \omega_{i+1}|$, $\forall i = 0, 1, \ldots, N$, resulta

$$|y_{i+1} - \omega_{i+1}| \leqslant e^{(i+1)hL} \left(|y_0 - \omega_0| + \frac{h^2 M}{2h\,L} \right) - \frac{h^2\, M}{2h\,L}.$$

Como $|y_0 - \omega_0| = 0$ e

$$(i+1)h = t_{i+1} - t_0 = t_{i+1} - a$$

temos

$$|y_{i+1} - \omega_{i+1}| \leqslant \frac{hM}{2L} \left[e^{(t_{i+1} - a)L} - 1 \right], \quad \forall i = 0, 1, \ldots, N-1.$$

Exemplo: Considere o

$$(PVI)\ \begin{cases} y' = y - t^2 + 1, \quad 0 \leqslant t \leqslant 2 \\ y(0) = 0.5 \end{cases}.$$

Então,

$$f(t, y) = y - t^2 + 1 \implies \frac{\partial f}{\partial y} = 1 \implies L = 1.$$

A solução exata do (PVI) é dada por $y(t) = (t+1)^2 - \frac{e^t}{2}$, de modo que $y''(t) = 2.0 - \frac{e^t}{2}$.
Portanto,

$$|y''(t)| \leqslant 0.5e^2 - 2, \quad \forall t \in [0, 2].$$

Neste caso, temos $h = 0.2$, $L = 1$ e $M = 0.5e^2 - 2$. Aplicando o teorema anterior, resulta

$$|y_i - \omega_i| \leqslant 0.1(0.5e^2 - 2)(e^{t_i} - 1).$$

Observação: O ponto fraco do teorema anterior é a condição $|y''(t)| \leqslant M$, pois precisamos encontrar a solução exata $y(t)$ para poder calcular M. Observe que

$$\begin{aligned} y''(t) &= \frac{dy'(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left(f(t, y(t))\right) \\ &= [\partial_t f]\,(t, y(t)) + y'(t)\,[\partial_y f]\,(t, y(t)) \\ &= [\partial_t f]\,(t, y(t)) + f(t, y(t))\,[\partial_y f]\,(t, y(t)). \end{aligned}$$

As vezes é possível obter uma estimativa dessa expressão sem conhecer $y(t)$, assim podemos calcular M.

Métodos de ordem superior (Métodos de Taylor)

Definição: O método numérico

$$\begin{cases} \omega_{i+1} = \omega_i + h\phi(t_i, \omega_i), & \forall i = 0, 1, \ldots, N-1 \\ \omega_0 = \alpha \end{cases}$$

possui um erro local de truncamento dado por

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{y_{i+1} - (y_i + h\phi(t_i, y_i))}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \phi(t_i, y_i), \quad \forall i = 0, 1, \ldots, N-1,$$

onde $y_i = y(t_i)$ e y é a solução exata do (PVI):

$$\begin{cases} y' = f(t, y), & a \leqslant t \leqslant b \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

- Cada τ_i representa um erro local, que mede a precisão do método em um passo, a partir da solução exata $y(t_i)$ no passo anterior.
- Vemos que para o método de Euler teremos $\tau_{i+1}(h) = \frac{h}{2}y''(\xi_i)$ para algum $\xi_i \in (t_i, t_{i+1})$. Assim, quando $||y''(t)|| \leqslant M$ em $[a, b]$, resulta $|\tau_{i+1}(h)| \leqslant \frac{Mh}{2}$. Portanto, o erro local de truncamento para o Método de Euler é $\mathcal{O}(h)$.
- A notação $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^p)$ quer dizer "$\tau_i(h)$ é da ordem h^p, quando $h \to 0$".

Métodos de ordem superior (Métodos de Taylor)

Uma maneira de definir um método numérico para resolver um (PVI) é encontrar um método tal que o erro local de truncamento seja $\mathcal{O}(h^p)$ com p o maior possível. Desta forma, podemos usar a expressão de Taylor para

$$\begin{cases} y' = f(t, y), \quad a \leqslant t \leqslant b \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

Assim, supondo que y tenha $(n+1)$ derivadas contínuas, temos

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!}y''(t_i) + \cdots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(t_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}y^{(n+1)}(\xi_i)$$

para algum $\xi_i \in (t_i, t_{i+1})$. Como $y'(t) = f(t, y(t))$, temos $y^{(k)}(t) = \frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}}\left(f(t, y(t))\right)$.

Notação: Usaremos a notação

$$D^k f(t_i, y(t_i)) = \frac{d^k}{dt^k}\left(f(t, y(t))\right)\bigg|_{t=t_i}.$$

Cuidado que $D^k f(t_i, y(t_i))$ não é a mesma coisa que a $k-$ésima derivada parcial de f com respeito a t em $(t_i, y(t_i))$. Para calcular $D^k f(t_i, y(t_i))$ explicitamente tem que usar k vezes a regra da cadeia.

Métodos de ordem superior (Métodos de Taylor)

Desta forma podemos definir o método de Taylor de ordem n como

$$\begin{cases} \omega_0 = \alpha \\ \omega_{i+1} = \omega_i + hT^{(n)}(t_i, \omega_i), \quad i = 0, 1, \ldots, N-1. \end{cases}$$

onde $T^{(n)}(t_i, \omega_i) = f(t_i, \omega_i) + \frac{h}{2} Df(t_i, \omega_i) + \frac{h^2}{3!} D^2 f(t_i, \omega_i) + \cdots + \frac{h^{n-1}}{n!} D^{n-1} f(t_i, \omega_i)$.

Observação: A função $T^{(n)}(t_i, \omega_i)$ corresponde aos termos da expansão de Taylor seguinte:

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!} y''(t_i) + \cdots + \frac{h^n}{n!} y^{(n)}(t_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} y^{(n+1)}(\xi_i)$$

Note que o método de Euler corresponde ao método de Taylor de ordem 1.

Métodos de Runge-Kutta

A principal desvantagem dos métodos de Taylor está na necessidade de calcular os termos $D^k f$ que, em geral, corresponde a um procedimento lento e complicado, pois precisa aplicar k vezes a regra da cadeia. Os métodos de Runge-Kutta possuem alta ordem também, mas permitem se prescindir dos cálculos e das avaliações das derivadas de f.

Um método pertence as classes dos métodos de Runge-Kutta se:

1. for um método de passo simples explícito,
2. substituir as derivadas de $f(t, y(t))$ por cálculos de $f(t, y)$,
3. concordar com o método de Taylor até a ordem p.

Exemplo: O Método de Euler modificado (ou Método do ponto médio) é um método de Runge-kutta.

$$\begin{cases} \omega_{i+1} = \omega_i + h\phi(t_i, \omega_i, h) \\ \omega_0 = \alpha \end{cases}$$

onde $t_{i+1} = t_i + h$, $h = \frac{b-a}{n}$, $0 \leqslant k \leqslant n-1$ e

$$\phi(t_i, \omega_i, h) = f(t_i + \frac{h}{2}, \omega_i + \frac{h}{2} f(t_i, \omega_i)).$$

Observe que:

- este método é de passo único
- não tem cálculos de derivadas de f.

Vamos mostrar que o método concorda com o método de Taylor até a segunda ordem.

$$f(t_i + \Delta t, \omega_i + \Delta\omega) = f(t_i, \omega_i) + \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, \omega_i) & \frac{\partial f}{\partial y}(t_i, \omega_i) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta t \\ \Delta\omega \end{bmatrix} + \mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta\omega^2)$$

onde $\Delta t = \frac{h}{2}$, $\Delta\omega = \frac{h}{2} f_i$ e $f_i = f(t_i, \omega_i)$. Usando a notação $\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, \omega_i)$ obtemos

$$\phi(t_i, \omega_i, h) = f_i + \frac{h}{2} \underbrace{\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + f_i \frac{\partial f_i}{\partial y} \right)}_{= Df(t_i, \omega_i)} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\Longrightarrow \quad \omega_{i+1} = \omega_i + \underbrace{hf_i + \frac{h^2}{2} Df(t_i, \omega_i)}_{\text{Série de Taylor de ordem 2.}} + \mathcal{O}(h^3).$$

Assim o método de Euler modificado é um método de Runge-Kutta de ordem 2.

Caso geral: O método de Runge-Kutta de R estágio tem a forma geral

$$\begin{cases} \omega_0 = \alpha \\ \omega_{i+1} = \omega_i + h\phi(t_i, \omega_i, h) \end{cases}$$

onde $\phi(t, \omega, h) = \sum_{p=1}^{R} C_p K_p(t, \omega)$ com cada termo K_p calculado da seguinte forma

$$\begin{cases} K_1(t, \omega) = f(t, \omega) \\ K_2(t, \omega) = f(t + ha_2, \omega + hb_{21} K_1) \\ K_3(t, \omega) = f(t + ha_3, \omega + hb_{31} K_1 + hb_{32} K_2) \\ \qquad \vdots \\ K_p(t, \omega) = f(t + ha_p, \omega + h \sum_{q=1}^{p-1} b_{pq} K_q) \quad \text{para } 2 \leqslant p \leqslant R. \end{cases}$$

Exemplos:

1) Método de Euler: Para

$$\omega_{i+1} = \omega_i + hf(t_i, \omega_i)$$

obtemos $R = 1$, $C_1 = 1$, $K_1(t, \omega) = f(t, \omega)$.

2) Método de Euler modificado (ponto médio): Se

$$\phi(t, \omega, h) = f(t + \frac{h}{2}, \omega + \frac{h}{2} f(t, \omega))$$

então $C_1 = 0$, $C_2 = 1$, $a_2 = \frac{1}{2}$, $b_{21} = \frac{1}{2}$ e $C_1 + C_2 = 1$. Portanto, é um método de Runge-Kutta.

3) Método de Heun: Dado

$$\begin{cases} \omega_{i+1} = \omega_i + h\phi(t_i, \omega_i, h) \\ \omega_0 = \alpha \end{cases}$$

onde $\phi(t_i, \omega_i, h) = C_1 K_1 + C_2 K_2$ com $C_1 = \frac{1}{4}$, $C_2 = \frac{3}{4}$, $K_1 = f(t_i, \omega_i)$ e $K_2 = f(t_i + \frac{2}{3}h, \omega_i + \frac{2}{3}hK_1)$.
O método de Heun é de ordem 2. Isto é, se

$$f(t + \frac{2}{3}h, \omega + \frac{2}{3}hK_1) = f(t, \omega) + \frac{2}{3}h\partial_t f + \frac{2}{3}hK_1\partial_y f + \mathcal{O}(h^2)$$

então

$$\begin{aligned} \phi(t, \omega, h) &= f(t, \omega) + \frac{3}{4}\frac{2}{3}h\partial_t f + \frac{3}{4}\frac{2}{3}hK_1\partial_y f + \mathcal{O}(h^2) \\ &= \underbrace{f(t, \omega) + \frac{h}{2}(\underbrace{\partial_t f + f\partial_y f}_{Df(t,\omega)})}_{\text{Método de Taylor de ordem 2}} + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

Método de Runge-Kutta de ordem quatro (RK4) ou (RK44[1]) Este método pode ser descrito da seguinte forma

$$\begin{cases} \omega_0 = \alpha \\ \omega_{i+1} = \omega_i + h\phi(t_i, \omega_i, h) \end{cases}$$

para $\phi(t_i, \omega_i, h) = \sum_{p=1}^{4} C_p K_p$ com

$$\begin{aligned}
K_1 &= f(t_i, \omega_i) & \text{e} \quad C_1 &= \tfrac{1}{6}, \\
K_2 &= f(t_i + \tfrac{h}{2}, \omega_i + \tfrac{h}{2}K_1) & \text{e} \quad C_2 &= \tfrac{1}{3}, \\
K_3 &= f(t_i + \tfrac{h}{2}, \omega_i + \tfrac{h}{2}K_3) & \text{e} \quad C_3 &= \tfrac{1}{3}, \\
K_4 &= f(t_i + h, \omega_i + hK_3) & \text{e} \quad C_4 &= \tfrac{1}{6}.
\end{aligned}$$

Observação: Este método tem o erro de truncamento local de $\mathcal{O}(h^4)$ sempre que a solução $y(t)$ de um (PVI) tiver ao menos cinco derivadas contínuas.

[1] RK44 significa número de estágios é R=4 e p=4 representa a ordem do método, i.e., o erro local de truncamento é de ordem p ou coincide com o método de Taylor até a ordem p.

Convergência global

Erro local de truncamento

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{y_{i+1} - (y_i + h\phi(t_i, y_i))}{h}$$

Definição: Dizemos que um método de equações de diferenças de um passo com erro local de truncamento $\tau_i(h)$ no i-ésimo passo é consistente com a equação diferencial que aproxima se

$$\lim_{h \to 0} \max_{1 \leqslant i \leqslant N} |\tau_i(h)| = 0.$$

Observações:

- Note que a definição de $\tau_i(h)$ é local.
- Um meio mais realista de analisar os efeitos de fazer $h \to 0$ é determinar o comportamento do erro global da solução.

Definição: Um método de um passo é convergente em relação a equação diferencial que se aproxima se

$$\lim_{h \to 0} \max_{1 \leqslant i \leqslant N} |\omega_i - y(t_i)| = 0$$

onde $y_i = y(t_i)$ denota o valor exato da solução e ω_i é a aproximação obtida a partir do método numérico.

Convergência global

Exemplo: Mostramos no caso do método de Euler que o erro global tem a estimativa (Teorema 8)

$$
\begin{aligned}
|y(t_i) - \omega_i| &\leqslant \frac{hM}{2L}\left[e^{L(t_i - a)} - 1\right] \\
&\leqslant \frac{hM}{2L}\left[e^{L(b-a)} - 1\right].
\end{aligned}
$$

Portanto,

$$
\lim_{h \to 0} \max_{1 \leqslant i \leqslant N} |\omega_i - y(t_i)| = 0.
$$

Assim, o método de Euler é convergente em relação à EDO e a razão de convergência é $\mathcal{O}(h)$.

Convergência global

Teorema: Suponha que o (PVI)

$$\begin{cases} y' = f(t,y) & a \leqslant t \leqslant b, \\ y(a) = \alpha, \end{cases}$$

seja aproximado por um método de diferenças de um passo na forma

$$\begin{cases} \omega_0 = \alpha \\ \omega_{i+1} = \omega_i + h\phi(t_i, \omega_i, h). \end{cases}$$

Suponha que existe um $h_0 > 0$ e que ϕ seja contínua e satisfaça uma condição de Lipschitz com respeito a ω com a constante L no conjunto

$$D = \{(t, \omega, h) \mid a \leqslant t \leqslant b, -\infty < \omega < \infty, 0 \leqslant h \leqslant h_0\}.$$

Então o método de diferenças é convergente se, e somente se, for consistente, o que equivale à função ϕ satisfazer

$$\phi(t, y, 0) = f(t, y), \quad \text{para todo } t \in [a, b].$$

Adicionalmente, se existir uma função τ tal que, para todos $i = 0, 1, \ldots, N$, o erro local de truncamento $\tau_i(h)$ satisfaz $|\tau_i(h)| \leqslant \tau(h)$ sempre que $0 \leqslant h \leqslant h_0$ então temos

$$|y(t_i) - \omega_i| \leqslant \frac{\tau(h)}{L} e^{L(t_i - a)}.$$

Exemplo: Consideramos o caso do método de Euler aproximado:

$$\omega_{i+1} = \omega_i + \underbrace{\frac{h}{2}\left[f(t_i, \omega_i) + f(t_{i+1}, \omega_i + hf(t_i, \omega_i))\right]}_{= h\phi(t_i, \omega_i, h)} \quad i = 0, 1, \ldots, N-1.$$

É fácil verificar que o método é consistente, verificando a condição do teorema acima, pois temos:

$$\phi(t, \omega, 0) = \frac{1}{2}\left[f(t, \omega) + f(t, \omega)\right] = f(t, \omega). \qquad \checkmark$$

Precisamos verificar também que a função ϕ é Lipschitz com respeito a ω. Supondo que f é Lipschitz com respeito a ω, obtemos:

$$\begin{aligned} |\phi(t, \omega_1, h) - \phi(t, \omega_2, h)| &\leqslant \frac{1}{2}|f(t, \omega_1) - f(t, \omega_2)| \\ &\quad + \frac{1}{2}|f(t+h, \omega_1 + hf(t, \omega_1)) - f(t+h, \omega_2 + hf(t, \omega_2))| \\ &\leqslant \frac{1}{2}L|\omega_1 - \omega_2| + \frac{1}{2}L|\omega_1 + hf(t, \omega_1) - \omega_2 - hf(t, \omega_2)| \\ &\leqslant L|\omega_1 - \omega_2| + \frac{L}{2}h|f(t, \omega_1) - f(t, \omega_2)| \\ &\leqslant \left(L + \frac{1}{2}hL^2\right)|\omega_1 - \omega_2|. \end{aligned}$$

Isso mostra que ϕ é Lipschitz com respeito a ω. Assim podemos aplicar o teorema e isso mostra que o método de Euler aproximado é convergente.

Convergência global

Uma outra maneira de mostrar que $\phi(t, \omega, h) = f(t, \omega) + f(t + h, \omega + hf(t, \omega))$ é Lipschitz com respeito a ω é de escrever, supondo que f é Lipschitz com respeito a ω:

$$\left|\frac{\partial \phi(t, \omega, h)}{\partial \omega}\right| = \left|\frac{\partial f}{\partial \omega}(t, \omega) + \frac{\partial f}{\partial \omega}(t + h, \omega + hf(t, \omega))\left(1 + h\frac{\partial f}{\partial \omega}(t, \omega)\right)\right|$$
$$\leqslant L + L(1 + hL) \leqslant 2L + hL^2. \qquad \checkmark$$

Isto demonstra que a função ϕ é Lipschitz com respeito a ω no conjunto

$$D = \{(t, \omega, h) \mid a \leqslant t \leqslant b, -\infty \leqslant \omega \leqslant \infty, 0 \leqslant h \leqslant h_0\}.$$

Equações de ordem superior e sistemas de equações diferenciais

- Nos capítulos anteriores estudamos métodos numéricos para resolver EDOs de primeira ordem (com apenas uma derivada na solução y) e consideramos apenas equações escalares (quer dizer que $y(t) \in \mathbb{R}$).
- Agora vamos estudar o caso de EDOs de ordem superior (com mais de uma derivada na solução y) e sistemas de EDOs (quer dizer que $y(t) \in \mathbb{R}^m$). Vamos ver que EDOs de ordem superior sempre podem ser escritas como sistemas de EDOs de primeira ordem.
- Um sistema de ordem m de problemas de valores iniciais de primeira ordem, pode ser expresso como

$$(SPVI) \begin{cases} \frac{du_1}{dt} = f_1(t, u_1, u_2, \ldots, u_m) \\ \frac{du_2}{dt} = f_2(t, u_1, u_2, \ldots, u_m) \\ \qquad \vdots \\ \frac{du_m}{dt} = f_m(t, u_1, u_2, \ldots, u_m) \end{cases} \qquad \text{para } a \leqslant t \leqslant b$$

$$\text{com as condições iniciais} \begin{cases} u_1(a) = \alpha_1 \\ u_2(a) = \alpha_2 \\ \qquad \vdots \\ u_m(a) = \alpha_m. \end{cases}$$

Existência de soluções

Definição: A função $f(t, u_1, u_2, \ldots, u_m)$ definida no conjunto

$$D = \{(t, u_1, \ldots, u_m) \mid a \leqslant t \leqslant b, -\infty < u_i < \infty, \forall i = 1, \ldots, m\}$$

satisfaz uma condição de Lipschitz em D nas variáveis $u_1, \ldots, u_m$, se existe $L > 0$ com

$$|f(t, u_1, \ldots, u_m) - f(t, z_1, \ldots, z_m)| \leqslant L \sum_{j=1}^{m} |u_j - z_j|,$$

para todo $(t, u_1 \ldots, u_m)$ e $(t, z_1, \ldots, z_m)$ em D.

Podemos mostrar, usando o teorema do valor médio, que se

$$\left| \frac{\partial f(t, u_1, \ldots, u_m)}{\partial u_i} \right| \leqslant L \quad \forall i = 1, 2, \ldots, m, \text{ e } \forall (t, u_1, \ldots, u_m) \in D,$$

então f satisfaz uma condição de Lipschitz em D nas variáveis $u_1, \ldots, u_m$, com constante L.

Teorema (Existência e unicidade):
Suponha $f_i(t, u_1, \ldots, u_m)$ contínua em D e Lipschitz em D nas variáveis $u_1, \ldots, u_m$, para todos $i = 1, 2, \ldots, m$, com

$$D = \{(t, u_1, \ldots, u_m) \mid a \leqslant t \leqslant b, -\infty < u_i < \infty, \forall i = 1, \ldots, m\}.$$

Então o (SPVI), junto as condições iniciais, tem uma única solução $u_1(t), u_2(t), \ldots, u_m(t)$ para $a \leqslant t \leqslant b$.

Métodos numéricos para (SPVI)

Recordação: O método de Runge-Kutta de ordem 4 (**RK4**) usado para resolver o

$$(PVI):\ \begin{cases} y' = f(t,y) & a \leqslant t \leqslant b \\ y(a) = \alpha \end{cases}$$

aproxima a solução $y : [a,b] \to \mathbb{R}$ usando $\omega_0 = \alpha$ e

$$\boxed{\omega_{i+1} = \omega_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \forall i = 0, 1, \ldots, N-1.}$$

Os termos são calculados na forma

$$\begin{aligned} k_1 &= h\,f(t_i, \omega_i) \\ k_2 &= h\,f(t_i + \frac{h}{2}, \omega_i + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= h\,f(t_i + \frac{h}{2}, \omega_i + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 &= h\,f(t_i + h, \omega_i + k_3). \end{aligned}$$

Métodos numéricos para (SPVI)

No caso de (SPVI), o método RK4 é exatamente o mesmo, mas todas as quantidades são *vetoriais* em vez de ser *escalares*. Dados $h = \frac{b-a}{N}$ e $t_i = a + i\,h \quad \forall i = 0, \ldots, N$, podemos escrever o (SPVI) na forma vetorial assim:

$$(PVI) : \begin{cases} u' = f(t, u) & a \leqslant t \leqslant b \\ u(a) = \alpha \end{cases}$$

onde $u = (u_1, u_2, \ldots, u_m)$, $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_m)$ e cada $u_i : [a, b] \to \mathbb{R}$ é uma função escalar. Aproximamos $u : [a, b] \to \mathbb{R}^m$ usando $\omega_0 = \alpha$ e

$$\boxed{\omega_{i+1} = \omega_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \forall i = 0, 1, \ldots, N-1.}$$

Observe que $\omega_i \in \mathbb{R}^m$ é um vetor. Os termos são calculados na forma

$$\begin{aligned} k_1 &= h\,f(t_i, \omega_i) \\ k_2 &= h\,f(t_i + \frac{h}{2}, \omega_i + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= h\,f(t_i + \frac{h}{2}, \omega_i + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 &= h\,f(t_i + h, \omega_i + k_3). \end{aligned}$$

Precisamos tomar cuidado que cada k_1, k_2, k_3, k_4 é um vetor de $\mathbb{R}^m$, e a função $f : \mathbb{R}^{m+1} \to \mathbb{R}^m$ é uma função com valores vetoriais.

Seja $\omega_i = (\omega_{1i}, \omega_{2i}, \dots, \omega_{mi})$, isto é ω_{ji} é a aproximação de $u_j(t_i)$ para $j = 1, \dots, m$, com

$$\begin{cases} \omega_{1,0} & = \alpha_1 \\ \omega_{2,0} & = \alpha_2 \\ \vdots & \\ \omega_{m,0} & = \alpha_m. \end{cases}$$

Suponha que tenham sido calculados ω_{ji}, $j = 1, \dots, m$. Usando o método RK4, obtemos $\omega_{j,i+1}$, $j = 1, \dots, m$ calculando

$$\begin{cases} k_{1,j} = h\, f_j(t_i, \omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \dots, \omega_{m,i}) & \forall j = 1, 2, \dots, m. \\ k_{2,j} = h\, f_j(t_i + \frac{h}{2}, \omega_{1,i} + \frac{1}{2} k_{1,1}, \omega_{2,i} + \frac{1}{2} k_{1,2}, \dots, \omega_{m,i} + \frac{1}{2} k_{1,m}) & \forall j = 1, 2, \dots, m. \\ k_{3,j} = h\, f_j(t_i + \frac{h}{2}, \omega_{1,i} + \frac{1}{2} k_{2,1}, \omega_{2,i} + \frac{1}{2} k_{2,2}, \dots, \omega_{m,i} + \frac{1}{2} k_{2,m}) & \forall j = 1, 2, \dots, m. \\ k_{4,j} = h\, f_j(t_i + h, \omega_{1,i} + k_{3,1}, \omega_{2,i} + k_{3,2}, \dots, \omega_{m,i} + k_{3,m}) & \forall j = 1, 2, \dots, m. \end{cases}$$

e

$$\omega_{j,i+1} = \omega_{j,i} + \frac{1}{6}(k_{1,j} + 2k_{2,j} + 2k_{3,j} + k_{4,j}) \quad \forall j = 1, \dots, m.$$

Equações de ordem superior

- Muitas EDOs importantes têm ordem maior que um. Isto é, incluem derivadas de ordem 2 ou mais. Esses problemas são do tipo

$$y^{(m)}(t) = f(t, y, y', \ldots, y^{(m-1)}) \quad a \leqslant t \leqslant b.$$

- Podemos converter este tipo de problema em um sistema de EDO's usando

$$\begin{cases} u_1(t) = y(t) \\ u_2(t) = y'(t) \\ \qquad \vdots \\ u_m(t) = y^{(m-1)}(t). \end{cases}$$

- Isso produz um sistema de primeira ordem para $u = (u_1, u_2, \ldots, u_m)$:

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} &= \frac{dy}{dt} = u_2 \\ \frac{du_2}{dt} &= \frac{dy'}{dt} = u_3 \\ \quad \vdots & \qquad \vdots \\ \frac{du_{m-1}}{dt} &= \frac{dy^{(m-2)}}{dt} = u_m \\ \frac{du_m}{dt} &= \frac{dy^{(m-1)}}{dt} = y^{(m)} \\ &= f(t, y, y', \ldots, y^{(m-1)}) = f(t, u_1, \ldots, u_m), \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_1(a) = y(a) = \alpha_1 \\ u_2(a) = y'(a) = \alpha_2 \\ \qquad \vdots \\ u_m(a) = y^{(m-1)}(a) = \alpha_m. \end{cases}$$

Exemplo: Considere o (PVI) de segunda ordem

$$\begin{cases} y''(t) - 2y'(t) + 2y(t) = e^{2t}\sin(t) \quad 0 \leqslant t \leqslant 1, \\ \text{sujeito as condições } y(0) = -0.4 \text{ e } y'(0) = -0.6 \ . \end{cases}$$

Definindo $\begin{cases} u_1(t) = y(t) \\ u_2(t) = y'(t) \end{cases}$ transformamos essa equação no sistema

$$\begin{cases} u_1'(t) = u_2(t) = f_1(t, u_1, u_2) \\ u_2'(t) = e^{2t}\sin(t) - 2u_1(t) + 2u_2(t) = f_2(t, u_1, u_2) \end{cases} \quad \text{sujeito à} \begin{cases} u_1(0) = -0.4, \\ u_2(0) = -0.6 \ . \end{cases}$$

Usamos o método RK4, com $h = 0.1$ (e $i = 0$) com as condições iniciais $\begin{cases} \omega_{1,0} = -0.4 \\ \omega_{2,0} = -0.6 \end{cases}$

Calculamos os termos $k_{i,j}$ para $i = 1, \ldots, 4$ e $j = 1, 2$ da seguinte forma

$$\begin{cases} k_{1,1} &= h\, f_1(t_0, \omega_{1,0}, \omega_{2,0}) = h\omega_{2,0} = -0.06, \\ k_{1,2} &= h\, f_2(t_0, \omega_{1,0}, \omega_{2,0}) = h\left[e^{2t_0}\sin(t_0) - 2\omega_{1,0} + 2\omega_{2,0}\right] = -0.04, \\ \\ k_{2,1} &= h\, f_1(t_0 + \frac{h}{2}, \omega_{1,0} + \frac{k_{1,1}}{2}, \omega_{2,0} + \frac{k_{1,2}}{2}) = h(\omega_{2,0} + \frac{k_{1,2}}{2}) = -0.062, \\ k_{2,2} &= h\, f_2(t_0 + \frac{h}{2}, \omega_{1,0} + \frac{k_{1,1}}{2}, \omega_{2,0} + \frac{k_{1,2}}{2}) \\ &= h\,[e^{t_0+0.05}\sin(t_0 + 0.05) - 2(\omega_{1,0} + \frac{k_{1,1}}{2}) + 2(\omega_{2,0} + \frac{k_{1,2}}{2})] = -0.03247644757, \\ \\ k_{3,1} &= h\,[\omega_{2,0} + \frac{k_{2,2}}{2}] = -0.06162832238, \\ k_{3,2} &= h\,[e^{2(t_0+0.05)}\sin(t_0 + 0.05) - 2(\omega_{1,0} + \frac{k_{2,1}}{2}) + 2(\omega_{2,0} + \frac{k_{2,2}}{2})] = -0.03152409237, \\ \\ k_{4,1} &= h\,[\omega_{2,0} + k_{3,2}] = -0.063152240924, \\ k_{4,2} &= h\,[e^{2(t_0+0.1)}\sin(t_0 + 0.1) - 2(\omega_{1,0} + k_{3,1}) + 2(\omega_{2,0} + k_{3,2})] = 0.02178637298 \ . \end{cases}$$

Portanto,

$$\omega_{1,1} = \omega_{1,0} + \frac{1}{6}(k_{1,1} + 2k_{2,1} + 2k_{3,1} + k_{4,1}) = -0.4617333423,$$
$$\omega_{2,1} = \omega_{2,0} + \frac{1}{6}(k_{1,2} + 2k_{2,2} + 2k_{3,2} + k_{4,2}) = -0.6316312421\ .$$

Estes valores aproximam

$$\omega_{1,1} \approx u_1(0.1) = y(0.1) = 0.2\, e^{2(0.1)}(\sin(0.1) - 2\cos(0.1)) = -0.46173297065077745,$$
$$\omega_{2,1} \approx u_2(0.1) = y'(0.1) = 0.2e^{2(0.1)}(4\sin(0.1) - 3\cos(0.1)) = -0.6316310507516716\,.$$

Solução exata:

$$y(t) = -\frac{2}{5}\cos(t)e^{2t} + \frac{1}{5}\sin(t)\, e^{2t} \implies y'(t) = \frac{1}{5}e^{2t}\left(4\sin(t) - 3\cos(t)\right)\ .$$