

Capítulo 6

Métodos numéricos para problemas diferenciais ordinários

6.1 Breve referência histórica

Os trabalhos preliminares na área dos métodos numéricos para a solução de equações diferenciais são devidos, entre outros, a Isaac Newton (1643-1729) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1643-1716), no século XVII, bem como a Leonhard Euler (1707-1783), no século XVIII. Mas foi sobretudo devido aos trabalhos deste último que foram impulsionados os estudos que conduziram aos métodos que hoje conhecemos.

Euler deduziu um processo iterativo que permitia determinar, de forma aproximada, a solução de um problema de condição inicial num determinado ponto. A demonstração rigorosa de que, de facto, o processo por ele apresentado conduzia à solução da equação só foi apresentada mais tarde, em 1824, por Augustin Cauchy (1789-1857) e melhorada por Rudolf Lipschitz (1832-1908). No entanto, nem assim, o processo apresentado por Euler se tornou popular. A título de exemplo, Karl Weierstrass (1815-1897), famoso matemático alemão do século XIX trabalhou nestes assuntos sem conhecer os trabalhos de Cauchy e Lipschitz.

Os finais do século XIX e princípios do século XX foram muito profícuos ao florescimento de métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais. Com os desenvolvimentos efectuados na teoria do calor por Fourier e na mecânica celeste por Adams, Bessel, Cauchy, Gauss, Laguerre, Laplace, Legendre, Leverrier, Poincaré e outros vieram tornar imprescindível a existência de esquemas para determinar a solução numérica de equações diferenciais. A balística foi outra ciência que começou a exigir resultados nesta área.

Poderemos dividir os métodos numéricos para determinar a solução de equações diferenciais em duas grandes classes: por um lado, os chamados métodos de passo único aos quais pertence o método de Euler-Cauchy-Lipschitz; por outro os chamados métodos de passo múltiplo.

Os sucessores do método de Euler-Cauchy-Lipschitz foram apresentados por K. Heun em 1900 e, sobretudo, por Carl Runge (1856-1927) em 1895 e 1908 e por Martin Wilhelm Kutta (1867-1944) em 1901, tendo sido considerados como generalizações das regras de integração. Estes métodos tornaram-se bastante populares devido às suas propriedades e à sua fácil utilização.¹

¹De notar que o primeiro sistema de equações diferenciais a ser resolvido pelo ENIAC foi integrado pelo método de Heun.

Dos primeiros e mais conhecidos métodos de passo múltiplo para a resolução de equações diferenciais são os chamados métodos de Adams. John Couch Adams (1819-1892), famoso astrónomo britânico que descobriu, em co-autoria, o planeta Neptuno, baseou-se nos métodos teóricos propostos por Cauchy para apresentar um método novo que usou na integração da equação de Bashforth. Aliás, foi num trabalho de Francis Bashforth (1819-1912) de 1883 que o método proposto por Adams foi apresentado, sendo por isso também conhecido por método de Adams-Bashforth.

Foi possivelmente a primeira Grande Guerra que veio dar um forte impulso ao florescimento dos métodos numéricos. A grande quantidade de cálculos e a complexidade dos problemas que a balística exige não poderiam ser efectuadas facilmente sem a ajuda destes processos alternativos. O primeiro contributo para o melhoramento dos métodos existentes foi dado pelo matemático americano Forest Ray Moulton (1872-1952) em 1925, propondo uma classe de métodos conhecida por Adams-Moulton. Em 1928 apareceu um trabalho da autoria de Richard Courant (1888-1972), Kurt Friedrichs (1901-1982) e Hans Lewy que revolucionou toda a teoria dos métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais.

No entanto foi só depois da segunda Grande Guerra e sobretudo depois do aparecimento do primeiro computador e dos trabalhos de Herman Goldstine (1903-) e John von Neumann (1903-1957), em 1947, que estes métodos começaram a ser usados de forma sistemática. Conceitos como 'erros de arredondamento', 'número de condição' e 'instabilidade numérica' começaram a surgir e a tornar-se de capital importância para o estudo da teoria subjacente. Os estudos sobre métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais começaram a merecer a atenção de um número crescente de matemáticos e outros cientistas e hoje é uma das áreas mais importantes e profíguas da Matemática em geral e da Análise Numérica em particular.

6.2 Introdução

As primeiras equações diferenciais são tão antigas quanto o cálculo diferencial. Newton considerou-as, em 1671, no seu tratado de cálculo diferencial e discutiu a sua solução por integração e por expansão em série. Leibniz, o segundo inventor do cálculo, chegou às equações diferenciais por volta de 1676 considerando o problema geométrico do 'inverso das tangentes': para que curva $y(x)$ a tangente em cada ponto P tem um comprimento constante (com o eixo dos x 's), digamos a ? Este problema conduziu à equação $y' = -y/\sqrt{a^2 - y^2}$.

Em 1696, Johann Bernoulli (1667-1748) convidou os mais ilustres matemáticos do seu tempo para resolver o problema da *braquistócrona* (curva de tempo mínimo), principalmente para refutar a resposta, que esperava errada, do seu irmão Jacob Bernoulli (1657-1705). O problema consistia em determinar a curva $y(x)$ que une dois pontos P_0 e P_1 de tal modo que um ponto, partindo de P_0 e 'deslizando', nessa curva, sujeito apenas a forças gravíticas, atinja P_1 no menor tempo possível. A resposta a este problema foi dada dada por vários matemáticos (inclusivé Jacob Bernoulli) e é, como se sabe, a *ciclóide*. Essa curva pode ser determinada como sendo a solução de uma equação diferencial ordinária.

Muitos problemas da engenharia e da ciência têm como modelo equações diferenciais. Neste curso iremos efectuar uma breve introdução ao estudo dos métodos numéricos para a resolução de problemas que envolvem equações diferenciais. Os problemas que iremos considerar serão de dois tipos: problemas com condição inicial e problemas com condições de fronteira. Neste capítulo não iremos apresentar a demonstração de todos os teoremas; o aluno interessado poderá ver essas demonstrações nas obras referenciadas no final do capítulo.

6.3 Problemas com condição inicial

6.3.1 Existência e unicidade de solução. Condicionamento

Consideremos uma equação diferencial ordinária de primeira ordem, isto é, uma equação da forma

$$y'(t) = f(t, y), \quad t \in [a, b], \quad (6.1)$$

em que $f : [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. O estudo que iremos efectuar para este tipo de equações pode ser facilmente generalizado a sistemas de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, isto é, para o caso em que $f : [a, b] \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$. Por uma questão de simplificação de exposição optámos por apresentar o estudo para o caso escalar ($N = 1$).

Antes de se pensar em resolver uma determinada equação diferencial há que garantir que essa equação tem solução e que é única. Note-se que a solução equação (6.1), se existir, não é única pois, ao integrarmos, introduzimos sempre uma constante de integração.

Uma das condições para obter a unicidade da solução é especificar $y(t)$ num ponto t_0 do intervalo $[a, b]$, usualmente $t_0 = a$. Ficamos assim com o problema de condição inicial (PCI)

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y), & t \in [a, b], \\ y(a) = \alpha. \end{cases} \quad (6.2)$$

Apesar de contornado este problema ainda não temos a garantia da existência e unicidade da solução do PCI (6.2). Antes de apresentarmos o teorema que estabelece as condições suficientes para que o problema tenha solução única consideremos a seguinte definição.

Definição 6.1 *Uma função $f(t, y)$ verifica a condição de Lipschitz (ou é lipschitziana), na variável y , num conjunto $D \subset \mathbb{R}^2$ se existir uma constante $L > 0$ tal que*

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

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

Exercício 6.3.1 Prove que a função $f(t, y) = t|y|$ é lipschitziana, na variável y , no conjunto

$$D = \{(t, y) \in \mathbb{R}^2 : 1 \leq t \leq 2; -3 \leq y \leq 4\}.$$

Resolução: Temos que

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| = |t|y_1| - t|y_2|| \leq 2||y_1| - |y_2|| \leq 2|y_1 - y_2|.$$

Logo, a constante de Lipschitz é $L = 2$.

O teorema seguinte (cuja demonstração pode ser vista em Kress (1998)) estabelece condições suficientes para que um problema com condição inicial tenha solução única.

Teorema 6.2 (Picard) *Seja $f(t, y)$ uma função contínua e lipschitziana (na variável y) em $D = \{(t, y) : a \leq t \leq b, y \in \mathbb{R}\}$. Então o PCI (6.2) tem solução única $y(t)$ para $t \in [a, b]$.*

Observação 6.3 A demonstração deste teorema estabelece um processo iterativo de aproximação da solução do PCI (6.2) conhecido por método de Emile Picard (1856-1941). Se f for contínua em relação a t , determinar a solução do PCI (6.2) é equivalente a determinar y , continuamente diferenciável, que verifica

$$y(t) = \alpha + \int_a^t f(\tau, y(\tau)) d\tau. \quad (6.3)$$

O que se prova na demonstração do Teorema de Picard é que a sucessão de funções $(y_j(t))$ definida recursivamente por

$$\begin{aligned} y_0(t) &= \alpha, \\ y_{j+1} &= \alpha + \int_a^t f(\tau, y_j(\tau)) d\tau. \quad j = 0, 1, \dots, \end{aligned}$$

converge para a única solução de (6.3).

Como corolário do Teorema de Picard temos o seguinte resultado que apresentamos igualmente sem demonstração.

Corolário 6.4 Suponhamos que $f(t, y)$ está definida num conjunto convexo² $D \subset \mathbb{R}^2$. Se existir uma constante $L > 0$ tal que

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

então f satisfaz a condição de Lipschitz, na variável y , com L a respectiva constante e, como tal, o PCI (6.2) tem solução única $y(t)$ para $t \in [a, b]$.

Observação 6.5 Note-se que o conjunto $D = \{(t, y) : a \leq t \leq b, y \in \mathbb{R}\}$ é, obviamente, convexo.

Exercício 6.3.2 Mostre que o problema de condição inicial $\begin{cases} y'(t) = \frac{1}{1+y^2}, \\ y(a) = \alpha, \end{cases}$ para $t \in [a, b]$, tem solução única.

Resolução: Seja $D = \{(t, y) : a \leq t \leq b, y \in \mathbb{R}\}$ e

$$f(y) = \frac{1}{1+y^2}.$$

Vamos provar que a função

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

é limitada em D . Para isso há que determinar

$$L = \max_{y \in \mathbb{R}} \left| \frac{2y}{(1+y^2)^2} \right|.$$

²Um conjunto $D \subseteq \mathbb{R}^2$ diz-se convexo se, para qualquer $(t_1, y_1), (t_2, y_2) \in D$, se verifica

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

Como a função que queremos provar limitada é par temos que

$$L = \max_{y \in \mathbb{R}_0^+} \frac{2y}{(1-y^2)^2}.$$

Consideremos

$$g(y) = \frac{2y}{(1-y^2)^2}.$$

Como

$$g'(y) = 0 \Rightarrow y = \pm \frac{\sqrt{3}}{3}$$

temos que

$$L = \max \left\{ g(0), g\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right), \lim_{y \rightarrow +\infty} g(y) \right\} = \max\{0, 0.6594, 0\} = 0.6594.$$

Está assim provado o pretendido.

Outra questão que se coloca é a de saber se o PCI (6.2) é sensível a pequenas perturbações nos dados do problema, isto é, se pequenas alterações nas condições iniciais não provocam grandes alterações nos resultados. Jacques Hadamard, em 1923, sugeriu duas condições que devem ser verificadas quando se formula um PCI: (i) a solução deve existir e ser única; (ii) a solução deve depender de forma contínua dos dados iniciais do problema. Temos então a seguinte definição.

Definição 6.6 *O PCI (6.2) é bem posto se:*

1. possui solução única $y(t)$;
2. for estável, isto é, se existirem constantes positivas ξ e k (independente de ξ) tais que o problema perturbado

$$\begin{cases} z'(t) = f(t, z) + \delta(t), & t \in [a, b] \\ z(a) = \alpha + \delta_0 \end{cases}$$

possui solução única $z(t)$ com

$$|z(t) - y(t)| < k\xi, \quad \forall t \in [a, b],$$

sempre que $|\delta_0| < \xi$ e $|\delta(t)| < \xi$.

As hipóteses do Corolário 6.4 são suficientes para garantir que o PCI (6.2) é bem posto no sentido de Hadamard. De facto, o referido corolário já estabelece a existência e unicidade e solução; falta apenas provar que o problema é estável. Considerando

$$w(t) = z(t) - y(t),$$

temos

$$w'(t) = f(t, z(t)) - f(t, y(t)) + \delta(t) = f_y(t, \bar{y}(t))w(t) + \delta(t),$$

com a condição inicial

$$w(a) = \delta_0,$$

em que f_y representa a derivada parcial de f em ordem a y e $\bar{y}(t)$ pertence ao intervalo definido por $y(t)$ e $z(t)$. Integrando a equação anterior obtemos

$$w(t) = e^{\int_a^t f_y d\tau} \left[\int_a^t \delta(\sigma) e^{-\int_a^\sigma f_y d\mu} d\sigma + \delta_0 \right], \quad (6.4)$$

o que prova que o problema perturbado é estável.

Poder-se-ia também provar que, para que o PCI (6.2) tenha solução única e seja bem posto, é suficiente que se verifiquem as hipóteses do Teorema de Picard. Vamos assumir todos os problemas considerados neste capítulo verificam tais hipóteses.

Exercício 6.3.3 Mostre que o problema de condição inicial $\begin{cases} y'(t) = -y + t + 1, \\ y(0) = 1, \end{cases}$ para $t \in [0, 1]$, é bem posto.

Resolução: Seja $D = \{(t, y) : 0 \leq t \leq 1, y \in \mathbb{R}\}$ e $f(t, y) = -y + t + 1$. Como

$$L = \max_{(t,y) \in D} \left| \frac{\partial f}{\partial y}(t, y) \right| = 1$$

temos que o problema de condição inicial dado é bem posto.

Observação 6.7 Note-se que o facto de $\frac{\partial f}{\partial y}$ ser limitada nem sempre garante que pequenas perturbações nas condições iniciais impliquem uma pequena perturbação na solução. No entanto, se $\delta(x) = 0$, para todo $x \in [a, b]$, é fácil concluir que se a derivada for negativa então o PCI (6.2) é bem condicionado, isto é, que pequenas perturbações na condição inicial implicam pequenas variações na solução. Se a derivada for muito negativa, então o problema, apesar de bem posto, pode trazer problemas à sua resolução aproximada por métodos numéricos. Se a referida derivada for positiva, embora limitada, então o PCI (6.2) apesar de estável, é mal condicionado.

Exercício 6.3.4 Considere a equação diferencial

$$y' = 100y - 101e^{-t}, \quad t \in [0, 3],$$

com as condições iniciais: (i) $y(0) = 1$; (ii) $y(0) = 1 + 10^{-130}$. Compare as soluções obtidas.

6.3.2 Métodos numéricos

Consideremos de novo o PCI bem posto (6.2). Os métodos numéricos para resolver este problema são métodos discretos, isto é, são métodos que determinam aproximações y_0, y_1, \dots, y_n para a solução exacta $y(t_0), y(t_1), \dots, y(t_n)$ nos pontos distintos da malha

$$a = t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n = b.$$

Às distâncias $h_i = t_i - t_{i-1}$, $i = 1, \dots, n$, dá-se o nome de passos (ou medidas do passo) de malha. Se os passos forem todos iguais a malha diz-se uniforme ou de passo constante. Caso contrário diz-se de passo variável. Neste curso vamos apenas considerar malhas uniformes, isto é, tais que $t_i = t_0 + ih$, $i = 0, \dots, n$, onde $h = \frac{b-a}{n}$.

Os métodos numéricos permitem determinar valores $y_i \approx y(t_i)$ por meio de relações de recorrência deduzidas do PCI (6.2) de modo a que o valor de y_{i+1} venha expresso em função de y_i, y_{i-1}, \dots, y_0 , sendo $y_0 = y(a) = \alpha$. É usual agrupar os métodos numéricos para a resolução de problemas de condição inicial em duas grandes classes.

- Métodos de passo único: São métodos que determinam o valor de y_{i+1} apenas à custa de y_i .
- Métodos de passo múltiplo: São métodos que determinam o valor de y_{i+1} à custa de $y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-r+1}$. Neste caso diz-se que o método é de r passos.

Neste curso iremos apenas abordar os métodos de passo único. Estes métodos, por sua vez, podem ainda ser de dois tipos.

- Métodos explícitos: São métodos em que o valor de y_{i+1} é determinado directamente a partir de y_i . Estes métodos podem ser escritos na forma

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(t_i, y_i, ; h). \quad (6.5)$$

- Métodos implícitos: São métodos em que o valor de y_{i+1} depende implicitamente de si mesmo através de f . Estes métodos podem ser escritos na forma

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(t_i, t_{i+1}, y_i, y_{i+1}; h). \quad (6.6)$$

A função ϕ que define os métodos (6.5) e (6.6) é chamada função de iteração ou função incremento do método numérico.

6.3.3 Métodos baseados na série de Taylor

Consideremos o PCI (6.2) com f uma função suficientemente diferenciável nas variáveis t e y . Então

$$y(t) = y(t_0) + (t - t_0)y'(t_0) + \frac{(t - t_0)^2}{2!}y''(t_0) + \dots,$$

com $t_0 = a$. As derivadas desta expressão não são conhecidas explicitamente visto que a solução também não é conhecida. No entanto, podemos escrever

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(t, y), \\ y''(t) &= \frac{df}{dt}(t, y) = (f_t + f_y y')(t, y) = (f_t + f_y f)(t, y), \\ y'''(t) &= \frac{d^2 f}{dt^2}(t, y) = (f_{tt} + 2f_{ty} f + f_{yy} f^2 + f_t f_y + f_y^2 f)(t, y), \\ &\vdots \end{aligned}$$

onde

$$f_t(t, y) = \frac{\partial f}{\partial t}(t, y), \quad f_y(t, y) = \frac{\partial f}{\partial y}(t, y), \quad \dots$$

Por razões práticas temos que limitar o número de termos na expansão em série de $y(t)$ a um número razoável, o que nos conduz a restrições nos valores de t para os quais a expansão nos dá uma boa aproximação.

Se tomarmos a série de Taylor truncada temos, para $t = t_1$,

$$y(t_1) \approx y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) + \frac{h^2}{2}f'(t_0, y_0) + \cdots + \frac{h^k}{k!}f^{(k-1)}(t_0, y_0),$$

onde

$$f^{(j)}(t_0, y_0) = \frac{d^j f}{dt^j}(t_0, y_0).$$

Podemos definir assim, para cada $k = 1, 2, \dots$, um método de passo único explícito que permite obter soluções aproximadas $y_i \approx y(t_i)$ da forma (6.5) em que

$$\phi(t, y; h) = f(t, y) + \frac{h}{2}f'(t, y) + \cdots + \frac{h^k}{k!}f^{(k-1)}(t, y). \quad (6.7)$$

Os métodos assim definidos são conhecidos por métodos de Taylor. O método desta classe mais simples é quando $k = 1$, isto é, o método

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i), \quad i = 0, \dots, n, \quad y_0 = \alpha, \quad (6.8)$$

designado por método de Euler (explícito).

O seguinte algoritmo permite determinar a solução do PCI (6.2) em $t = b$, usando o método com função incremento (6.7).

Algoritmo 6.1 Método de Taylor

Ler n e k ;

Ler a , b e α ;

$h := \frac{b-a}{n}$;

$t := a$;

$y := \alpha$;

Para i de 1 até n fazer

$\phi := 0$;

Para j de 1 até k fazer

$\phi := \phi + f^{(j)}(t, y)h^j/j!$;

$y := y + h\phi$;

$t := t + h$;

Escrever y .

Exercício 6.3.5 Considere o problema de condição inicial $\begin{cases} y'(t) = -2y, \\ y(0) = 1. \end{cases}$ Determine, usando o método de Euler, o valor aproximado de $y(1)$, fazendo $h = 1$, $h = 0.5$ e $h = 0.25$. Compare os resultados obtidos sabendo que $y(t) = e^{-2t}$.

Resolução: A solução exacta deste problema é $y(1) = 0.135335283$. Consideremos agora as soluções numéricas para os três casos propostos. Seja $f(y) = -2y$.

- $h = 1$

$$\begin{aligned}y(0) = y_0 &= 1 \\y(1) \approx y_1 &= y_0 + hf(y_0) = 1 + 1 \times (-2) = -1.\end{aligned}$$

$$\text{Logo } |y_1 - y(1)| = 1.135335283.$$

- $h = 0.5$

$$\begin{aligned}y(0) = y_0 &= 1 \\y(0.5) \approx y_1 &= y_0 + hf(y_0) = 1 + 0.5 \times (-2) = 0 \\y(1) \approx y_2 &= y_1 + hf(y_1) = 0 + 0.5 \times 0 = 0.\end{aligned}$$

$$\text{Logo } |y_2 - y(1)| = 0.135335283.$$

- $h = 0.25$

$$\begin{aligned}y(0) = y_0 &= 1 \\y(0.25) \approx y_1 &= y_0 + hf(y_0) = 1 + 0.25 \times (-2) = 0.5 \\y(0.5) \approx y_2 &= y_1 + hf(y_1) = 0.5 + 0.25 \times (-1) = 0.25 \\y(0.75) \approx y_3 &= y_2 + hf(y_2) = 0.25 + 0.25 \times (-0.5) = 0.125 \\y(1) \approx y_4 &= y_3 + hf(y_3) = 0.125 + 0.25 \times (-0.25) = 0.0625.\end{aligned}$$

$$\text{Logo } |y_4 - y(1)| = 0.072835283.$$

Nota-se que, quanto menor for a medida do passo mais pequeno é o erro cometido.

Exercício 6.3.6 Seja dado o problema de condição inicial $\begin{cases} y'(t) = \frac{1}{1+y^2}, \\ y(0) = 1. \end{cases}$ Use o método de Taylor, com $k = 2$, para determinar o valor aproximado de $y(1)$, fazendo $h = 0.5$.

Resolução: Seja $f(y) = (1 + y^2)^{-1}$. Temos que o método de Taylor com $k = 2$ é dado por

$$y_{i+1} = y_i + hf(y_i) + \frac{h^2}{2} \frac{df}{dt}(y_i) = y_i + h \frac{1}{1+y_i^2} - h^2 \frac{y_i}{(1+y_i^2)^3}.$$

Assim, fazendo $h = 0.5$ temos

$$y(0) = y_0 = 1$$

$$y(0.5) \approx y_1 = 1 + 1 + 0.5 \times \frac{1}{2} - 0.25 \times \frac{1}{8} = 1.21875$$

$$y(1) \approx y_2 = 1.21875 + 0.5 \times \frac{1}{2.485351563} - 0.25 \times \frac{1.21875}{15.35194798} = 1.4.$$

6.3.4 Métodos de Runge-Kutta

O método mais simples para aproximar a solução do PCI (6.2) é o método (6.8), descrito por Euler, em 1768, na sua obra 'Institutiones Calculi Integralis'. É um método muito simples de entender e de programar mas, como se irá ver na próxima secção, pouco preciso. Por exemplo,

se pretendermos uma precisão de, digamos, 6 casas decimais, o método de Euler necessita de aproximadamente um milhão de passos.

Se usarmos outros métodos de Taylor, a precisão pode ser aumentada. A grande desvantagem destes métodos reside no facto de termos necessidade de calcular muitas derivadas da função f para obter métodos precisos. Esse cálculo, além de muito fastidioso, torna impraticável a aplicação de tais métodos na resolução de (6.2) quando a função f tem uma expressão analítica complicada.

Uma alternativa a esses métodos foi dada por Runge, em 1875, e que consistia em, partindo do conhecimento de $y(a)$, considerar

$$y(a+h) \approx \alpha + hf\left(a + \frac{h}{2}, y\left(a + \frac{h}{2}\right)\right);$$

mas, que valor atribuir a $y\left(a + \frac{h}{2}\right)$? A sugestão de Runge foi a de considerar o método de Euler com passo $\frac{h}{2}$. A aplicação sucessiva deste processo permitiu a Runge definir o seguinte método iterativo:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, y_i), \\ k_2 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right), \\ y_{i+1} &= y_i + hk_2. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Como veremos este método, apesar de recorrer ao método de Euler, vai ser mais preciso e não necessita de calcular derivadas de f . A generalização desta ideia deu origem à seguinte definição.

Definição 6.8 *Seja s um número inteiro e $a_{2,1}, a_{3,1}, a_{3,2}, \dots, a_{s,1}, \dots, a_{s,s-1}$, c_2, c_3, \dots, c_s , b_1, b_2, \dots, b_s , coeficientes reais. O método*

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, y_i), \\ k_2 &= f(t_i + c_2h, y_i + a_{2,1}hk_1), \\ k_3 &= f(t_i + c_3h, y_i + a_{3,1}hk_1 + a_{3,2}hk_2), \\ &\vdots \\ k_s &= f(t_i + c_sh, y_i + a_{s,1}hk_1 + a_{s,2}hk_2 + \dots + a_{s,s-1}hk_{s-1}), \\ y_{i+1} &= y_i + h[b_1k_1 + b_2k_2 + \dots + b_s k_s], \end{aligned}$$

é chamado método de Runge-Kutta explícito de s etapas para o PCI (6.2).

Usualmente considera-se

$$c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}, \quad i = 2, 3, \dots, s. \quad (6.10)$$

Uma notação muito usada na prática para os métodos de Runge-Kutta foi apresentada por Butcher em 1964 e é dada pelo seguinte quadro, designado por quadro de Butcher:

0					
c_2	$a_{2,1}$				
c_3	$a_{3,1}$	$a_{3,2}$			
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots		
c_s	$a_{s,1}$	$a_{s,2}$	\dots	$a_{s,s-1}$	
	b_1	b_2	\dots	b_{s-1}	b_s

Antes de continuarmos, notemos que os métodos de Runge-Kutta constituem uma excelente ideia. A única solução do PCI bem posto (6.2) é uma curva integral em \mathbb{R}^2 . No entanto, devido aos erros cometidos, a solução numérica vai ser afectada pelo comportamento das curvas integrais vizinhas. É assim importante conhecer o comportamento de toda a família de curvas integrais e não apenas o de uma única curva.

Os métodos de Runge-Kutta usam, deliberadamente, informação de várias curvas integrais em simultâneo. A título de exemplo considere-se o método de três etapas

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_i, y_i), \\k_2 &= f(t_i + c_2h, y_i + c_2hk_1), \\k_3 &= f(t_i + c_3h, y_i + (c_3 - a_{3,2})hk_1 + a_{3,2}hk_2), \\y_{i+1} &= y_i + h[b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3].\end{aligned}$$

Para determinar a solução numérica do PCI (6.2) por este método, começa-se pelo ponto (t_i, y_i) e aplica-se um passo do método de Euler com passo c_2h . Seguidamente, calcula-se o valor de k_2 como sendo o vector derivada no ponto obtido. Temos assim dois valores para a derivada: k_1 e k_2 ; iremos usar uma média pesada entre estes dois valores $(c_3 - a_{3,2})hk_1 + a_{3,2}hk_2$ numa nova aplicação do método de Euler, a partir do ponto (t_i, y_i) , com passo c_3h . Calculando a derivada novamente obtém-se o valor de k_3 . O último passo do algoritmo é mais uma aplicação do método de Euler, a partir do ponto (t_i, y_i) , com passo h .

Exercício 6.3.7 Considere o problema de condição inicial $\begin{cases} y'(t) = ty^2, \\ y(1) = 2. \end{cases}$ Determine um valor aproximado para $y(1.1)$, usando o método de Heun, dado por

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_i, y_i); \quad k_2 = f(t_i + h, y_i + hk_1); \\y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2),\end{aligned}$$

com $h = 0.05$.

Resolução: Seja $f(t, y) = ty^2$. Temos que

$$\begin{aligned}y(1) = y_0 &= 2 \\y(1.05) \approx y_1 &= y_0 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 2 + 0.025(k_1 + k_2).\end{aligned}$$

Por outro lado

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_0, y_0) = f(1, 2) = 4 \\k_2 &= f(t_0 + h, y_0 + hk_1) = f(1.05, 2.2) = 5.082.\end{aligned}$$

Assim, $y(1.05) \approx y_1 = 2.22705$. Continuando a aplicação do método

$$y(1.1) \approx y_2 = y_1 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 2.22705 + 0.025(k_1 + k_2).$$

Para este segundo passo temos que voltar a calcular k_1 e k_2 . Assim,

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_1, y_1) = f(1.05, 2.22705) = 5.207739 \\k_2 &= f(t_1 + h, y_1 + hk_1) = f(1.1, 2.487437) = 6.806077.\end{aligned}$$

Logo, $y(1.1) \approx y_2 = 2.5273954$.

Um método de Runge-Kutta muito famoso é dado pela expressão

$$k_1 = f(t_i, y_i); \quad k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right); \quad k_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right); \quad k_4 = f(t_i + h, y_i + hk_3);$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).$$

O seguinte algoritmo permite determinar a solução do PCI (6.2) em $t = b$, usando este método de Runge-Kutta.

Algoritmo 6.2 Método de Runge-Kutta

Ler n ;
 Ler a, b e $alpha$;
 $h := \frac{b-a}{n}$;
 $t := a$;
 $y := \alpha$;
 Para i de 1 até n fazer
 $s := 0$;
 $k_1 := f(t, y)$;
 $k_2 := f(t + 0.5h, y + 0.5hk_1)$;
 $k_3 := f(t + 0.5h, y + 0.5hk_2)$;
 $k_4 := f(t + h, y + hk_3)$;
 $y := y + h(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6$;
 $t := t + h$;
 Escrever y .

Exercício 6.3.8 Construa um algoritmo que permita determinar a solução do PCI (6.2) em $t = b$, usando um método de Runge-Kutta explícito de s etapas qualquer.

6.3.5 Estudo do erro

Quando se determinam valores numéricos para aproximar quantidades desconhecidas, temos necessidade de conhecer estimativas para o erro que se comete nessa aproximação. No caso dos métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais vamos considerar dois tipos de erros: o erro de truncatura local e o erro global (ou da aproximação).

Definição 6.9 Consider-se o PCI (6.2) e um método numérico de passo único

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(t_i, y_i; h), \quad i = 0, \dots, n-1, \quad y_0 = \alpha, \quad (6.11)$$

que determine aproximações y_i para a solução exacta $y(t_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$. Supondo que $y_i = y(t_i)$, a $T_{i+1} = y(t_{i+1}) - y_{i+1}$ chama-se erro de truncatura local do método no ponto t_{i+1} . Se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \max_{0 \leq i \leq n-1} \left| \frac{T_{i+1}}{h} \right| = 0,$$

o método diz-se consistente com o PCI (6.2). O método diz-se de ordem $p > 0$ se existir um $C > 0$ tal que

$$|T_{i+1}| \leq Ch^{p+1}, \quad i = 0, \dots, n-1,$$

isto é, se $|T_{i+1}| = \mathcal{O}(h^{p+1})$, $i = 0, \dots, n-1$.

Da definição anterior conclui-se que o erro de truncatura local é definido com sendo

$$T_{i+1} = y(t_{i+1}) - y(t_i) - h\phi(t_i, y(t_i); h).$$

Assim, o erro local pode ser determinado através dos seguintes passos: (i) substituir na expressão que define o método numérico a solução aproximada no ponto t_{i+1} , y_{i+1} , pela solução exacta $y(t_{i+1})$; (ii) considerar a hipótese $y(t_i) = y_i$; (iii) efectuar o desenvolvimento em série de Taylor de $y(t_{i+1})$ em torno de t_i .

Certos autores consideram a definição de erro local de forma diferente. É muito frequente encontrar a definição de erro de truncatura local no ponto t_{i+1} como sendo

$$T_{i+1} = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} - \phi(t_i, y(t_i); h), \quad i = 0, \dots, n-1.$$

De acordo com esta definição (que é a que foi usada em Ferreira e Patrício (1999)) o método (6.11) tem ordem p se $|T_{i+1}| = \mathcal{O}(h^p)$, $i = 0, \dots, n-1$.

Observação 6.10

1. Um método é consistente se tiver, pelo menos, ordem um ou, o que é equivalente, se $\phi(t, y; 0) = f(t, y)$.
2. O erro local para o método de Taylor de função incremento (6.7) é dado por

$$T_{i+1} = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(\xi), \quad \xi \in (t_i, t_{i+1}),$$

ou seja, $T_{i+1} = \mathcal{O}(h^{k+1})$ e, como tal, o método tem ordem k .

3. Para o caso particular do método de Euler temos que $T_{i+1} = \mathcal{O}(h^2)$ e assim sendo o método tem ordem um.

O estudo da ordem para os métodos de Runge-Kutta não é uma tarefa fácil e, como tal, não o iremos efectuar neste curso introdutório. A título exemplificativo consideremos este estudo apenas para um caso muito simples.

Exemplo 6.11 O método de Heun é dado por

$$k_1 = f(t_i, y_i); \quad k_2 = f(t_i + h, y_i + hk_1);$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2).$$

Vamos determinar qual o seu erro local e , consequentemente, qual a sua ordem. Atendendo à definição de erro local temos que, supondo $y(t_i) = y_i$, $T_{i+1} = y(t_{i+1}) - y_{i+1}$. Desenvolvendo $y(t_{i+1})$ em série de Taylor em torno do ponto t_i temos

$$y(t_{i+1}) = y_i + hf(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2} \frac{df}{dt}(t_i, y_i) + \frac{h^3}{6} \frac{d^2f}{dt^2}(t_i, y_i) + \dots$$

Por outro lado, considerando o desenvolvimento de y_{i+1} , recorrendo à série de Taylor para duas variáveis,

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \left(f(t_i, y_i) + f(t_i, y_i) + h(f_t + f_y f)(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2} (f_{tt} + 2f_{ft_y} + f^2 f_{yy})(t_i, y_i) + \dots \right).$$

Subtraindo membro a membro, e uma vez que $y(t_i) = y_i$, temos

$$T_{i+1} = \frac{h^3}{12} (f_{tt} + 2f_{ft_y} + f^2 f_{yy} - 2f_t f_y - 2f f_y^2)(t_i, y_i) + \dots$$

Assim sai que

$$T_{i+1} = \frac{h^3}{12} (f_{tt} + 2f_{ft_y} + f^2 f_{yy} - 2f_t f_y - 2f f_y^2)(\xi, y(\xi)), \quad \xi \in (t_i, t_{i+1}).$$

Como $T_{i+1} = \mathcal{O}(h^3)$ concluímos que o método de Heun tem ordem 2.

Exercício 6.3.9 Mostre que o método de Runge (6.9) tem ordem dois.

Vamos considerar agora a definição de erro global.

Definição 6.12 Considere-se o PCI (6.2) e um método numérico de passo único explícito (6.11) que determine aproximações y_i para a solução exacta $y(t_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$. A $e(t_i) = y(t_i) - y_i$ chama-se erro global do método no ponto t_i . Se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \max_{1 \leq i \leq n} |e(t_i)| = 0,$$

o método diz-se convergente.

Note-se que, uma vez que o número de vezes que aplicamos um determinado método iterativo é $n = \frac{b-a}{h}$, podemos ser levados a afirmar que o erro global $e(t_i)$ deverá ser proporcional a $\frac{T_i}{h}$. Por outras palavras, se $T_i = \mathcal{O}(h^{p+1})$ tudo nos leva a crer que $e(t_i) = \mathcal{O}(h^p)$. De facto, o que se pode concluir é o que vem expresso no próximo teorema.

Teorema 6.13 Seja $y(t)$ a única solução do PCI, bem posto, (6.2) e (6.11) um método numérico que supomos ser consistente com o problema e ter ordem p , isto é, $|T_{i+1}| \leq Ch^{p+1}$, $i = 0, \dots, n-1$, $p \geq 1$. Se ϕ verificar as hipóteses do Teorema de Picard então

$$|e(t_i)| \leq \frac{C}{L} h^p [e^{L(t_i-a)} - 1], \quad i = 1, \dots, n.$$

sendo L a constante de Lipschitz de ϕ .

Demonstração: Considerando a definição de erro global temos que

$$e(t_{i+1}) = e(t_i) + h[\phi(t_i, y(t_i); h) - \phi(t_i, y_i; h)] + T_{i+1}, \quad i = 0, \dots, n-1.$$

Uma vez que a função ϕ é lipschitziana, na variável y , e o método tem ordem $p \geq 1$ concluímos que

$$|e(t_{i+1})| \leq (1 + hL)|e(t_i)| + Ch^{p+1}.$$

Como $e(t_0) = 0$ obtém-se

$$|e(t_{i+1})| \leq Ch^{p+1} \sum_{j=0}^i (1 + hL)^j = Ch^{p+1} \frac{1 - (1 + hL)^{i+1}}{1 - (1 + hL)} \leq \frac{C}{L} h^p [e^{(i+1)hL} - 1].$$

O teorema fica assim demonstrado uma vez que $t_{i+1} = a + (i + 1)h$. \square

Note-se que a consistência, por si só, não implica convergência uma vez que existem mais tipos de erros que podem ocorrer para além do erro de truncatura local. De facto, nem as condições iniciais nem a aritmética usada estão isentas de erros. Temos portanto necessidade de garantir que os métodos usados sejam estáveis no sentido de que pequenas alterações nas condições iniciais não produzam, por aplicação do método, grandes alterações nos resultados. No caso dos métodos de passo único, o teorema anterior permite-nos estabelecer o seguinte resultado.

Corolário 6.14 *Suponhamos que o PCI (6.2) é aproximado pelo método (6.11). Se existir $h_0 > 0$ tal que $\phi(t, y; h)$ é contínua e lipschitziana, na variável y , no conjunto*

$$D = \{(t, y; h) : a \leq t \leq b, y \in \mathbb{R}, 0 \leq h \leq h_0\}$$

então:

1. o método (6.11) é estável;
2. o método é convergente se e só se é consistente.

Exercício 6.3.10 Mostre que o método de Heun, aplicado à resolução do PCI (6.2), é convergente.

Resolução: Atendendo à definição do método de Heun temos que este pode ser dado pela expressão

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

com

$$\phi(t, y; h) = \frac{1}{2}[f(t, y) + f(t + h, y + hf(t, y))].$$

Para provar que o método é convergente vamos provar que é consistente e estável.

1. **Consistência.** Provámos que o método de Heun tem ordem dois e, assim sendo, é consistente. Poderíamos ainda provar a consistência provando que $\phi(t, y; 0) = f(t, y)$. De facto,

$$\phi(t, y; 0) = \frac{1}{2}[f(t, y) + f(t, y)] = f(t, y).$$

2. Estabilidade. Para provar que o método é estável vamos provar que $\phi(t, y; h)$ é lipschitziana, na variável y , em $D = \{(t, y; h) : a \leq t \leq b, y \in \mathbb{R}, 0 \leq h \leq h_0\}$.

Seja L a constante de Lipschitz de $f(t, y)$ na variável y . Então

$$\begin{aligned} |\phi(t, y_1; h) - \phi(t, y_2; h)| &= \left| \frac{1}{2}[f(t, y_1) + f(t+h, y_1 + hf(t, y_1))] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}[f(t, y_2) + f(t+h, y_2 + hf(t, y_2))] \right| \\ &\leq \frac{1}{2}[L|y_1 - y_2| + L|y_1 + hf(t, y_1) - y_2 - hf(t, y_2)|] \\ &\leq L|y_1 - y_2| + \frac{1}{2}hL^2|y_1 - y_2| \\ &\leq \left(L + \frac{1}{2}hL^2 \right) |y_1 - y_2|. \end{aligned}$$

Assim $\phi(t, y; h)$ satisfaz a condição de Lipschitz, na variável y , em D sendo a sua constante de Lipschitz dada por

$$K = \left(L + \frac{1}{2}h_0L^2 \right).$$

Finalmente, tanto ϕ como f são contínuas em D . Está assim provada a estabilidade do método.

Atendendo à consistência e estabilidade temos que o método converge para a solução de (6.2).

6.3.6 Métodos de passo único implícitos

Nesta secção vamos considerar a classe dos métodos de passo único implícitos da forma (6.6). Não havendo possibilidade de explicitar o valor de y_{i+1} temos necessidade de o calcular resolvendo a equação (geralmente não linear)

$$y_{i+1} - y_i - h\phi(t_i, t_{i+1}, y_i, y_{i+1}; h) = 0.$$

Usualmente considera-se um método numérico na resolução desta equação.

Se considerarmos o método de Newton, a primeira questão a resolver é a da determinação de uma aproximação inicial $y_{i+1}^{(0)}$. Normalmente toma-se para aproximação inicial o valor de y_i ; outra hipótese será a de considerar a aproximação inicial obtida pela aplicação de um método explícito. Determinado o valor de $y_{i+1}^{(0)}$ temos que

$$y_{i+1}^{(k+1)} = y_{i+1}^{(k)} - \frac{F(y_{i+1}^{(k)})}{F'(y_{i+1}^{(k)})}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

sendo

$$F(y_{i+1}) = y_{i+1} - h\phi(t_i, t_{i+1}, y_i, y_{i+1}; h).$$

Os métodos implícitos são usados visto que, em geral, são mais precisos e menos sensíveis a erros que os métodos explícitos. Por outro lado, o esforço computacional exigido no cálculo de y_{i+1} é, para os métodos implícitos, muito maior. Assim, estes métodos só devem ser usados quando há necessidade de uma precisão muito elevada em problemas sensíveis a erros.

Exemplos comuns de métodos implícitos são o chamado método de Euler implícito, dado pela expressão

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = 0, \dots, n-1, \quad y(a) = \alpha,$$

e o método dos trapézios, dado por

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})], \quad i = 0, \dots, n-1, \quad y(a) = \alpha.$$

Apesar do estudo da consistência e convergência de um método iterativo ter sido efectuado apenas para métodos explícitos, estes conceitos ainda são válidos para métodos implícitos. Para o método implícito (6.6) o erro de truncatura local é definido por

$$T_{i+1} = y(t_{i+1}) - y(t_i) - h\phi(t_i, t_{i+1}, y(t_i), y(t_{i+1}); h), \quad i = 0, \dots, n-1.$$

Vamos considerar o seguinte exercício.

Exercício 6.3.11 Considere o método dos trapézios na resolução de um problema de condição inicial.

1. Determine a ordem e o erro de truncatura local do método.
2. Aplique o método ao problema de condição inicial $\begin{cases} y'(t) = -ty^2, \\ y(0) = 2, \end{cases}$ e obtenha uma aproximação em $t = 1$ usando $h < 1$. (Considere a solução exacta positiva em $[0, 1]$.)

Resolução: 1. Atendendo à definição de erro local temos que $T_{i+1} = y(t_{i+1}) - y_{i+1}$, onde $y(t_i) = y_i$. Desenvolvendo $y(t_{i+1})$ e y_{i+1} em série de Taylor em torno do ponto t_i , temos que

$$y(t_{i+1}) = y_i + hf(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2} \frac{df}{dt}(t_i, y_i) + \frac{h^3}{6} \frac{d^2f}{dt^2}(t_i, y_i) + \dots$$

e

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \left(f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}) + h \frac{df}{dt}(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2f}{dt^2}(t_i, y_i) + \dots \right).$$

Subtraindo membro a membro vem

$$T_{i+1} = -\frac{h^3}{12} \frac{d^2f}{dt^2}(t_i, y_i) + \dots$$

Assim sai que

$$T_{i+1} = -\frac{h^3}{12} y'''(\xi), \quad \xi \in (t_i, t_{i+1}).$$

Como $T_{i+1} = \mathcal{O}(h^3)$ temos que o método dos trapézios tem ordem 2.

2. Seja $f(t, y) = -ty^2$ e $h = 0.5$. Assim,

$$\begin{aligned} y(0) = y_0 &= 2 \\ y(0.5) \approx y_1 &= y_0 + \frac{h}{2}[f(t_0, y_0) + f(t_1, y_1)] = 2 - 0.125y_1^2. \end{aligned}$$

Vamos agora resolver a equação $0.125y_1^2 + y_1 - 2 = 0$. Esta equação resolve-se sem dificuldade pois

$$0.125y_1^2 + y_1 - 2 = 0 \Rightarrow y_1 = -9.6598 \text{ ou } y_1 = 1.6568.$$

Como a solução é positiva temos que $y_1 = 1.6568$. Continuando,

$$y(1) \approx y_2 = y_1 + \frac{h}{2}[f(t_1, y_1) + f(t_2, y_2)] = 1.3137 - 0.25y_2^2.$$

Resolvendo a equação $0.25y_2^2 + y_2 - 1.3137 = 0$, temos

$$0.25y_2^2 + y_2 - 1.3137 = 0 \Rightarrow y_2 = -5.0422 \text{ ou } y_2 = 1.0422.$$

Como a solução é positiva temos que $y_2 = 1.0422$.

Exercício 6.3.12 Considere o problema de condição inicial

$$\begin{cases} y' &= -30y, \\ y(0) &= 1, \end{cases}$$

e os métodos de Euler e Euler implícito. Usando cada um dos métodos determine a solução do problema em $t = 1$ com $h < 1$, comparando os resultados obtidos.

Resolução: Seja $f(y) = -30y$ e consideremos $h = 0.5$. Vamos aplicar os dois métodos separadamente.

1. Método de Euler

$$\begin{aligned} y(0) = y_0 &= 1; \\ y(0.5) \approx y_1 &= 1 + 0.5 \times (-30) = -14; \\ y(1) \approx y_2 &= -14 + 0.5 \times (-30 \times (-14)) = 196. \end{aligned}$$

2. Método de Euler implícito

$$\begin{aligned} y(0) = y_0 &= 1; \\ y(0.5) \approx y_1 &= 1 + 0.5 \times (-30y_1) = 1 - 15y_1. \end{aligned}$$

Resolvendo a equação temos que $y(0.5) \approx y_1 = 0.0625$. Continuando temos

$$y(1) \approx y_2 = 0.0625 + 0.5 \times (-30y_2) = 0.0625 - 15y_2,$$

e assim, $y(1) \approx y_2 = 3.9 \times 10^{-3}$.

Atendendo a que a solução exacta é dada por $y(t) = e^{-30t}$ temos que $y(1) = 9.36 \times 10^{-14}$.

Note-se que, enquanto o método implícito se aproxima da solução o método explícito dá um resultado completamente disparatado. Os problemas que não podem ser resolvidos por métodos explícitos são chamados *stiff* e ocorrem com muita frequência em problemas de Engenharia Química (ver Hairer e Wanner (1991)).

6.4 Sistemas de equações diferenciais

A teoria apresentada nas secções precedentes pode ser facilmente generalizadas para sistemas de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Todos os métodos numéricos apresentados podem ser adaptados ao cálculo da solução aproximada do PCI

$$\begin{cases} Y'(t) = F(t, Y), & t \in [a, b], \\ Y(a) = \alpha. \end{cases} \quad (6.12)$$

onde

$$Y(t) = \begin{bmatrix} Y_1(t) \\ Y_2(t) \\ \vdots \\ Y_N(t) \end{bmatrix}, \quad F(x) = \begin{bmatrix} F_1(t, Y) \\ F_2(t, Y) \\ \vdots \\ F_N(t, Y) \end{bmatrix}.$$

Os métodos numéricos irão, neste caso, determinar aproximações $Y^{(i)}$ para $Y(t_i)$. O método de Euler, por exemplo, é dado por

$$Y^{(i+1)} = Y^{(i)} + hF(t_i, Y^{(i)}).$$

Equações diferenciais de ordem superior a um. Uma situação importante onde surgem sistemas de equações diferenciais é quando pretendemos resolver uma equação diferencial de ordem superior a um. Note-se que qualquer equação diferencial de ordem N pode ser escrita como um sistema de N equações diferenciais de primeira ordem. A forma como essa passagem se processa é bastante simples e pode ser facilmente compreendida com a ajuda de um exemplo.

Exemplo 6.15 Consideremos o problema de condição inicial

$$y'' - 3y' + 2y = 0, \quad y(0) = y'(0) = 1.$$

Efectuando a mudança de variável $z = y'$ obtemos o problema de condição inicial de primeira ordem

$$\begin{cases} y'(t) = z \\ z'(t) = 3z - 2y \\ y(0) = 1 \\ z(0) = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}'(t) = \begin{bmatrix} z \\ 3z - 2y \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \end{cases}$$

Exercício 6.4.1 Converta num sistema de equações diferenciais de primeira ordem o problema

$$y''' - 0.1(1 - y^2)y' + y = 0, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = y''(0) = 0.$$

Resolução: Efectuando a mudança de variável $z = y'$ e $w' = y''$ obtemos o problema de condição inicial de primeira ordem

$$\begin{cases} y'(t) = z \\ z'(t) = w \\ w'(t) = 0.1(1 - y^2)z - y \\ y(0) = 1 \\ z(0) = 0 \\ w(0) = 0 \end{cases}.$$

Exercício 6.4.2 Considere a equação diferencial $y'' + 4ty' + 2y^2 = 0$ com condições iniciais $y(0) = 1$ e $y'(0) = 0$. Com $h = 0.1$, utilize o método de Euler e de Heun para obter aproximações para $y(0.2)$ e $y'(0.2)$.

Resolução: Seja $z = y'$. Assim o nosso problema é equivalente a

$$\begin{cases} y'(t) = z \\ z'(t) = -4tz - 2y^2 \\ y(0) = 1 \\ z(0) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}'(t) = \begin{bmatrix} z \\ -4tz - 2y^2 \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{cases}$$

Seja

$$F\left(t, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} z \\ -4tz - 2y^2 \end{bmatrix}.$$

1. Método de Euler

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0) = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0.1) \approx \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)} = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)} + hF\left(t_0, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)}\right) = \begin{bmatrix} 1 \\ -0.2 \end{bmatrix};$$

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0.2) \approx \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(2)} = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)} + hF\left(t_1, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)}\right) = \begin{bmatrix} 0.98 \\ -0.392 \end{bmatrix}.$$

Temos assim que $y(0.2) \approx 0.98$ e $y'(0.2) \approx -0.392$.

2. Método de Heun

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)} = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0.1) \approx \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)} = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)} + \frac{h}{2}[K_1 + K_2],$$

onde

$$K_1 = F\left(t_0, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)}\right) = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$K_2 = F\left(t_0 + h, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(0)} + hK_1\right) = \begin{bmatrix} -0.2 \\ -1.92 \end{bmatrix}.$$

Logo

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}(0.1) \approx \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.99 \\ -0.196 \end{bmatrix}.$$

Continuando a aplicação do método temos

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} (0.2) \approx \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(2)} = \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)} + \frac{h}{2}[K_1 + K_2],$$

onde

$$K_1 = F\left(t_1, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)}\right) = \begin{bmatrix} 0.196 \\ -1.8818 \end{bmatrix},$$

$$K_2 = F\left(t_1 + h, \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(1)} + hK_1\right) = \begin{bmatrix} -0.38418 \\ -1.6335 \end{bmatrix}.$$

Logo

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} (0.2) \approx \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.988059 \\ -0.371765 \end{bmatrix}.$$

Temos assim que $y(0.2) \approx 0.988059$ e $y'(0.2) \approx -0.371765$.

Exercício 6.4.3 Adapte o algoritmo 6.2 a sistemas de equações diferenciais.

6.5 Problemas com condições de fronteira

Na secção anterior estudámos as equações diferenciais ordinárias no contexto dos sistema dinâmicos em que a variável independente natural é o tempo (nem sempre assim é). Vamos agora considerar o estudo orientado para regimes estacionários em que o objectivo consiste em determinar a distribuição espacial de uma grandeza.

Exemplo 6.16 Um problema comum em Engenharia Civil tem a ver com a deflexão de uma barra de secção rectangular sujeita a uma carga uniforme quando os extremos estão fixos. A equação diferencial que serve de modelo a esta situação física é da forma

$$w'' = \frac{S}{EI}w + \frac{qx}{2EI}(x - l),$$

onde $w = w(x)$ é a deflexão no ponto que dista x do extremo esquerdo da barra, e l , q , E , S e I representam, respectivamente, o comprimento da barra, a intensidade da carga uniforme, o módulo da elasticidade, a tensão nos extremos e o momento central de inércia. Uma vez que os extremos da barra estão fixos, temos associadas a esta equação diferencial as equações de fronteira

$$w(0) = w(l) = 0.$$

Quando a barra é feita de material uniforme EI é uma constante e como tal a solução da equação é imediata. Caso contrário $I = I(x)$ e temos que usar métodos numéricos para determinar uma aproximação para a solução.

Os problemas físicos que dependem de uma posição no espaço em vez de um instante no tempo são muitas vezes descritos em termos de equações diferenciais com condições impostas

em mais do que um ponto: **problemas com condições de fronteira (PCF)**. Os PCF que iremos considerar nesta secção envolvem uma equação diferencial ordinária de segunda ordem

$$y'' = f(x, y, y'), \quad x \in (a, b), \quad (6.13)$$

e as condições de fronteira

$$\begin{cases} \alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = \gamma_1, \\ \alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = \gamma_2, \end{cases} \quad (6.14)$$

com $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2$. Estas condições de fronteira podem ser de três tipos:

1. Dirichlet, se $\beta_1 = \beta_2 = 0$;
2. Neumann, se $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$;
3. Robin ou mistas, se $|\alpha_1| + |\alpha_2| \neq 0$ e $|\beta_1| + |\beta_2| \neq 0$.

Quando $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$ dizemos que as condições de fronteira são homogêneas. No caso em que a equação (6.13) é da forma

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \quad x \in (a, b), \quad (6.15)$$

dizemos que (6.13)–(6.14) é um problema com condições de fronteira linear.

Tal como no caso dos problemas de condição inicial também aqui se torna importante saber em que condições (6.13)–(6.14) tem solução única. Esse estudo foge ao âmbito deste curso e como tal não irá ser apresentado. No entanto, para problemas com condição de fronteira lineares a teoria é mais simples e, a título ilustrativo, iremos considerar apenas o seguinte teorema.

Teorema 6.17 *Sejam $q, r \in C([a, b])$ e $q \geq 0$. Então o PCF linear*

$$\begin{cases} -y'' + q(x)y = r(x), & x \in (a, b), \\ y(a) = y(b) = 0, \end{cases} \quad (6.16)$$

tem uma única solução $y \in C^2([a, b])$.

Demonstração: Ver Kress (1998). \square

6.5.1 Método das diferenças finitas

Um método muito usado para determinar soluções aproximadas do PCF (6.13)–(6.14) consiste em substituir as derivadas que nela intervêm por fórmulas de diferenças finitas.

Suponhamos que o problema (6.13)–(6.14) admite uma e uma só solução e consideremos a partição

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b \quad (6.17)$$

do intervalo $[a, b]$. O método das diferenças finitas permite-nos obter aproximações y_i , $i = 1, \dots, n$, para os valores da solução nos pontos da partição, isto é, $y_i \approx y(x_i)$, $i = 1, \dots, n$. Por uma questão de simplificação da abordagem vamos considerar a partição (6.17) uniforme, ou seja, tal que $x_i - x_{i-1} = h$, $i = 1, \dots, n$.

Exemplo 6.18 Pretende-se obter a solução aproximada do problema

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

usando o método das diferenças finitas com uma malha uniforme de espaçamento $h = \frac{1}{n}$.

O PCF dado pode ser escrito, para cada ponto da partição (6.17) na forma

$$\begin{cases} -y''(x_i) + y(x_i) = x_i, & i = 1, \dots, n-1, \\ y(x_0) = y(x_n) = 0, \end{cases}$$

com $x_i = ih$, $i = 0, \dots, n$.

Se aproximarmos y'' pela fórmula de diferenças centradas de segunda ordem (três pontos) temos

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

com $y_i \approx y(x_i)$, $i = 1, \dots, n-1$. Substituindo na equação temos, em cada ponto da partição, o problema (linear) aproximado

$$\begin{cases} -(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}) + h^2 y_i = ih^3, & i = 1, \dots, n-1, \\ y_0 = y_n = 0 \end{cases},$$

Notemos que o sistema linear obtido é da forma

$$Ay = b,$$

em que $b = (ih^3)_{i=1}^{n-1}$ e $A = (a_{ij})_{i,j=1}^{n-1}$ com

$$a_{ij} = \begin{cases} h^2 + 2, & i = j \\ -1, & j = i-1, j = i+1 \\ 0, & |j-i| > 1 \end{cases}.$$

A matriz do sistema é tridiagonal, simétrica e estritamente diagonal dominante por linhas; logo é invertível. Fica deste modo garantida a existência e unicidade de solução.

Considerando $n = 4$, ou seja $h = \frac{1}{4}$, obtemos

$$\begin{bmatrix} 2.03125 & -1 & 0 \\ -1 & 2.03125 & -1 \\ 0 & -1 & 2.03125 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/128 \\ 1/64 \\ 3/128 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 0.03484 \\ 0.05633 \\ 0.05004 \end{bmatrix}.$$

Vamos considerar, tal como no exemplo anterior, o PCF linear (6.15) com condições de fronteira (6.14) de Dirichlet ($\alpha_1 = \alpha_2 = 1$, $\beta_1 = \beta_2 = 1$). Este problema pode ser escrito, para cada ponto da partição (6.17), na forma

$$\begin{cases} y''(x_i) = p(x_i)y'(x_i) + q(x_i)y(x_i) + r(x_i), & i = 1, \dots, n-1, \\ y(x_0) = \gamma_1, y(x_n) = \gamma_2, \end{cases}$$

com $x_i = ih$, $i = 0, \dots, n$. Substituindo as derivadas pelas fórmulas de diferenças centradas de segunda ordem

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

e

$$y''(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} - \frac{h^2}{12} y^{(4)}(\eta_i), \quad \eta_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}),$$

obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} = p(x_i) \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} + q(x_i)y(x_i) \\ \quad + r(x_i) - \frac{h^2}{12} [2p(x_i)y'''(\xi_i) - y^{(4)}(\eta_i)], \quad i = 1, \dots, n-1, \\ y(x_0) = \gamma_1, y(x_n) = \gamma_2. \end{array} \right.$$

Se tomarmos $y_i \approx y(x_i)$, $i = 1, \dots, n-1$, um método de diferenças finitas com erro $\mathcal{O}(h^2)$ pode ser definido pelo sistema linear

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - p(x_i) \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - q(x_i)y_i = r(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1, \\ y_0 = \gamma_1, y_n = \gamma_2, \end{array} \right.$$

ou, de forma equivalente,

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right)y_{i-1} - \left(2 + h^2q(x_i)\right)y_i + \left(1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right)y_{i+1} = h^2r(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1, \\ y_0 = \gamma_1, y_n = \gamma_2, \end{array} \right.$$

Notemos que o sistema linear obtido é da forma

$$AY = B, \tag{6.18}$$

em que $Y = [y_1, y_2, \dots, y_{n-2}, y_{n-1}]^T$,

$$A = \begin{bmatrix} -2 - h^2q(x_1) & 1 - \frac{h}{2}p(x_1) & & & & & & \\ 1 + \frac{h}{2}p(x_2) & -2 - h^2q(x_2) & 1 - \frac{h}{2}p(x_2) & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & 1 + \frac{h}{2}p(x_{n-2}) & -2 - h^2q(x_{n-2}) & 1 - \frac{h}{2}p(x_{n-2}) & & \\ & & & & 1 + \frac{h}{2}p(x_{n-1}) & -2 - h^2q(x_{n-1}) & & \end{bmatrix}$$

e

$$B = \begin{bmatrix} h^2r(x_1) - \left(1 + \frac{h}{2}p(x_1)\right)\gamma_1 \\ h^2r(x_2) \\ \vdots \\ h^2r(x_{n-2}) \\ h^2r(x_{n-1}) - \left(1 - \frac{h}{2}p(x_{n-1})\right)\gamma_2 \end{bmatrix}.$$

A questão que naturalmente se coloca é a de saber se o sistema (6.18) tem solução única. Para responder a essa questão considerere-se o seguinte exercício cuja resolução pode ser vista em Burden e Faires (1988).

Exercício 6.5.1 Suponhamos que $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ é uma matriz de ordem n , tridiagonal, com $a_{i,i-1}, a_{i,i+1} \neq 0$, para cada $i = 2, \dots, n-1$. Se

$$|a_{11}| > |a_{12}|, \quad |a_{nn}| > |a_{n,n-1}|$$

e

$$|a_{ii}| \leq |a_{i,i-1}| + |a_{i,i+1}|, \quad i = 2, \dots, n-1,$$

então A é não singular.

O resultado estabelecido neste exercício permite concluir, de forma imediata, o seguinte teorema.

Teorema 6.19 *Considere-se o PCF linear (6.15) com condições de fronteira (6.14) de Dirichlet ($\alpha_1 = \alpha_2 = 1, \beta_1 = \beta_2 = 1$) e com p, q, r funções contínuas em $[a, b]$. Se $q(x) \geq 0$, para todo o $x \in [a, b]$, então o sistema tridiagonal (6.18) tem solução única desde que $h < 2/L$, onde*

$$L = \max_{x \in [a, b]} |p(x)|.$$

Pode dar-se o caso (muito frequente) das condições de fronteira não serem de Dirichlet mas de Neumann ou mistas. Suponhamos que temos o PCF

$$\begin{cases} y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), & x \in (a, b), \\ y'(a) = \gamma_1, y'(b) = \gamma_2. \end{cases} \quad (6.19)$$

Considerando, tal como para o caso anterior, a substituição das derivadas que aparecem na equação diferencial pelas fórmulas de diferenças centradas de segunda ordem obtemos

$$\left(1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right) y_{i-1} + \left(2 + h^2q(x_i)\right) y_i - \left(1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right) y_{i+1} = h^2r(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1,$$

com $y_i \approx y(x_i)$, $i = 1, \dots, n-1$. Quanto às equações de fronteira, o mais comum é considerarem-se diferenças progressivas na discretização de $y'(a)$ e regressivas na discretização de $y'(b)$. Se usarmos diferenças progressivas e regressivas com dois pontos (ordem um) obtemos

$$y_0 = y_1 - h\gamma_1, \quad y_n = y_{n-1} + h\gamma_2,$$

onde $y_0 \approx y(x_0)$ e $y_n \approx y(x_n)$. Deste modo, o sistema linear a resolver difere, em relação ao caso em que considerámos condições de Dirichlet, apenas nas primeira e última linhas. Neste caso, a primeira e a última linha do sistema linear a resolver são, respectivamente,

$$\left(-1 + \frac{h}{2}p(x_1) - h^2q(x_1)\right) y_1 + \left(1 - \frac{h}{2}p(x_1)\right) y_2 = h^2r(x_1) + h \left(1 + \frac{h}{2}p(x_1)\right) \gamma_1$$

e

$$\left(1 + \frac{h}{2}p(x_{n-1})\right) y_{n-2} + \left(-1 - \frac{h}{2}p(x_{n-1}) - h^2q(x_{n-1})\right) y_{n-1} = h^2r(x_{n-1}) - h \left(1 - p(x_{n-1})\frac{h}{2}\right) \gamma_2$$

Finalmente, façamos uma pequena abordagem ao caso não linear. Consideremos o problema não linear geral (6.13) com condições de fronteira (6.14) de Dirichlet ($\alpha_1 = \alpha_2 = 1$, $\beta_1 = \beta_2 = 1$). Tal como no caso linear, vamos substituir as derivadas que aparecem na equação diferencial pelas fórmulas de diferenças centradas de segunda ordem. Obtemos assim

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} = f\left(x_i, y(x_i), \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. - \frac{h^2}{12} \left(2p(x_i)y'''(\xi_i) - y^{(4)}(\eta_i) \right) \right), \quad i = 1, \dots, n-1, \\ y(x_0) = \gamma_1, y(x_n) = \gamma_2, \end{array} \right.$$

com $\xi_i, \eta_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$. O método de diferenças finitas que resulta quando se desprezam os termos $\mathcal{O}(h^2)$ das fórmulas de diferenças centradas e se usam as condições de fronteira é

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right), \quad i = 1, \dots, n-1, \\ y_0 = \gamma_1, y_n = \gamma_2, \end{array} \right.$$

com $y_i \approx y(x_i)$, $i = 1, \dots, n-1$. Temos então necessidade de resolver um sistema não linear da forma

$$F(X, Y) = 0,$$

onde $X = [x_1, x_2, \dots, x_{n-2}, x_{n-1}]^T$, $Y = [y_1, y_2, \dots, y_{n-2}, y_{n-1}]^T$ e

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(X, Y) = -2y_1 + y_2 - h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2 - \gamma_1}{2h}\right) + \gamma_1, \\ f_i(X, Y) = y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} - h^2 f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right), \quad i = 2, \dots, n-2, \\ f_{n-1}(X, Y) = y_{n-2} - 2y_{n-1} - h^2 f\left(x_{n-1}, y_{n-1}, \frac{\gamma_2 - y_{n-2}}{2h}\right) + \gamma_2. \end{array} \right.$$

Prova-se (ver Burden e Faires (1988)) que este sistema não linear tem solução única se $h < 2L$ onde

$$L = \max_{x \in [a, b]} |f_{y'}(x, y, y')|.$$

A sua solução pode ser obtida, de forma aproximada, pelo método de Newton estudado no Capítulo 2.

6.6 Exercícios de aplicação à engenharia

Exercício 6.6.1 Um projectil é lançado da superfície terrestre com uma velocidade V . Supondo que não há arrasto a equação do movimento é

$$\nu \frac{d\nu}{dr} = -g \frac{R^2}{r^2},$$

onde ν é a velocidade à distância r do centro da Terra que tem raio R . Considerando $g = 9.81 \text{ m/seg}^2$, $R = 6.37 \times 10^6 \text{ m}$ e $V = 15000 \text{ m/seg}$, calcule a velocidade quando $r = 2R$.

Exercício 6.6.2 Uma solução líquida flui de forma constante ao longo de um tubo na direcção x . Alguns dos solutos contidos na solução difundem-se através da parede do tubo reduzindo a concentração z no tubo. A concentração z é dada por

$$\frac{dz}{dx} = -z(0.2 + \sqrt{z})e^{-0.03x}.$$

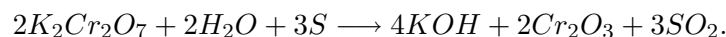
Se tomarmos $z = 1.5$ em $x = 2$ determine o valor de z em $x = 2.4$.

Exercício 6.6.3 Uma quantidade de 10 quilogramas de material é despejada num reservatório contendo 60 quilogramas de água. A concentração da solução, c (em percentagem), vem dada em função do tempo, t (em segundos), por

$$(60 - 1.2112c)c' = \frac{k}{3}(200 - 14c)(100 - 4c),$$

onde k , o coeficiente de transferência de massa, é igual a 0.0589. A condição inicial em $t = 0$ é $c = 0$. Determine a relação entre c e t .

Exercício 6.6.4 A equação química irreversível na qual duas moléculas de dicromato de potássio ($K_2Cr_2O_7$) sólido, duas moléculas de água (H_2O) e três átomos de enxofre (S) sólido dão origem a três moléculas de dióxido de enxofre (SO_2) gasoso, quatro moléculas de hidróxido de potássio (KOH) sólido e duas moléculas óxido de crómio (Cr_2O_3) sólido pode ser representada, simbolicamente, pelo esquema



Se existirem inicialmente n_1 moléculas de $2K_2Cr_2O_7$, n_2 moléculas de H_2O e n_3 moléculas de S a equação seguinte descreve a quantidade $x(t)$ de KOH ao fim de um tempo t (em segundos)

$$x' = k \left(n_1 - \frac{x}{2} \right)^2 \left(n_2 - \frac{x}{2} \right)^2 \left(n_3 - \frac{3x}{4} \right)^3,$$

onde k é a velocidade da reacção (constante). Se $k = 6.22 \times 10^{-19}$, $n_1 = n_2 = 1000$ e $n_3 = 1500$, quantas unidades de hidróxido de potássio serão formadas ao fim de 2 segundos?

Exercício 6.6.5 Na teoria da proliferação de uma doença contagiosa, podem ser usadas equações diferenciais relativamente elementares para prever o número de indivíduos infectados na população em cada instante, desde que sejam efectuadas simplificações apropriadas. Esta teoria foi estudada por N.T.J. Bayley em 1957 e 1967 em dois livros, um sobre matemática aplicada à medecina ('The Mathematical Approach to Biology and Medicine', John Wiley & Sons, NY,

1967) e outro sobre a teoria matemática das epidemias ('The Mathematical Theory of Epidemics', Hafner, NY, 1957).

Em particular, consideremos que todos os indivíduos numa população fixa têm uma probabilidade igual de ser infectados e que uma vez portadores da doença permanecerão sempre nessa condição. Se $x(t)$ denotar o número de indivíduos susceptíveis de contrair a doença no instante t e $y(t)$ o número de indivíduos infectados, é razoável assumir que a razão à qual o número de infectados varia é proporcional ao produto de $x(t)$ por $y(t)$ visto que a razão depende tanto do número de infectados como do número de susceptíveis presentes, para cada t . Se a população for suficientemente grande para considerarmos que $x(t)$ e $y(t)$ são variáveis contínuas, o problema pode ser expresso na forma

$$y'(t) = kx(t)y(t),$$

onde k é uma constante e $x(t) + y(t) = m$ é a população total. Esta equação pode ser reescrita por forma a depender apenas de $y(t)$. Assim

$$y'(t) = ky(t)(m - y(t)). \quad (6.20)$$

1. Assumindo que $m = 100000$, $y(0) = 1000$, $k = 2 \times 10^{-6}$ e o tempo medido em dias, determine o número de indivíduos infectados ao fim de 30 dias.
2. A equação (6.20) é conhecida por equação de Bernoulli e pode ser transformada numa equação diferencial linear em $z(t)$ se efectuarmos a mudança de variável $z(t) = (y(t))^{-1}$. Usando esta técnica, determine a solução exacta $y(t)$ da equação diferencial (6.20), com as hipóteses consideradas no ponto anterior, e compare-a com a solução numérica obtida.
3. Determine $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t)$. Este resultado está de acordo com a sua intuição?

Exercício 6.6.6 No exercício anterior, todos os indivíduos infectados permanecem na população ajudando a difundir a doença. Uma situação mais realista consiste em introduzir uma nova variável $z(t)$ para representar tanto o número de indivíduos que são retirados da população infectada num determinado instante t , por isolamento, como os que são tratados (e consequentemente tornados imunes) ou os que morrem. O problema posto nestes termos é, naturalmente, mais complicado mas Bayley mostrou que a solução aproximada do problema pode ser dada na forma

$$x(t) = x(0)e^{-(k_1/k_2)z(t)} \quad \text{e} \quad y(t) = m - x(t) - z(t),$$

onde k_1 e k_2 são, respectivamente, as taxas de crescimento de $y(t)$ e de $z(t)$, sendo $z(t)$ determinada pela equação diferencial

$$z'(t) = k_2 \left(m - z(t) - x(0)e^{-(k_1/k_2)z(t)} \right).$$

Como não é possível determinar a solução exacta deste problema, temos que recorrer à solução numérica. Assim, determine uma aproximação para $z(30)$, $y(30)$ e $x(30)$ assumindo que $m = 100000$, $x(0) = 99000$, $k_1 = 2 \times 10^{-6}$ e $k_2 = 10^{-4}$.

Exercício 6.6.7 O estudo de modelos matemáticos para estimar a evolução de uma população de espécies que competem entre si teve a sua origem no início do século com os trabalhos de A.J. Lotka e V. Volterra. Consideremos o problema de estimar a população constituída por duas espécies, uma das quais é predadora, cuja população no instante t é $x_2(t)$, e que se alimenta

comendo a outra espécie, a que chamamos presa e cuja população é $x_1(t)$. Este problema é usualmente designado por predador-presa. Vamos assumir que a presa possui sempre uma quantidade de comida adequada e que a sua taxa de natalidade em todos os instantes é proporcional ao número de presas vivas nesse instante; isto é, a taxa de natalidade (presa) = $k_1x_1(t)$. A taxa de mortalidade das presas depende tanto do número de presas como de predadores vivos nesse instante. Por uma questão de simplicidade vamos assumir que a taxa de mortalidade (presa) = $k_2x_1(t)x_2(t)$. A taxa de natalidade dos predadores, por outro lado, depende da quantidade de comida existente, $x_1(t)$, assim como do número de predadores existentes para fins de reprodução. Por essas razões vamos assumir que a taxa de natalidade (predador) = $k_3x_1(t)x_2(t)$. A taxa de mortalidade dos predadores será tomada proporcionalmente ao número de predadores vivos nesse instante; isto é, a taxa de mortalidade (predador) = $k_4x_2(t)$.

A variação da população de presas e predadores pode ser dada pelas seguintes equações diferenciais

$$\begin{cases} x_1'(t) = k_1x_1(t) - k_2x_1(t)x_2(t) \\ x_2'(t) = k_3x_1(t)x_2(t) - k_4x_2(t) \end{cases}.$$

Assumindo que a população inicial de presas é 1000 e a de predadores 200, e que as constantes $k_1 = 3$, $k_2 = 0.002$, $k_3 = 0.0006$ e $k_4 = 0.5$, trace o gráfico das soluções deste problema e descreva o fenómeno físico representado. Será que o problema possui alguma solução estável? Se sim, para que valores de x_1 e x_2 é que tal acontece?

Exercício 6.6.8 Num livro intitulado 'Looking at History Through Mathematics', MIT Press, Cambridge MA, 1968, N. Rashevsky considerou um modelo para um problema envolvendo o evolução de não conformistas³ na sociedade. Suponhamos que uma sociedade tem uma população de $x(t)$ indivíduos no instante t , em anos, e que todos os não conformistas que acasalam com outros não conformistas têm uma descendência que também é não conformista. Por outro lado, para todas as outras descendências, existe uma proporção fixa r que são ainda não conformistas. Se as taxas de natalidade e mortalidade para todos os indivíduos se assumir como sendo as constantes n e m , respectivamente, e se conformistas e não conformistas acasalarem de forma aleatória, o problema pode ser expresso pelas equações diferenciais

$$\begin{cases} x'(t) = (n - m)x(t) \\ y'(t) = (n - m)y(t) + rn(x(t) - y(t)) \end{cases},$$

onde $y(t)$ denota o número de não conformistas na população no instante t .

1. Se a variável $p(t) = y(t)/x(t)$ for introduzida para representar a proporção de não conformistas na sociedade no instante t , mostre que o sistema de equações diferenciais se reduz a

$$p'(t) = rn(1 - p(t)).$$

2. Assumindo que $p(0) = 0.01$, $n = 0.002$, $m = 0.015$ e $r = 0.1$, aproxime a solução $p(t)$ para os primeiros 50 anos.
3. Resolva a equação diferencial para $p(t)$ de forma exacta, e compare o resultado com a solução numérica.

³Conformista é a pessoa que adopta ou segue o conformismo (anglicanismo).

Exercício 6.6.9 Consideremos um pêndulo simples constituído por uma bola uniforme de massa m e uma barra fina de comprimento l e massa negligenciável. Se considerarmos que a resistência do ar é proporcional ao quadrado da velocidade angular do pêndulo, a equação do movimento é dada por

$$\theta'' + 2k(\theta')^2 = -\frac{g}{l} \sin \theta,$$

sendo θ o ângulo agudo que a barra do pêndulo faz com a vertical. Considerando que em $t = 0$ se tem $\theta = \frac{\pi}{3}$ determine o valor de θ e de θ' nos instantes (em minutos) $t_i = ih$, com $h = 0.05$ e $i = 0, 1, \dots, 50$.

Exercício 6.6.10 A equação de Van der Pol, que aparece na electrónica, é

$$x'' + (1 - x^2)x' + x = 0.$$

Com as condições iniciais $x(0) = 0.5$ $x'(0) = 0$, determine x , x' e x'' para nos instantes $t_i = ih$, com $h = 0.1$ e $i = 0, 1, \dots, 40$.

Exercício 6.6.11 Um cão, num campo ao lado de uma estrada, vê o dono a caminhar nela e corre para ele. Supondo que o cão corre sempre na direcção do dono e que a estrada é rectilínea, a equação que define a trajectória por ele seguida é definida pela equação

$$x \frac{d^2y}{dx^2} = c \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2},$$

sendo c a razão entre as velocidades do homem e do cão. Supondo que $c = 0.5$ e que inicialmente o cão se encontra parado na posição $(x, y) = (1, 0)$ e o dono na posição $(x, y) = (0, 0)$, determine em que posição termina a corrida.

Exercício 6.6.12 Um circuito eléctrico que é formado por um condensador de capacidade eléctrica constante $C = 1.1$ farad em série com uma resistência constante de $R_0 = 2.1$ ohm. A voltagem $E(t) = 110 \sin t$ é aplicada no instante $t = 0$. À medida que o calor aumenta, a resistência torna-se função da corrente I ,

$$R(t) = R_0 + kI(t),$$

com $k = 0.9$. A equação diferencial para I é

$$\left(1 + \frac{2k}{R_0} i(t)\right) I'(t) + \frac{1}{R_0 C} I(t) = \frac{1}{R_0} E'(t).$$

Determine a corrente I ao fim de 2 segundos, assumindo que $I(0) = 0$.

6.7 Referências bibliográficas

- A.C. Bajpai; L.R. Mustoe e D. Walker (1992), *Engineering Mathematics*, 2th ed., John Wiley & Sons, Chichester.
- R.L. Burden e J.D. Faires (1988), *Numerical Analysis*, 4th ed., PWS-Kent, Boston.
- B.J. Caraça (1989), *Conceitos Fundamentais da Matemática*, 9ª ed., Livraria Sá Costa, Lisboa.

- S.D. Conte e C. de Boor (1980), *Elementary Numerical Analysis*, 3th ed., McGraw-Hill, New York.
- J.A. Ferreira e M.F. Patrício (1999), *Análise Numérica, Textos de Apoio*, DMUC, Coimbra.
- H. Goldstine (1977), *A History of Numerical Analysis from 16th Through the 19th Century*, Springer-Verlag, New York.
- E. Hairer, S.P. Nørsett e G. Wanner (1987), *Solving Ordinary Differential Equations I*, Springer Series in Comput. Mathematics, Vol. 8, Springer-Verlag, Heidelberg.
- E. Hairer e G. Wanner (1991), *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer Series in Comput. Mathematics, Vol. 14, Springer-Verlag, Heidelberg.
- R. Kress (1998), *Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York.
- J.R. Rice (1983), *Numerical Methods, Software, and Analysis*, McGraw-Hill, Tokyo.
- M. Rosa (1992), *Tópicos de Análise Numérica*, Dep. Matemática, Univ. Coimbra.
- M.R. Valença (1988), *Métodos Numéricos*, INIC, Braga.

Conteúdo

1	Preliminares	2
1.1	Introdução	2
1.2	Breve referência histórica	4
1.3	Noções e teoremas básicos	5
1.4	Breve referência à teoria dos erros	6
1.4.1	Erros de arredondamento	7
1.4.2	Erros de truncatura	9
1.5	Exercícios de aplicação à engenharia	11
1.6	Referências bibliográficas	12
2	Solução numérica de equações e sistemas não lineares	13
2.1	Breve referência histórica	13
2.2	Introdução	14
2.3	Métodos iterativos	16
2.4	Determinação da aproximação inicial	18
2.4.1	Localização gráfica	18
2.4.2	Método de Rolle	19
2.5	Cálculo das raízes	21
2.5.1	Método da bissecção	21
2.5.2	Método de Newton	24
2.5.3	Método do ponto fixo	30
2.6	Zeros de polinómios	35
2.6.1	Resultados básicos	35
2.6.2	Cálculo de valores de um polinómio. Factorização	36
2.6.3	Cálculo dos zeros	38
2.7	Sistemas de equações não lineares (breve introdução)	39
2.7.1	Introdução	39
2.7.2	Método iterativo de Newton	42
2.8	Exercícios de aplicação à engenharia	45
2.9	Referências bibliográficas	47
3	Sistemas de equações lineares	48
3.1	Breve referência histórica	48
3.2	Introdução	49
3.3	Classes de matrizes	50
3.4	Métodos directos: revisão	50

3.5	Métodos iterativos	53
3.5.1	Normas de matrizes	55
3.5.2	Convergência dos métodos iterativos	57
3.5.3	Métodos de Jacobi e Gauss-Seidel	58
3.6	Condicionamento de matrizes	60
3.7	Exercícios de aplicação à engenharia	61
3.8	Referências bibliográficas	63
4	Interpolação polinomial	64
4.1	Breve referência histórica	64
4.2	Introdução	65
4.3	Interpolação polinomial de Lagrange	66
4.3.1	Existência e unicidade. Fórmula de Lagrange	66
4.3.2	Erro de interpolação	69
4.3.3	Diferenças divididas	72
4.3.4	Fórmula de Newton das diferenças divididas	73
4.3.5	Interpolação em pontos igualmente distanciados	76
4.3.6	Interpolação segmentada linear	77
4.4	Interpolação de Hermite	79
4.4.1	Existência e unicidade	79
4.4.2	Erro de interpolação	81
4.4.3	Interpolação segmentada cúbica	82
4.4.4	Polinômios osculadores	82
4.5	Interpolação bidimensional de Lagrange	84
4.6	Exercícios de aplicação à engenharia	87
4.7	Referências bibliográficas	88
5	Derivação e integração numérica	89
5.1	Breve referência histórica	89
5.2	Derivação numérica	90
5.2.1	Aproximação da primeira derivada	90
5.2.2	Aproximação da segunda derivada. Algumas fórmulas	93
5.2.3	Aproximação de derivadas de ordem superior	94
5.3	Integração numérica	95
5.3.1	Fórmulas de Newton-Cotes	95
5.3.2	Fórmulas compostas	98
5.4	Exercícios de aplicação à engenharia	102
5.5	Referências bibliográficas	103
6	Métodos numéricos para problemas diferenciais ordinários	104
6.1	Breve referência histórica	104
6.2	Introdução	105
6.3	Problemas com condição inicial	106
6.3.1	Existência e unicidade de solução. Condicionamento	106
6.3.2	Métodos numéricos	109
6.3.3	Métodos baseados na série de Taylor	110
6.3.4	Métodos de Runge-Kutta	112

6.3.5	Estudo do erro	115
6.3.6	Métodos de passo único implícitos	119
6.4	Sistemas de equações diferenciais	122
6.5	Problemas com condições de fronteira	124
6.5.1	Método das diferenças finitas	125
6.6	Exercícios de aplicação à engenharia	130
6.7	Referências bibliográficas	133