# ELEMENTOS SOBRE

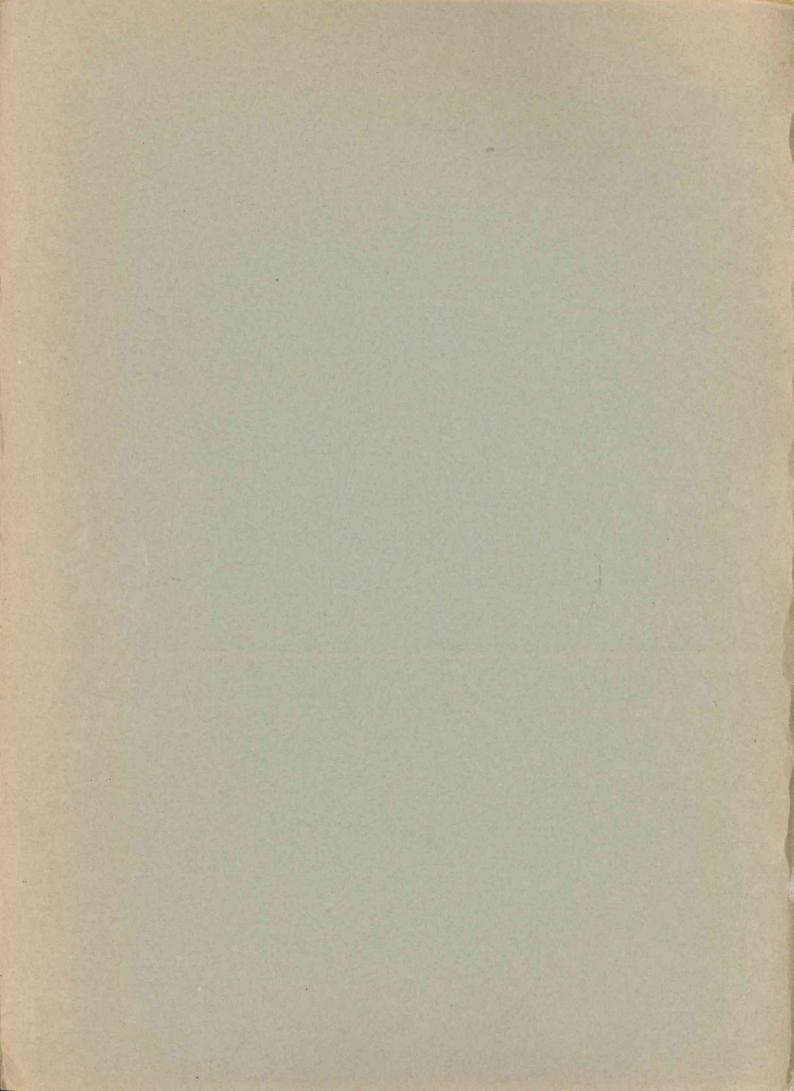
## INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

DAS

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS



CENTRO UNIVERSITÁRIO DO PORTO

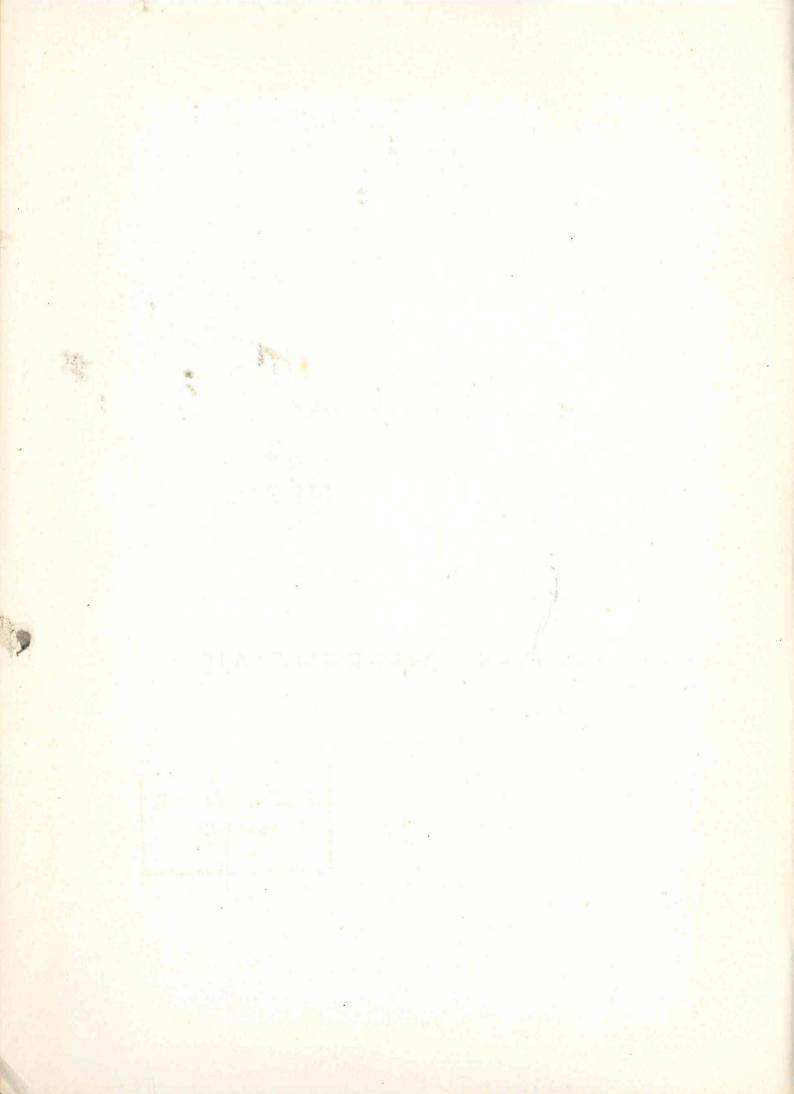


### ELEMENTOS SOBRE

### INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

DAS

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS



### ELEMENTOS SOBRE

## INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

DAS

## EQUAÇÕES DIFERENCIAIS



CENTRO UNIVERSITÁRIO DO PORTO

# INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

#### Breve introdução

Suponhamos que nos propomos determinar as linhas planas, de equação y = y(x), tais que o coeficiente angular da tangente, em cada um dos seus pontos, seja igual à ordenada.

A equação que traduz a propriedade enunciada é

$$\frac{dy}{dx} = y \qquad \text{ou} \qquad y' - y = 0.$$

O eixo dos x, (y=0), é uma das linhas pedidas, bem assim a curva exponencial  $y=e^x$ , como se pode verificar. Diz-se então que, quer  $y=e^x$ , quer y=0 são soluções da equação diferencial y'-y=0.

Além das soluções apresentadas, a equação admite outras, podendo todas elas ser representadas por  $y = C e^x$  (onde C é uma constante arbitrária), que se diz o *integral geral* da equação dada e representa a família das linhas que gozam da propriedade apontada.

Fixado um valor particular para a constante C, ter-se-á uma linha particular, elemento daquela família, que se diz linha integral da equação dada.

No exemplo que estamos a tratar, poderá pedir-se a linha que, satisfazendo às condições fixadas, passa num ponto qualquer  $(x_0, y_0)$  de  $R^2$ ; o valor correspondente de C é  $C = y_0 e^{-x_0}$ . Neste caso, como se verifica, por cada ponto de  $R^2$ , passa um e só um elemento da família de linhas.

Dum modo geral, uma equação da forma

$$\varphi(x, y, y', y'', \dots y^{(n)}) = 0$$

envolvendo a variável independente x, a variável dependente y e as suas n primeiras derivadas y', y'', ...  $y^{(n)}$ , diz-se uma equação diferencial de ordem n. A solução mais geral daquela equação é da forma

$$y = y (x, C_1, C_2, ... C_n)$$

dependente de n constantes arbitrárias  $C_1, C_2, \dots C_n$ .

Nas aplicações das equações diferenciais à resolução de questões técnicas, muitas vezes (para não dizer quase sempre) interessa conhecer sòmente uma solução particular da equação, isto é, a linha integral y = y(x) que satisfaz a certas condições restritivas (condições iniciais ou condições fronteira) determinantes das n constantes arbitrárias.

Assim, poderá pedir-se a solução, ou linha integral, da equação de 2.a ordem y'' + y - x = 0, que passa na origem e onde deverá ser, por exemplo,  $\frac{dy}{dx} = 1$ . Estas duas condições, ligadas a um ponto só, y(0) = 0 e y'(0) = 1, que fixamos, determinam univocamente a linha integral e chamam-se condições iniciais. Poderia, por outro lado, pedir-se, por exemplo, a linha integral daquela equação que passa nos pontos (1, 1) e (3, 2); esta outra maneira de individualizar a linha integral, à custa das chamadas condições fronteira (ligadas a dois pontos), em geral traz maiores dificuldades de cálculo, do que à custa das condições iniciais.

Só um número diminuto de tipos de equações diferenciais permite um tratamento analítico simples e as equações que ocorrem nos problemas práticos nem sempre estão incluídas naqueles tipos. Usualmente, é necessário aplicar um método numérico que permita o cálculo de valores isolados da solução, isto é, que permita fixar pontos  $(x_i, y_i)$  em número suficiente, da linha integral procurada.

Trataremos sòmente o caso das equações diferenciais de primeira ordem. As equações de ordem superior são redutíveis a sistemas de equações de 1.ª ordem.

Suporemos ainda as equações sob a forma

$$y' = f(x, y)$$

com a derivada expressa, explicitamente, em x e y e que se pretende a solução que passa num ponto  $(x_0, y_0)$ .

Para esclarecer o significado do conceito de solução de uma equação diferencial, imaginemos que se pretende a solução da equação y'-y=0 definida para  $x \ge 1$  e passando no ponto (1, 0).

Pelo que anteriormente se disse, é de esperar que a solução seja única, o que aparentemente não sucede neste caso.

Com efeito, por exemplo, a função

$$y(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } 1 \le x < 2 \\ C e^x & \text{para } x \ge 2 \end{cases}$$

além de verificar a equação diferencial, satisfaz às condições iniciais impostas e, contudo, valores diferentes atribuídos à constante C conduzem a outras tantas soluções diferentes. Notemos porém que todas essas «soluções» são funções discontínuas no ponto x=2, salvo a correspondente a C=0.

Precisemos então o que se deverá entender por solução de uma equação diferencial.

#### Definição de solução

Consideremos uma equação diferencial y'=f(x,y) sendo f(x,y) uma função contínua em x e y simultâneamente, num domínio D ( $a \le x \le b$ ,  $-\infty < y < \infty$ ).

Uma função y(x)/[a, b] diz-se solução daquela equação se admitir primeira derivada, y'(x), contínua naquele intervalo (1) e tal que

$$\forall x \in [a, b] \rightarrow y'(x) = f[x, y(x)]$$

A menos de um conjunto finito de pontos onde y'(x), podendo não estar definida, deverá admitir, contudo, limites laterais.

Outra questão que convém desde já esclarecer é: uma equação diferencial admite sempre soluções? quantas?

#### Teorema da existência e unicidade de solução

Consideremos uma equação diferencial y' = f(x, y), sendo f(x, y) contínua em x e y, simultâneamente, num domínio  $D^2$  ( $a \le x \le b$ ,  $-\infty < y < \infty$ ).

Se existir uma constante L>0 tal que, para todo o par de números reais  $y_1,\ y_2$  se verifique a desigualdade

(1) 
$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \le L|y_1 - y_2|$$
,

qualquer que seja  $x \in [a, b]$ , então, fixado um ponto qualquer  $(x_0, y_0) \in D^2$ , existe uma e só uma solução, y(x)/[a, b], contendo aquele mesmo ponto (isto é, tal que  $y(x_0) = y_0$ ).

A condição (1) costuma ser designada por condição de Lipschitz.

Antes de tratarmos da integração numérica, vamos, ràpidamente, fazer referência a dois métodos de integração [aproximados] das equações diferenciais: a integração por séries e o método das aproximações sucessivas (Picard).

#### Integração por séries

Dada a equação y' = f(x, y), se pretendermos a linha integral que contém o ponto  $(x_0, y_0)$ , admitindo que a solução pedida é susceptível de desenvolvimento em série de Taylor, segundo as potências de  $(x - x_0)$ , pode escrever-se

$$y(x) = y_0 + y'_0(x - x_0) + \frac{y''_0}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{y'''_0}{3!}(x - x_0)^3 + \dots$$

E a partir desta série poderemos calcular a solução com a precisão que se quiser.

Assim, para cálculo da solução da equação y' = x - y que contém o ponto  $x_0 = 0$ ,  $y_0 = 0$  tem-se

$$y' = x - y y'' = 1 - y' y''' = - y'' y''' = - 1 y^{(n)} = - y^{(n-1)} y^{(n)} = (-1)^n$$

vindo

$$y = \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^5}{5!} + \dots + (-1)^n \frac{x^n}{n!} + \dots$$

que fàcilmente se verifica ser o desenvolvimento em série de Machaurin da solução  $y=e^{-x}+x-1$ . Notemos que nem sempre será fácil, ou sequer possível, exprimir a série obtida em termos de funções elementares.

Um outro modo de proceder é usar o método dos coeficientes indeterminados (após garantias de convergência), escrevendo

$$y = y_0 + a_1 (x - x_0) + a_2 (x - x_0)^2 + ... + a_n (x - x_0)^n + ...$$

substituindo na equação e igualando os coeficientes das mesmas potências de  $(x-x_0)$ . Assim, no problema anterior teríamos

$$y = a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n$$

que, substituindo na equação diferencial, dá

$$a_1 + 2 a_2 x + ... + n a_n x^{n-1} + ... = x - (a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n + ...)$$

E daqui, igualando os coeficientes, vem

$$a_{1} = 0$$
  $a_{1} = 0$   
 $2 \ a_{2} = 1 - a_{1}$   $a_{2} = \frac{1}{2}$   
 $3 \ a_{3} = -a_{2}$   $a^{3} = \frac{-1}{3!}$   
 $a_{n} = -a_{n-1}$   $a_{n} = \frac{(-1)^{n}}{n!}$ 

#### Método das aproximações sucessivas ou de Picard

A equação dada é equivalente a dy = f(x, y) dx que, integrada membro a membro, conduz a

$$\int_{x_0}^{x} dy = \int_{x_0}^{x} f(x, y) dx$$

sendo  $x_0$  e x (1) pontos quaisquer de [a, b], ou

$$y(x) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x} f(x, y) dx.$$

A dificuldade está agora no facto de a função a integrar depender de y, precisamente da quantidade que nos propomos calcular. Situação análoga já nos apareceu nos métodos iterativos da resolução numérica das equações. E como então, vamos principiar por atribuir a y um valor aproximado  $y_0$  (x) e com ele calcular um valor

$$y_1(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f[x, y_0(x)] dx$$

possivelmente já mais aproximado. Com este  $y_1(x)$  calcular um  $y_2(x)$ , e assim sucessivamente através da fórmula de recorrência

$$y_n(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f[x_1 y_{n-1}(x)] dx.$$

Pois bem: como veremos a seguir, satisfeita a condição de Lipschitz, a sucessão de funções  $\{y_n(x)\}$  converge para a solução y(x) da equação que contém o ponto  $(x_0, y_0)$ .

Assim, se quisermos a solução da equação y'=x-y que contém o ponto  $x_0=0,\ y_0=1,$  usaremos a fórmula de recorrência

$$y_n(x) = 1 + \int_0^x [x - y_{n-1}(x)] dx$$
.

<sup>(</sup>¹) Sem perda de generalidade, e no sentido de simplificar notação, suporemos sempre  $x>x_{\rm o}$ .

Fazendo  $y_0(x) = y_0(x_0) = 1$ , vem sucessivamente

$$y_{1} = 1 + \int_{0}^{x} (x - 1) dx = 1 - x + \frac{x^{2}}{2}$$

$$y_{2} = 1 + \int_{0}^{x} \left[ x - \left( 1 - x + \frac{x^{2}}{2} \right) \right] dx = 1 - x + x^{2} - \frac{x^{3}}{6}$$

$$y_{3} = 1 + \int_{0}^{x} \left[ x - \left( 1 - x + x^{2} - \frac{x^{3}}{6} \right) \right] dx = 1 - x + x^{2} - \frac{x^{3}}{3} + \frac{x^{4}}{24}$$

$$y_{4} = 1 + \int_{0}^{x} \left[ x - \left( 1 - x + x^{2} - \frac{x^{3}}{3} + \frac{x^{4}}{24} \right) \right] dx = 1 - x + x^{2} - \frac{x^{3}}{3} + \frac{x^{4}}{12} - \frac{x^{5}}{120}$$

Se tivéssemos usado a integração por séries, obteríamos um resultado coincidente com  $y_4$  até ao termo de  $4^{\circ}$  grau, inclusive.

Em geral, a convergência é tanto mais rápida quanto menor for a amplitude do intervalo de integração.

No quadro a seguir mostram-se os valores das sucessivas aproximações, bem como o valor exacto da solução — que é y=2  $e^{-x}+x-1$  — para alguns valores de x

x	$y_0$	<i>y</i> <sub>1</sub>	<i>y</i> <sub>2</sub>	<i>y</i> <sub>3</sub>	<i>y</i> <sub>4</sub>	у
0,0	1	1/	1	1	1	1
0,5	1	0,625	0,729	0,711	0,713	0,713
1,0	1	0,500	0,833	0,708	0,742	0,736
1,5	1	0,625	1,187	0,836	0,984	0,946
2,0	1	1,000	1,667	1,000	1,400	1,271

Nota — Uma vez introduzido o método de Picard, é muito simples a demonstração dos teoremas da existência e da unicidade de solução.

#### Teorema da existência:

Principiaremos por provar a convergência da sucessão de funções  $\{y_n(x)\}$  e a seguir que função limite, Y(x), é realmente solução da equação.

Visto ser

 $y_n(x)=y_1(x)+[y_2(x)-y_1(x)]+...+[y_n(x)-y_{n-1}(x)]$  pode dizer-se que  $\{y_n(x)\}$  é a sucessão das somas parciais da série

$$\sum_{i=0}^{\infty} [y_{i+1}(x) - y_{i}(x)], \quad \text{com} \quad y_{0}(x) = 0.$$

A soma desta série, se existir, é o lim  $y_n(x)$ .  $n \to \infty$ 

Ora, tendo em conta que

$$y_{i+1}(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f[x, y_i(x)] dx$$

$$y_i(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f[x, y_{i-1}(x)] dx$$

vem, subtraindo membro a membro

$$y_{i+1}(x) - y_i(x) = \int_{x_0}^x [f(x, y_i) - f(x, y_{i-1})] dx$$

Sendo, como é sabido,

$$\left| \int_{x_0}^x [f(x, y_i) - f(x, y_{i-1})] dx \right| \le \int_{x_0}^x |f(x, y_i) - f(x, y_{i-1})| dx,$$

se for satisfeita a condição de Lipschitz, vem

$$\int_{x_0}^{x} \left| f(x, y_i) - f(x, y_{i-1}) \right| dx \le L \int_{x_0}^{x} \left| y_i(x) - y_{i-1}(x) \right| dx$$

e portanto

$$\left| y_{i+1}(x) - y_i(x) \right| \le L \int_{x_0}^x \left| y_i(x) - y_{i-1}(x) \right| dx$$

que, para i = 1, conduz a

$$\left| y_2(x) - y_1(x) \right| \leq L \int_{x_0}^x \left| y_1(x) - y_0(x) \right| dx = L \int_{x_0}^x \left| y_1(x) \right| dx$$

visto, como atrás se fixou,  $y_0(x) = 0$ .

Ora, sendo  $y_1(x) = y(x_0) + \int_{x_0}^x f[x, y(x_0)] dx$  uma função contínua no intervalo  $[x_0, x]$ , é necessàriamente limitada. Seja M um majorante de  $|y_1(x) - y(x_0)|$  qualquer que seja o par  $(x_0, x)$  tomado em [a, b].

Então temos

$$|y_2 - y_1| \le L M (x - x_0)$$

$$\left| y_3 - y_2 \right| \le L \int_{x_0}^{x} \left| y_2 - y_1 \right| dx \le L^2 M \int_{x_0}^{x} (x - x_0) dx = L^2 M \frac{(x - x_0)^2}{2!}$$

.....

$$\left| y_{i+1} - y_i \right| \leq L^i M \frac{(x - x_0)^i}{i!}$$

onde, para simplificar a notação,  $y_i$  representa  $y_i(x)$ .

A série  $\Sigma \mid y_{i+1} - y_i \mid$  é pois majorada pela série  $M \Sigma \frac{[L(x-x_0)]^i}{i!}$  que é convergente (e cuja soma é  $M e^{L(x-x_0)}$ ).

A sucessão de funções contínuas  $\{y_n(x)\}$  converge, pois, uniformemente em [a, b], para uma função contínua que designaremos por Y(x)/[a, b].

Para provar que esta é a linha integral que passa no ponto  $(x_0, y_0)$ , basta verificar a identidade

$$Y(x) - y_0 - \int_{x_0}^x f(x, y) dx \equiv 0$$

Ora

$$\left| \begin{array}{cccc} Y - y_0 - \int_{x_0}^x f(x, y) \ dx \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cccc} Y - y_n + \int_{x_0}^x \left[ f(x, y_{n-1}) - f(x, y) \right] \ dx \end{array} \right|$$

$$\leq \left| \begin{array}{ccccc} Y - y_n \end{array} \right| + L \int_{x_0}^x \left| \begin{array}{ccccc} y_{n-1} - y \end{array} \right| \ dx \ .$$

E dizer que  $\{y_n\}$  converge uniformemente para Y em [a, b] significa que, dado um número  $\varepsilon>0$ , é possível determinar um número natural  $n_1$  tal que para  $n>n_1$  sempre é  $\mid Y-y_n\mid <\varepsilon$  e  $\mid Y-y_{n-1}\mid <\varepsilon$  em [a, b].

E então

$$\left| Y - y_0 - \int_{x_0}^x f(x, y) \ dx \right| < \varepsilon + L \varepsilon (x - x_0) \le \varepsilon + L \varepsilon (b - a)$$

sendo o segundo membro desta desigualdade tão pequeno quanto se queira. E dizer que uma quantidade  $\left| Y - y_0 - \int_{x_0}^x f(x, y) \ dx \right|$  não negativa é menor do que um número arbitràriamente pequeno, equivale a afirmar que é, necessàriamente, nula.

#### Teorema da unicidade:

Suponhamos então que existiam duas soluções y(x) e  $y_1(x)$  da equação diferencial passando num ponto  $(x_0, y_0)$ .

Sendo soluções, verificam as igualdades

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(x, y) dx$$

$$y_1(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(x, y_1) dx$$

Subtraindo membro a membro, vem

$$y - y_1 = \int_{x_0}^{x} [f(x, y) - f(x, y_1)] dx$$

Satisfeita a condição de Lipschitz, tem-se

$$\left| y - y_1 \right| \le L \int_{x_0}^{x} \left| y - y_1 \right| dx \dots (1).$$

Sendo y(x) e  $y_1(x)$  funções contínuas em [a, b] então  $|y - y_1|$  é limitada; seja N um número positivo tal que  $N \ge |y - y_1|$ .

Assim

$$|y-y_1| \le L N (x-x_0)$$
 e de (1) vem, após a integração,  $|y-y_1| \le L^2 N \frac{(x-x_0)^2}{2!}$  que, por sua vez, substituído em (I) conduz a  $|y-y_1| \le L^3 N \frac{(x-x_0)^3}{3!}$ .

Dum modo geral pode escrever-se

$$y-y_1 \le N \frac{[L(x-x_0)]^i}{i!}$$
 cujo segundo membro é o termo geral de uma sucessão

infinitésima.

E se  $|y-y_1|$  não excede uma quantidade não negativa que pode ser tão pequena quanto se queira, necessàriamente é nulo. Isto é  $y(x) = y_1(x)$ .

Depois desta introdução às equações diferenciais vamos tratar a seguir, pròpriamente, da sua integração numérica. Estudaremos, brevemente, os dois métodos mais correntes: o método Preditor-Corrector e o método Runge--Kutta. Ambos são usados no cálculo automático, embora o último seja

habitualmente o preferido por ser, em geral, o de mais fácil programação; nos cálculos à mão ou com máquina de secretária prefere-se o primeiro método, por, em geral, envolver menor trabalho de cálculo.

Nos dois métodos, o intervalo de integração  $[x_0, x]$  é decomposto, por pontos de abcissa  $x_i$ ,  $i=1, 2, \ldots n-1$ , em intervalos parciais de igual amplitude  $x_{i+1}-x_i=h$ , no extremo de cada um dos quais se pretende calcular o valor  $y(x_i)$  da solução que, no primeiro método depende dos valores já anteriormente calculados nos pontos de abcissa  $x_{i-1}, x_{i-2}, \ldots$  e no segundo caso de valores calculados em pontos do intervalo  $[x_{i-1}, x_i]$ . Notemos desde já que algumas vezes há vantagem em, no decorrer do cálculo, alterar a amplitude h.

Como habitualmente sucede nos problemas numéricos, usaremos também fórmulas aproximadas, introduzindo erros de truncatura. Por efeito desse erro de truncatura e possívelmente dos de arredondamento, os valores calculados que daqui em diante designaremos por  $y_i$ , em geral, não coincidem com os valores exactos  $y(x_i)$ . E como no cálculo de  $y_i$  intervêm valores anteriormente calculados, há que ter ainda em conta o aspecto acumulativo dos erros, às vezes de efeito desastroso...

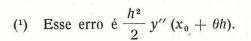
#### Método Preditor-Corrector

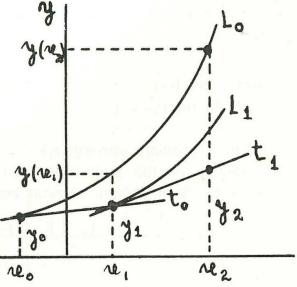
Suponhamos que a linha integral da equação y'=f(x,y) que passa no ponto  $(x_0,y_0)$  é a linha  $L_0$ . Uma primeira tentativa que se poderá fazer

para, a partir do ponto inicial  $(x_0, y_0)$ , prever a ordenada  $y(x_1)$  do ponto de  $L_0$  de abcissa  $x_1$ , poderá ser substituir a linha  $L_0$  pela tangente,  $t_0$ , naquele ponto e sobre ela tomar o ponto de abcissa  $x_1$  cuja ordenada é

$$y_1 = y_0 + (x_1 - x_0) y'_0$$
  
=  $y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$ 

cometendo-se um erro de truncatura de 2.ª ordem com respeito a h. (1)





Seguidamente, a partir deste ponto  $(x_1, y_1)$  substituir a linha integral  $L_1$ , que por ele passa, pela tangente e nesta tomar o ponto de abcissa  $x_2$ , cuja ordenada é

$$y_2 = y_1 + (x_2 - x_1) y'_1$$
  
=  $y_1 + h f(x_1, y_1)$ .

Dum modo geral será

$$y_i = y_{i-1} + h \ y'_{i-1}$$
 com  $i = 1, 2, \dots$  (I)

Este método simples de integração das equações diferenciais é conhecido pela designação de *método de Euler*.

Como fàcilmente se vê, se o sentido da concavidade das linhas integrais que passam nos sucessivos pontos  $(x_i, y_i)$  for o mesmo, o erro  $|y_i - y(x_i)|$  vai crescendo com i.

Quanto menor for a amplitude *h* dos sucessivos intervalos, em geral, tanto menor será o erro de truncatura, agravando-se porém os erros de arredondamento (o que pode contudo não ter qualquer importância) e aumentando a extensão dos cálculos.

A fórmula dos acréscimos finitos

$$y(x_1) = y_0 + (x - x_0) \cdot y'(x_0 + \theta h)$$

permitiria resolver o problema de modo exacto, se conhecêssemos o ponto  $x_0 + \theta h$  do intervalo  $x_0, x_1$ .

Numa primeira aproximação, e tendo em conta que os sucessivos intervalos têm a mesma amplitude, vamos substituir  $x_0 + \theta h$  pela abcissa do ponto médio do intervalo. Nestas condições faremos

$$y_2 = y_0 + (x_2 - x_0) y'(x_1)$$
  
ou  
 $y_2 = y_0 + 2 h f[x_1, y(x_1)]$ 

o que equivale a substituir a linha  $L_0$  pela recta que passa em  $(x_0, y_0)$  e é paralela à tangente a  $L_0$  no ponto de abcissa  $x_1$  tomando nela depois o ponto de abcissa  $x_2$ . Ora as parábolas de eixo paralelo ao eixo dos y, gozam dessa propriedade: qualquer corda  $\overline{AB}$  é paralela à tangente no ponto de abcissa

média,  $\frac{x_A + x_B}{2}$ . Isto sugere que a fórmula que acabamos de estabelecer deve ser exacta para equações com soluções polinomiais do 2.º grau, isto é, que o seu erro de truncatura deve ser de 3.ª ordem com respeito a h.

A aplicação desta fórmula exige o prévio conhecimento da ordenada,  $y(x_1)$ , do ponto de  $L_0$  cuja abcissa é  $x_1$ . A sua determinação pode, por exemplo, fazer-se à custa da fórmula de Taylor.

$$y(x_1) = y(x_0) + (x_1 - x_0) y'(x_0) + \frac{(x_1 - x_0)^2}{2!} y''(x_0) + \dots$$

No caso presente poderíamos simplesmente tomar

$$y_1 = y_0 + (x_1 - x_0) y_0'$$

pois que, tendo um erro de truncatura de 2.a ordem em h, vai introduzir um erro de 3.a ordem no valor de  $y_2$  que é a ordem que, por considerações geométricas, aceitamos para o erro de truncatura da fórmula deduzida. Como neste momento apenas conhecemos a ordem de grandeza dos erros, será recomendável que se tome, pelo menos, mais um termo da série de Taylor...

Uma vez calculado  $y_2$ , estamos então em condições de obter  $y_3$  por meio da fórmula

$$y_3 = y_1 + 2 h f(x_2, y_2)$$
.

Note-se agora que um erro no valor de  $y_1$  se vai manifestar em verdadeira grandeza em  $y_3$ ; impõe-se pois que  $y_1$  tenha um erro de truncatura pelo menos de 3.<sup>a</sup> ordem.

Dum modo geral, teremos então

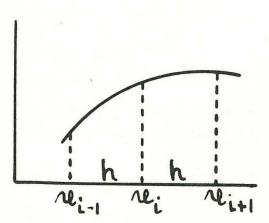
(II) 
$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2h f(x_i, y_i) \quad \text{com } i = 1, 2, ...$$

$$\text{sendo} \quad y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0) + \frac{h^2}{2} \left[ \left( \frac{\delta f}{\delta x} \right)_{x_0, y_0} + \left( \frac{\delta f}{\delta y} \right)_{x_0, y_0} f(x_0, y_0) \right]$$

que, com um erro de truncatura de 3.ª ordem, permite prever o valor de  $y_{i+1}$  a partir do conhecimento dos dois valores anteriores,  $y_i$  e  $y_{i-1}$ .

Vamos a seguir estudar, analiticamente, o erro de truncatura da fórmula preditora estabelecida.

Da equação diferencial dada,  $y'=f(x,\ y)$ , por integração entre  $x_{i-1}$  e  $x_{i+1}$  vem



$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} dy = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y) dx$$
donde

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} dx$$

Aplicando a conhecida regra dos trapézios ao cálculo do integral, vem

$$\begin{split} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} & \frac{2h}{2} \left[ y'_{i-1} + y'_{i+1} \right] - \frac{(2h)^3}{12} y'''(\theta') \\ & = h \left[ y'_{i-1} + y'_{i+1} \right] - \frac{2h^3}{3} y'''(\theta') \\ & \text{onde} \qquad x_{i-1} < \theta' < x_{i+1}. \end{split}$$

Então

$$y_{i+1} + y_{i-1} + h [y'_{i-1} + y'_{i+1}] - \frac{2h^3}{3}y'''(\theta')$$

seria uma fórmula "exacta" de integração. O valor  $y'_{i-1} = f(x_{i-1}, y_{i-1})$  é já conhecido. Para cálculo de  $y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$  necessitávamos de conhecer  $y_{i+1}$ , precisamente o valor que procuramos.

Vamos tentar exprimir  $y'_{i-1} + y'_{i+1}$  em função do valor da derivada  $y'_{i}$  no ponto médio de  $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ .

Dada uma função  $\varphi$  (x), «suficientemente regular», a média aritmética dos valores que ela toma nos extremos de um «pequeno» intervalo  $[x-h,\ x+h]$  do seu domínio é «aproximadamente» igual ao valor da função no ponto médio desse intervalo. Com efeito, supondo  $\varphi$  (x) admitindo segunda derivada em  $[x-h,\ x+h]$ , tem-se

$$\varphi(x+h) = \varphi(x) + h \varphi'(x) + \frac{h^2}{2} \varphi''(x'') \qquad x < x'' < x + h$$

$$\varphi(x-h) = \varphi(x) - h \varphi'(x) + \frac{h^2}{2} \varphi''(x') \qquad x-h < x' < x$$

donde

$$\frac{\varphi\left(x-h\right)+\varphi\left(x+h\right)}{2}=\varphi\left(x\right)+\frac{h^{2}}{2}\frac{\varphi^{\prime\prime}\left(x^{\prime}\right)+\varphi^{\prime\prime}\left(x^{\prime\prime}\right)}{2}$$

Supondo  $\varphi''(x)$  contínua no intervalo [x', x''], então

$$\varphi(x-h) + \varphi(x+h) = 2 \varphi(x) + h^2 \varphi''(\bar{x})$$
 com  $x-h < \bar{x} < x+h$ .

Nestas condições, fazendo  $\varphi(x) = y'(x)$ , vem

$$y'_{i-1} + y'_{i+1} = 2 y'_i + h^2 y'''(\bar{\theta})$$
  $x_{i-1} < \bar{\theta} < x_{i+1}$ 

E então

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} y' \, dx = 2 \, h \, y'_i + h^3 \, y''' \, (\bar{\theta}) - \frac{2 \, h^3}{3} \, y''' \, (\theta')$$

Supondo o intervalo suficientemente estreito e a terceira derivada com variações menosprezáveis no intervalo, poderá fazer-se

$$y^{\prime\prime\prime}(\bar{\theta})=y^{\prime\prime\prime}(\theta')=y^{\prime\prime\prime}(\theta_1)$$
 com  $x_{i-1}<\theta_1< x_{i+1}$  obtendo-se finalmente

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2 h y'_{i} + \frac{h^{3}}{3} y'''(\theta_{1})$$
 (III)

O erro de truncatura da fórmula preditora (II) é  $\frac{h^3}{3}y'''$  ( $\theta_1$ ), de 3.ª ordem com respeito a h.

Se integrarmos a equação entre  $x_i$  e  $x_{i+1}$ , vem

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} dy = \int_{x_i}^{x_{i+1}} y' dx \qquad \text{ou} \qquad y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} y' dx$$

Usando de novo a regra dos trapézios, vem

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [y'_i + y'_{i+1}] - \frac{h^3}{12} y'''(\theta_2)$$
 (IV)

Então, com erro de 3.ª ordem também, poderemos usar a fórmula

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$$
 (V)

que permitirá corrigir o valor  $y_{i+1}$  encontrado pelo preditor (II).

Note-se que a designação de *correctora* que se dá a esta fórmula, não significa que o valor obtido seja, necessàriamente, mais preciso do que o dado pelo preditor, pois que, neste caso, ambas as fórmulas têm um erro de truncatura de 3.ª ordem em h. Quando muito, poderá dizer-se que o erro de truncatura, no corrector, é cerca da quarta parte do erro do preditor.

O facto de o valor de  $y_{i+1}$  que figura no  $2.^a$  membro do corrector, ser substituído pelo valor aproximado encontrado pelo preditor (com erro de  $3.^a$  ordem), em princípio não altera a precisão obtida pelo corrector; em face do factor  $\frac{h}{2}$  esse efeito é de  $4.^a$  ordem e portanto menosprezável.

Supondo que a 3.ª derivada  $y^{\prime\prime\prime}$  não muda de sinal no intervalo, os erros de truncatura  $\frac{h^3}{3} y^{\prime\prime\prime} (\theta_1)$  e  $-\frac{h^3}{12} y^{\prime\prime\prime} (\theta_2)$  têm sinais contrários. Então os valores  $y_{i+1}$  obtidos pelo preditor e pelo corrector enforquilham o valor exacto, o que permite um controle da precisão dos valores obtidos.

Designando por  $p_{i+1}$  e  $c_{i+1}$  os valores aproximados de  $y_{i-1}$  obtidos pelo preditor e pelo corrector, respectivamente, a sua diferença é

$$p_{i+1} - c_{i+1} = -\frac{h^3}{12} [4 y^{\prime\prime\prime} (\theta_1) + y^{\prime\prime\prime} (\theta_2)] \simeq -\frac{5}{12} h^3 y^{\prime\prime\prime} (\theta)$$

diferença esta que, como se vê, é cerca de 5 vezes o erro de truncatura do corrector. Quer isto dizer que somando  $\frac{1}{5}$   $(p_{i+1}-c_{i+1})$  ao valor obtido no corrector se deverá obter um valor, em geral, mais próximo do exacto.

Notar que estas últimas considerações só são válidas de um modo geral, na medida em que a 3.ª derivada tem pequenas variações no intervalo e, prin-

cipalmente, em que os valores que figuram nos segundos membros são exactos: daqui a conveniência em obter o valor de  $y_1$  (pela fórmula de Taylor por exemplo) com precisão extra.

Resumindo: em cada escalão usaremos as fórmulas

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= y_{i-1} + 2 \, h \, y'_i \\ c_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2} \, (y'_i + y'_{i+1}) \\ \text{onde} \quad y'_{i+1} &= f \, (x_{i+1}, \, p_{i+1}) \\ \text{e o valor final} \quad y_{i+1} &= c_{i+1} + \frac{1}{5} \, (p_{i+1} - c_{i+1}) \end{aligned} \tag{V A}$$

definindo o que se poderá designar por "preditor-corrector de 2.ª ordem, melhorado".

#### Exemplo:

Determinar, numèricamente, no intervalo  $[0 \ 0,5]$ , a linha integral da equação  $y'=1+y^2$ , que passa na origem.

Nota: a solução exacta, neste caso, é conhecida, y = tg x / [0 0,5], o que nos vai permitir o controle de alguns resultados.

Com vista ao uso da fórmula de Taylor na determinação de  $y_1$ , calculemos as cinco primeiras derivadas

$$y' = 1 + y^2$$
  $y'' = 2 y y'$   $y''' = 2 y'^2 + 2 y y''$   
 $y^{IV} = 6 y' y'' + 2 y y'''$   $y^{V} = 6 y''^2 + 8 y' y''' + 2 y y^{IV}$ 

Vamos tomar h = 0,1 (1).

(1) A determinação do valor de h de modo a obter uma dada precisão, exige considerações que ultrapassam estas breves notas sobre integração numérica de equações diferenciais. Um método empírico corrente na resolução do problema, quando se usem computadores automáticos, consiste em reduzir sucessivamente o valor de h até repetir resultados (a menos do erro fixado), para dois valores consecutivos de h.

Na tabela a seguir, y representa o valor exacto da solução (y = tg x);  $p_i$  e  $c_i$  representam, respectivamente, os valores dados pelo preditor e pelo corrector;

$$y_i$$
 é o valor final:  $y_i = c_i + \frac{1}{5}(p_i - c_i)$ .

Os cálculos foram feitos em duplicado: num dos casos ignoram-se os valores exactos, isto é, fizemos

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= y_{i-1} + 2 h (1 + y_i^2) \\ c_{i+1} &= y_i + h \frac{(1 + y_i^2) + (1 + p_{i+1}^2)}{2} ; \end{aligned}$$

os valores sublinhados foram obtidos aproveitando o conhecimento, que neste exemplo temos, dos resultados exactos, isto é, fizemos

$$p_{i+1} = y(x_{i-1}) + 2h\{1 + [y(x_i)]^2\}$$

$$c_{i+1} = y(x_i) + h\frac{\{1 + [y(x_i)]^2\} + (1 + p_{i+1}^2)}{2}.$$

Assim os valores sublinhados contêm apenas o erro de truncatura [local], enquanto os não sublinhados sofrem ainda o efeito da propagação dos erros cometidos nos escalões anteriores.

х	у	$y_i$	$p_{i}$	$c_i$	$p_i - c_i$	$\begin{array}{c} 10^6/5 \\ p_i - c_i \end{array}$
0	0	0		_	. —	_
0,1	0,100 334	0,100 334			_	_
0,2	0,202 710	0,202 705 0,202 705	0,202 013 0,202 013	0,202 878 0,202 878	— 865 — 865	— 173 — 173
0,3	0,309 335	0,309 315 0,309 338	0,308 553 0,308 554	0,309 506 0,309 534	— 953 — 981	— 191 — 196
0,4	0,422 792	0,422 767 0,422 785	0,421 841 0,421 857	0,422 996 0,423 018	— 1155 — 1161	231 232
0,5	0,546 302	0,546 259 0,546 286	0,545 061 0,545 086	0,546 558 0,546 586	— 1497 — 1500	— 299 — 300

Na tabela que se segue apresentam-se alguns valores resultantes da comparação entre os do quadro anterior.

Assim na  $2.^a$  coluna,  $10^6$  [ $y(x_i)-y_i$ ], figuram os erros dos valores finais nas condições habituais (presentes, portanto, os erros de truncatura e de propagação, sendo menosprezáveis os de arredondamento).

Na 3.ª coluna,  $10^6$  [y ( $\underline{x_i}$ ) —  $\underline{y_i}$ ], figuram os erros de truncatura sòmente (no par preditor-corrector, sem intervirem erros de propagação); notar que o  $p_{i+1}$  que figura no corrector foi o calculado pelo preditor, podendo-se então, de certo modo, falar em propagação de erro no sentido preditor-corrector. Como era de esperar, os valores da 3.ª coluna são menores do que os da 2.ª (comparação dos valores absolutos).

Na 4.ª coluna,  $10^6$  [ $y(x_i)-c_i$ ], temos o erro (de truncatura + propagação) que cometeríamos tomando para valor final o dado pelo corrector, sem entrar em conta com a correcção  $\frac{1}{5}$  ( $p_i-c_i$ ). Como se vê, comparando com a 2.ª coluna, a introdução deste termo correctivo reduziu o erro de cerca de 10 vezes.

Na 5.ª coluna,  $10^6 [y(x_i) - c_i]$ , figuram os erros de truncatura cometidos tomando como final o valor dado pelo corrector obtido sem erro de propagação; contra o que à primeira vista seria de esperar, são maiores do que os da coluna anterior; isto significa que, no caso presente, os erros de propagação são de sinal contrário do dos erros de truncatura.

Finalmente, na 6.a coluna,  $10^6 [y(x_i) - p_i]$ , são apresentados os erros dados pelo preditor. Como se vê por comparação com a 4.a coluna, é também nítida a melhoria dos resultados, utilizando o corrector.

x	$10^{6}$ $y(x_{i}) - y_{i}$	$y(x_i) - \underline{y_i}$	$y(x_i) - c_i$	$y(x_i) - \underline{c_i}$	$y(x_i) - p_i$
0,2	14	14	<b>— 159</b>	— 159	<b>— 7</b> 06
0,3	20	- 3	<u> </u>	— 199	— 782
0,4	25	7	<b>—</b> 204		— 952
0,5	43	17	<b>—</b> 284	284	<u> </u>

Notemos que se for  $\left|\frac{h}{2}\frac{\delta f}{\delta y}\right| < 1$  na vizinhança do ponto  $(x_{i+1}, y_{i+1})$ , a fórmula do corrector

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

permite, por iteração simples, melhorar o valor de  $y_{i+1}$  que porventura tenha sido obtido grosseiramente. Esta a razão por que a fórmula se diz correctora. Não deverá porém perder-se de vista que ela tem um erro de truncatura (de 3.ª ordem) e que, portanto, qualquer que seja o número de iterações realizadas, não se poderá ultrapassar a sua precisão intrínseca.

Pensando no caso de um computador automático na resolução do nosso problema, utilizando a fórmula do preditor de 2.a ordem que acabamos de estabelecer, terá de se efectuar o cálculo preliminar de  $y_1$  (pela fórmula de Taylor p. ex.). Isto é, só depois de dispormos dos dois valores iniciais  $y_0$  e  $y_1$  se fica em condições de aplicar, sucessivamente, o grupo preditor-corrector.

É certo que se poderá usar o preditor de Euler  $y_i = y_{i-1} + h \ y'_{i-1}$  (com erro de 2.ª ordem) que apenas exige um valor inicial,  $y_0$ , combinando-o a seguir com o corrector de 3.ª ordem. A aplicação composta preditor-corrector, neste caso, teria ainda um erro de truncatura de 3.ª ordem; ficaríamos porém impossibilitados de efectuar a correcção final  $\frac{1}{5}$  ( $p_i - c_i$ ).

Uma vez terminada a integração e tomando os valores finais como iniciais, poderá efectuar-se a integração em sentido contrário (mudando h em -h). Da comparação entre os valores obtidos [à ida e à volta] poderão pôr-se em evidência possíveis erros ou enganos de cálculo, bem como "instabilidades" resultantes do efeito acumulativo acentuado dos erros de propagação. Será boa norma usar nos cálculos um número de algarismo significativo elevado, de modo a que os erros de arredondamento sejam menosprezáveis.

No quadro a seguir apresentamos os resultados obtidos a partir dos valores finais  $y_5$  e  $y_4$  e fazendo h=-0.1.

x <sub>i</sub>	$y_i$	$p_i$	$c_i$	$p_i - c_i$	$\frac{\frac{1}{5}}{p_i - c_i}$
0,5	0,546 259			_	- ,3,
0,4	0,422 767	_		<del>-</del>	_
0,3	0,309 311	0,310 519	0,309 009	1510	302
0,2	0,202 688	0,203 632	0,202 454	1168	234
0,1	0,100 317	0,101 095	0,100 123	972	194
0,0	- 0,000 014	0,000 675	-0,000 186	861	172

A fórmula mais geral, correntemente usada no método Preditor-Corrector, de integração das equações diferenciais y' = f(x, y) é

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{r} a_j y_{i-j} + h \sum_{l=-1}^{r} b_l y'_{i-l}$$
 (VI)

sendo  $a_j$  e  $b_l$  coeficientes escolhidos habitualmente sob a condição de a fórmula ser exacta para equações diferenciais com soluções polinomiais.

Se for  $b_{-1}=0$ , então  $y_{i+1}$  exprime-se em valores já prèviamente determinados. A fórmula é preditora, efectuando uma extrapolação.

Se for  $b_{-1}=0$ , aquela equação definirá  $y_{i+1}$  como função implícita de valores prèviamente determinados. Trata-se ainda de uma extrapolação. Por vezes o valor de  $y_{i+1}$  é obtido por iteração a partir de um valor aproximado, corrigindo-o.

Nota — Como é sabido, uma condição de suficiência de convergência do processo iterativo é que, designando por k o supremo do conjunto dos valores de  $\left| \begin{array}{c} \frac{\delta f}{\delta y} \end{array} \right|$  na vizinhança do ponto  $(x_{i+1}, y_{i+1})$ , se verifique a relação  $h \cdot |b_{-1}| \cdot k < 1$ .

Repare-se ainda que tal convergência se faz para uma raiz da equação (VI) e não necessàriamente para a solução exacta da equação diferencial: além do erro de truncatura há que ter em conta que as quantidades intervenientes em (VI) não serão por sua vez exactas.

A fórmula preditora  $y_{i+1} = y_{i-1} + 2 h y'_{i}$ , atrás estabelecida, corresponde ao caso particular de ser

$$\begin{split} r &= 1, \quad a_{_0} = 0, \quad a_{_1} = 1, \quad b_{_{-1}} = 0, \quad b_{_0} = 2 \quad \text{e} \quad b_{_1} = 0 \\ \text{e para a correctora} \ y_{i\,+\,1} &= y_i + \frac{h}{2} \ (y'_{i} + y'_{i\,+\,1}) \ \ \text{\'e} \ \ r = 0, \quad a_{_0} = 1, \quad b_{_{-1}} = \frac{1}{2} \ \text{e} \ \ b_{_0} = \frac{1}{2}. \end{split}$$

Um método de determinação dos coeficientes  $a_i$  e  $b_l$  é o conhecido método dos coeficientes indeterminados.

Suponhamos que pretendíamos que a fórmula (VI) fosse exacta para solução polinomiais de grau s. Estabeleceremos então s+1 equações lineares nos 2r+3 coeficientes  $a_i e b_i$ .

Assim, para  $y = A_0$  (grau zero) temos

$$A_0 = \sum_{j=0}^{r} a_j A_0$$
 equação homogénea em  $A_0$  equivalente a

$$1 = \Sigma \ a_j$$

Para  $y = A_1 x$  vem

$$A_{1} x_{i+1} = \sum_{j} a_{j} A_{1} x_{i-j} + h \Sigma b_{l} A_{1}$$

homogénea em  $A_1$ , equivalente a

$$x_{i+1} = \sum_{i} a_{i} x_{i-j} + h \sum_{l} b_{l}$$

Para  $y=A_0+A_1x$  vem o sistema das duas equações escrita atrás. Sendo então  $y=A_0+A_1x+\dots A_sx^s$  a solução da equação diferencial, as s+1 equações que se obtêm de (VI), sendo homogéneas em cada um dos coeficientes do polinómio, podem escrever-se fazendo simplesmente

$$y = x^{m}$$
 com  $m = 0, 1, 2, ... s$ .

Quer dizer: os coeficientes  $a_i$  e  $b_I$  não dependem dos coeficientes do polinómio.

Notemos também que se na equação diferencial mudarmos x em  $x-x_i$  o polinómio solução sofrerá uma translação paralela ao eixo dos x de amplitude  $|x_i|$  que se manifesta por uma alteração no valor dos seus coeficientes, não sendo portanto afectados os coeficientes  $a_i$  e  $b_l$ . Quer isto dizer que, sem perda de generalidade na formação das s+1 equações, se poderá supor  $x_i=0$ ; assim a equação  $x_{i+1}=\sum\limits_{j}a_j\,x_{i-j}+h\,\sum\limits_{l}b_l$  pode escrever-se

$$h = a_{_{0}} \cdot 0 + a_{_{1}} (-h) + a_{_{2}} (-2 h) + \dots a_{r} (-rh) + h \sum_{l} b_{l}$$

ou

$$h = h \sum_{i=0}^{r} a_{i} (-i) + h \Sigma b_{i}$$

que, sendo homogénea em h, se pode escrever

A 4 5

11.

$$1 = \sum_{j} a_{j} (-j) + \sum_{l} b_{l} .$$

De um modo geral, sendo as s+1 equações homogéneas nas sucessivas potências de h não se perde generalidade fazendo h=1.

E deste modo as equações são

(VII) 
$$\begin{cases} 1 = \sum_{j=0}^{r} a_{j} & \text{para } m = 0 \\ 1 = -\sum_{j=0}^{r} j \ a_{j} + \sum_{l=-1}^{r} b_{l} & \text{para } m = 1 \\ 1 = \sum_{j=0}^{r} (-j)^{m} \ a_{j} + \sum_{l=-1}^{r} b_{l} \ (-l)^{m-1} & \text{para } m = 2, 3, \dots s. \end{cases}$$

Se o número de coeficientes, 2r + 3, for igual a s + 1, o problema, em geral, terá solução única (sistema de Cramer).

Se for 2r+3>s+1, disporemos em geral de 2r-s+2 coeficientes, desempenhando o papel de parâmetros arbitrários, que poderão ser escolhidos, convenientemente, no sentido de conseguir determinados efeitos.

Exemplo:

Determinar os coeficientes em

$$y_{i+1} = a_0 y_i + h (b_{-1} y'_{i+1} + b_0 y'_i)$$

de modo a ser exacta para polinómios do 1.º grau.

A equação dada corresponde ao caso de ser r=0; e tratando-se de um polinómio do 1.º grau é s=1. Então vem.

$$1 = a_0 1 = b_{-1} + b_0$$

e portanto

$$y_{i+1} = y_i + h [(1 - b_0) \ y'_{i+1} + b_0 \ y'_i]$$

sendo  $b_0$  um parâmetro arbitrário. Fazendo  $b_0 = 1$ , teremos uma fórmula preditora; e para  $b_0 \neq 1$  será correctora.

Os três coeficientes podem ainda ser determinados de modo que a fórmula ainda seja exacta para polinómios do 2.º grau.

Então, para s=2 vem

$$\begin{cases} 1 = a_0 \\ 1 = b_{-1} + b_0 \\ 1 = 2 b_{-1}, (1) + 2 b_0 \cdot (0) = 2 b_{-1} \end{cases}$$
 ou 
$$\begin{cases} a_0 = 1 \\ b_{-1} = \frac{1}{2} \\ b_0 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Donde

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} (y'_{i+1} + y'_i)$$

fórmula já encontrada.

Da equação diferencial dada y' = f(x, y), por integração entre  $x_{i-1}$  e  $x_{i+1}$  vem, como já atrás vimos,

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} y' dx$$

E se usarmos a regra de Simpson no cálculo do integral, temos

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [y'_{i-1} + 4y'_{i} + y'_{i+1}] - \frac{h^5}{90} y^5 (\theta_2)$$

$$com \quad x_{i-1} < \theta_2 < x_{i+1}.$$

A fórmula

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [y'_{i-1} + 4y'_i + y'_{i+1}]$$

é pois uma fórmula correctora, com um erro de truncatura de 5.a ordem em h, exacta para polinómios do 4.o grau.

A partir de (VI) pode obter-se a seguinte fórmula preditora, exacta para polinómios de 4.º grau também,

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4}{3} h (2 y'_{i} - y'_{i-1} + 2 y'_{i-2})$$

com um erro de truncatura

$$T = \frac{14}{45} h^5 y^{V} (\theta_1).$$

O método de integração de equações diferenciais que utiliza estas duas fórmulas preditora-correctora é conhecido pelo nome de método de Milne.

Designando por  $p_{i+1}$  e  $c_{i+1}$ , respectivamente, os valores do preditor e do corrector que acabamos de estabelecer, então, o valor exacto da ordenada no ponto de abcissa  $x_{i+1}$  é

ou

$$y(x_{i+1}) = p_{i+1} + P h^5 y^{(V)}(\theta_1)$$
$$y(x_{i+1}) = c_{i+1} + C h^5 y^{(V)}(\theta_2)$$

sendo 
$$P = \frac{14}{45}$$
 e  $C = -\frac{1}{90}$ .

Eliminando entre as duas equações  $y(x_{i+1})$  e supondo

$$y^{(V)}(\theta_1) = y^{(V)}(\theta_2) = y^{(V)}(\theta)$$

vem

$$p_{i+1} - c_{i+1} = (C - P) h^5 y^{(V)} (\theta)$$

e portanto para valor final

$$y_{i+1} = c_{i+1} + \frac{C}{C-P} (p_{i+1} - C_{i+1})$$

isto é

$$y_{i+1} = c_{i+1} + \frac{1}{29} (p_{i+1} - c_{i+1}).$$

Por outro lado ainda, se tivermos em conta que os valores de  $y^{(v)}(\theta)$  de escalão para escalão, em geral, pouco diferem, poderemos estimar um valor para o erro de truncatura do preditor, fazendo

$$(C - P) h^5 y^{(V)}(\theta) = p_i - c_i$$

onde  $p_i$  e  $c_i$  são os valores calculados no escalão anterior. Nestas condições teremos um preditor melhorado, fazendo

$$\overline{p}_{i+1} = p_{i+1} + \frac{P}{C - P} (p_i - c_i) \tag{1}$$

neste caso

$$\bar{p}_{i+1} = p_{i+1} - \frac{28}{29} (p_i - c_i).$$

<sup>(1)</sup> Uma correcção deste tipo podia, também, ter sido feita no preditor de 2.ª ordem, atrás referido em (V A).

Resumindo: o método de Milne, melhorado, será representado por

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= y_{i-3} + \frac{4}{3} h \left( 2 \ y'_i - y'_{i-1} + 2 \ y'_{i-2} \right) \\ \overline{p}_{i+1} &= p_{i+1} - \frac{28}{29} \left( p_i - c_i \right) \\ c_{i+1} &= y_{i-1} + \frac{h}{3} \left( y'_{i-1} + 4 \ y'_i + y'_{i+1} \right) \\ \text{onde} \quad y'_{i+1} &= f \left( x_{i+1}, \ \overline{p}_{i+1} \right) \\ \text{e o valor final } y_{i+1} &= c_{i+1} + \frac{1}{29} \left( p_{i+1} - c_{i+1} \right) \end{aligned}$$

O método de Milne apresenta um forte inconveniente: pode mostrar-se que, se for  $\frac{\delta f}{\delta y} < 0$ , a fórmula do corrector não é estável. Significa isto que qualquer erro (de truncatura ou arredondamento) cometido num dado escalão tende a propagar-se, com grandeza crescente, aos escalões seguintes. Por esta razão não é aconselhável o uso das fórmulas (VIII), a menos que o número

de escalões seja pequeno ou se saiba que é  $\frac{\delta f}{\delta y} > 0$ . (1)

Existe um método devido a Hamming que goza das vantagens do de Milne e é estável. Com o mesmo preditor que o de Milne, usa como corrector a fórmula

$$y_{i+1} = \frac{1}{8} (9 y_i - y_{i-2}) + \frac{3}{8} h (y'_{i+1} + 2 y'_i - y'_{i-1})$$

que tem um erro de truncatura

$$T = -\frac{1}{40} h^5 y^{(V)} (\theta').$$

<sup>(1)</sup> Ver página 182 e seguintes de «A first course in numerical analysis» por A. Ralston.

Então, em cada escalão, o método de Haming usará as fórmulas

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= y_{i-3} + \frac{4}{3} h \left( 2 \, y'_i - y'_{i-1} + 2 \, y'_{i-2} \right) \\ p_{i+1} &= p_{i+1} - \frac{112}{121} \left( p_i - c_i \right) \\ c_{i+1} &= \frac{1}{8} \left( 9 \, y_i - y_{i-2} \right) + \frac{3}{8} h \left( y'_{i+1} + 2 \, y'_i - y'_{i-1} \right) \\ \text{onde} \quad y'_{i+1} &= f \left( x_{i+1}, \ \overline{p}_{i+1} \right) \\ \text{e o valor final} \quad y_{i+1} &= c_{i+1} + \frac{9}{121} \left( p_{i+1} - c_{i+1} \right) \end{aligned}$$

Para podermos utilizar qualquer dos 2 métodos de 4.ª ordem de integração das equações diferenciais a que nos referimos (Milne e Hamming), necessitamos conhecer os valores da solução em 4 pontos consecutivos, quando habitualmente se conhece apenas  $y(x_0) = y_0$ .

A fórmula de Taylor poderá resolver a dificuldade. Como a precisão do resultado do desenvolvimento de Taylor decresce com o afastamento do ponto, poderá, a partir do desenvolvimento na vizinhança do ponto  $(x_0, y_0)$ , calcular-se  $y_{-1} = y(x_0 - h)$ ,  $y_1 = y(x_0 + h)$  e  $y_2 = y(x_0 + 2h)$  embora  $y_{-1} = y(x_{-1}) = y(x_0 - h)$  possa não ter significado físico.

Outro modo de proceder será usar o preditor-corrector de 2.a ordem com o qual, a partir de  $y_0$  e  $y_1$ , se calculariam  $y_2$  e  $y_3$ . Notemos, porém, que os 4 valores iniciais devem ter uma precisão que não deve ser inferior à que se vai exigir a seguir, no preditor-corrector de 4.a ordem. Significa isto que, em princípio, no preditor-corrector de 2.a ordem se deverá usar um valor de h que conduza à precisão requerida, menor certamente do que o valor que vai tomar no preditor-corrector de 4.a ordem.

Outros métodos de determinação dos valores iniciais poderíamos ainda citar (ver p. ex. Ralston): deles destacaremos o de Runge-Kutta que, como veremos já a seguir, não só permite determinar os valores iniciais, mas ainda toda a solução.

Consideremos uma parábola de eixo de simetria paralelo ao eixo dos y.

É imediata a verificação de que o coeficiente angular de uma corda  $\overline{P_0P_1}$  é igual à média aritmética dos coeficientes angulares das tangentes nos pontos  $P_0$  e  $P_1$  da parábola.

Assim, se a linha integral da equação y'=f(x,y) que passa num ponto  $P_0(x_0,y_0)$  for uma tal parábola, o valor da ordenada  $y_1$  no ponto de abcissa  $x_1$  é

$$y_1 = y_0 + (x_1 - x_0) \frac{y'_0 + y'_1}{2} = y_0 + \frac{h}{2} (y'_0 + y'_1)$$

onde

$$y'_0 = f(x_0, y_0)$$
 e  $y'_1 = f(x_1, y_1)$ .

O cálculo de  $y'_1$  exige o conhecimento de  $y_1$ , precisamente a quantidade que nos propomos determinar.

Ora

$$y_1 = y_0 + h y'_0 + R_2 = y_0 + K_1 + R_2$$

sendo

$$R_2 = \frac{h^2}{2!} y'' (x_0 + \theta h)$$
 com  $0 < \theta < 1$ 

e ·

$$k_1 = h f(x_0, y_0) .$$

Então vem

$$y'_1 = f(x_1, y_0 + K_1 + R_2) = f(x_1, y_0 + k_1) + \frac{\delta f}{\delta y} R_2$$

sendo  $\frac{\delta f}{\delta y}$  calculada num ponto  $(x_1, y_0 + k_1 + \theta R_2)$  sendo  $0 < \theta < 1$ .

Deste modo

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2} [k_1 + h f(x_1, y_0 + k_1)] + \frac{1}{2} \frac{\delta f}{\delta y} \frac{h^3}{2!} y''(x_0 + \theta h)$$
.

Portanto, com erro de truncatura de 3.ª ordem vem

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2} (k_1 + k_2)$$

sendo 
$$k_2 = hf(x_1, y_0 + k_1) = hf(x_0 + h, y_0 + k_1).$$

Sistematizando, podemos escrever o grupo de fórmulas

$$k_{1} = h f(x_{0}, y_{0})$$

$$k_{2} = h f(x_{0} + h, y_{0} + k_{1})$$

$$y_{1} = y_{0} + \frac{1}{2}(k_{1} + k_{2})$$

cuja generalização

$$k_{1}^{(i)} = h f(x_{i}, y_{i})$$

$$k_{2}^{(i)} = h f(x_{i} + h, y_{i} + k_{1}^{(i)})$$

$$y_{i+1} = y_{i} + \frac{1}{2} (k_{1}^{(i)} + k_{2}^{(i)})$$
(X)

com erro de 3.ª ordem em h, permite avançar um escalão na integração da equação y' = f(x, y).

O método de Runge-Kutta resulta por sua vez de uma generalização, a outras ordens de aproximação, das considerações que acabamos de apresentar.

Dum modo geral, poderá fazer-se

$$\begin{split} k_1^{(i)} &= h \; f(x_i, \; y_i) \\ k_2^{(i)} &= h \; f(x_i + a \; h, \; y_i + a \; k_1^{(i)}) \\ k_3^{(i)} &= h \; f(x_i + b \; h, \; y_i + \beta \; k_1^{(i)} + \gamma \; k_2^{(i)}) \\ & \dots \\ y_{i+1} &= y_i + w_1 \; k_1^{(i)} + w_2 \; k_2^{(i)} + w_3 \; k_3^{(i)} + \dots \end{split}$$

sendo os diversos coeficientes a, b, ...  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ...,  $w_1$ ,  $w_2$ , ... determinados sob a condição do resultado ser exacto para soluções polinomiais.

Assim, se nos limitarmos às fórmulas

$$\begin{array}{l} k_{_{1}}^{(i)} &= h \; f\left(x_{_{i}}, \; y_{_{i}}\right) \\ \\ k_{_{2}}^{(i)} &= h \; f\left(x_{_{i}} + a \; h, \; y_{_{i}} + a \; k_{_{1}}^{(i)}\right) \\ \\ y_{_{i+1}} &= y_{_{i}} + w_{_{1}} \, k_{_{1}}^{(i)} + w_{_{2}} \, k_{_{2}}^{(i)} \end{array}$$

e pretendermos os coeficientes de modo que o resultado da sua aplicação seja exacto para soluções polimoniais do 2.º grau (erro de truncatura de 3.ª ordem em h), identificaremos os primeiros termos do desenvolvimento em série de Taylor, da solução exacta da equação, com a solução aproximada definida pelas 3 fórmulas atrás.

Desenvolvendo então em série de Taylor a solução exacta, limitando o desenvolvimento aos termos do 2.º grau, vem

$$y(x_{i+1}) = y(x_i + h) = y(x_i) + hf(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2} \left( \frac{\delta f}{\delta x} + y_i' \frac{\delta f}{\delta y} \right) + R_3$$

No caso da solução aproximada teremos

$$\begin{split} y_{i+1} &= y_i + w_1 \ h \ f(x_i, \ y_i) + w_2 \ h \ f(x_i + a \ h, \ y_i + a \ k_1^{(i)}) \\ &= y_i + w_1 \ h \ f(x_i, \ y_i) + w_2 \ h \ f(x_i, \ y_i) + \\ &\quad + w_2 \ h^2 \left[ \ a \ \frac{\delta f}{\delta x} + a \ \frac{k_1^{(i)}}{h} \frac{\delta f}{\delta y} \ \right] + \varrho_3 \end{split}$$

Identificando os dois polinómios vem

$$w_1 + w_2 = 1$$
  $w_2 a = \frac{1}{2}$   $w_2 \alpha \frac{k_1^{(i)}}{2} = \frac{y'_i}{h}$  ou  $w_2 \alpha = \frac{1}{2}$ 

donde

$$\alpha = a, \quad w_2 = \frac{1}{2a} \quad \text{e} \quad w_1 = \frac{2a-1}{2a}$$

desempenhando  $\underline{a}$  o papel de parâmetro arbitrário. Assim, fazendo a=1, vem  $w_1=w_2=\frac{1}{2}$ , obtendo-se então as fórmulas (X).

A fórmula de Runge-Kutta mais usada nos computadores automáticos é a de 4.ª ordem (erro de truncatura de grau 5 em h) que se segue

$$k^{(i)}_{1} = h f(x_{i}, y_{i})$$

$$k^{(i)}_{2} = h f\left(x_{i} + \frac{h}{2}, y_{i} + \frac{k^{(i)}_{1}}{2}\right)$$

$$k^{(i)}_{3} = h f\left(x_{i} + \frac{h}{2}, y_{i} + \frac{k^{(i)}_{2}}{2}\right)$$

$$k^{(i)}_{4} = h f(x_{i} + h, y_{i} + k^{(i)}_{3})$$

$$y_{i+1} = y_{i} + \frac{1}{6} (k^{(i)}_{1} + 2 k^{(i)}_{2} + 2 k^{(i)}_{3} + k^{(i)}_{4})$$
(XI)

e cuja programação não oferece dificuldades.

O acréscimo,  $y_{i+1} - y_i$ , em cada escalão, é pois uma média pesada dos acréscimos  $k_1^{(i)}$ ,  $k_2^{(i)}$ ,  $k_3^{(i)}$  e  $k_4^{(i)}$  correspondentes às inclinações das tangentes às linhas integrais, em pontos da «proximidade» de  $P_i(x_i, y_i)$ .

Assim  $k_1^{(i)}$  é o acréscimo correspondente à inclinação da tangente à linha integral  $L_1$  que passa em  $P_i$   $(x_i, y_i)$ ;  $k_2^{(i)}$  é o acréscimo correspondente à inclinação da tangente à linha integral  $L_2$  que passa no ponto  $P_i$   $\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1^{(i)}}{2}\right)$ ; etc....

## Exemplos:

Para finalizar, vamos de novo determinar a linha integral da equação  $y'=1+y^2$  que passa na origem, usando o método de 2.ª ordem, definido em (X), e o método de Runge-Kutta.

Pela aplicação do método de 2.ª ordem, temos

$$y' = 1 + y^2$$
  $k_1^{(i)} = h (1 + y_i^2)$   $k_2^{(i)} = h [1 + (y_i + k_1^{(i)})^2]$   $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2} (k_1^{(i)} + k_2^{(i)})$  sendo  $h = 0,1$  e  $x_0 = y_0 = 0$ 

$x_i$	$k_{i}^{(i)}$	$k_{\frac{1}{2}}^{(i)}$	$y_i$	$10^{6}.~\Delta_{i}$	
0,0	_	_	0	0	
0,1	0,100 000	0,101 000	0,100 500	— 166	
0,2	0,101 010	0,104 061	0,203 036	<b>— 217</b>	
0,3	0,104 122	0,109 244	0,309,719	<b>—</b> 384	
0,4	0,109 593	0,117 582	0,423 307	<b>–</b> 515	
0,5	0,117 919	0,129 293	0,546 913	<b>—</b> 611	

sendo  $\Delta_i=y\left(x_i\right)-y_i$ , neste caso  $\Delta_i=tg\ x_i-y_i$ , o erro introduzido na integração numérica. Usando nos cálculos números com 6 algarismos significativos, tivemos em mente que os erros de arredondamento fossem menosprezáveis; os valores de  $\Delta_i$  são pois efeito do erro de truncatura e de propagação.

Neste exemplo, o erro deste método é cerca de 10 vezes maior do que o obtido com o preditor-corrector de 2.ª ordem melhorado e da ordem de grandeza do não melhorado.

Pelo método de Runge-Kutta obtivemos os seguintes resultados

$$\begin{aligned} y' &= 1 + y^2, \qquad k_1^{(i)} = h \, (1 + y_i^2), \qquad k_2^{(i)} = h \, \Big[ 1 + \Big( y_i + \frac{k_1^{(i)}}{2} \Big)^2 \Big] \,, \\ k_3^{(i)} &= h \, \Big[ 1 + \Big( y_i + \frac{k_2^{(i)}}{2} \Big)^2 \Big] \,, \qquad k_4^{(i)} = h \, [1 + (y_i + k_3^{(i)})^2] \,, \\ y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6} \, \left[ k_1^{(i)} + 2 \, k_2^{(i)} + 2 \, k_3^{(i)} + k_4^{(i)} \right] \,, \end{aligned}$$

com  $x_0 = y_0 = 0$  e h = 0,1 e h = -0,1, successivamente

$x_i$	$k_{i}^{(i)}$	$k_{2}^{(i)}$	$k_{_3}^{(i)}$	$k_4^{(i)}$	$y_i$	$10^{8}.\Delta_{i}$
0,0		_	-	_	0	0
0,1	0,10 000 000	0,10 025 000	0,10 025 125	0,10 100 503	0,10 033 488	- 22
0,2	0,10 100 671	0,10 227 522	0,10 229 439	0,10 410 586	0,20 271 018	— 15
0,3	0,10 410 914	0,10 649 051	0,10 655 132	0,10 956 426	0,30 933 636	- 11
0,4	0,10 956 890	0,11 325 840	0,11 339 308	0,11 787 002	0,42 279 334	- 13
0,5	0,11 787 542	0,12 320 648	0,12 346 400	0,12 983 971	0,54 630 269	- 20
0,4	-0,12 984 466	-0,12 317 271	-0 <b>,12</b> 349 499	-0,11 787 664		- 3
0,3	-0,11 787 541	-0,11 323 909	-0,11 340 832	-0,10 957 190	-0,30 933 622	+ 3
0,2	-0,10 956 889	-0,10 647 966	_0,10 655 853	-0,10 411 188	-0,20 271 003	0
0,1	-0,10 410 914	-0,10 226 971	-0,10 229 750	-0,10 100 827	-0,10 033 472	<b>–</b> 6
0,0	-0,10 100 671	-0,10 024 832	-0,10 025 210	-0,10 000 001	-0,00 000 013	+ 13

Aqui, também é  $\Delta_i = tg \ x_i - y_i$ . Notemos que os valores de  $tg \ x_i$  que calculámos têm um erro de arredondamento máximo que pode atingir 2.10-8 ou mesmo 3.10-8, que é a ordem de grandeza de alguns erros encontrados, particularmente quando a partir do ponto  $(x_5, y_5)$  fizemos h = -0.1, integrando para trás.

Seguidamente continuamos com a integração para a frente a partir do ponto  $(x_5, y_5)$ , tendo obtido

$x_i$	${\mathcal Y}_i$	$10.8 \Delta_i$
0,6	0,68 413 719	- 35
0,7	0,84 228 907	- 66
0,8	1,02 963 970	— 114
0,9	1,26 015 959	_ 135
1,0	1,55 740 751	+ 19

Como exercício propõe-se a determinação da mesma linha integral da equação  $y'=1+y^2$  pela aplicação dos métodos de Milne melhorado (VIII) e de Hamming (IX), efectuando os cálculos com uma máquina de secretária (8 algarismos significativos), obtendo os 4 valores iniciais a partir do quadro atrás.

## Sistemas de equações diferenciais

Os resultados que obtivemos a propósito da integração da equação diferencial de 1.ª ordem y'=f(x, y) são susceptíveis de fácil generalização aos sistemas de equações diferenciais de 1.ª ordem.

A integração de uma equação diferencial de ordem n

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'' \dots y^{(n-1)})$$

mediante a introdução das variáveis auxiliares  $y_2$ ,  $y_3$ , ...  $y_n$  representando as primeiras n-1 derivadas de y, e fazendo ainda  $y_1 = y$ , reduz-se à integração do sistema de n equações diferenciais de 1.ª ordem, envolvendo as n variáveis dependentes  $y_1$ ,  $y_2$ , ...  $y_n$  a seguir escrito.

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2$$

$$\frac{dy_2}{dx} = y_3$$

$$\frac{dy_{n-1}}{dx} = y_n$$

$$\frac{dy_n}{dx} = f(x, y_1, y_2, \dots y_{n-1}, y_n)$$

Assim, por exemplo, determinar a linha integral da equação diferencial de 2.ª ordem

$$a(x) y'' + b(x) y'^{2} + c(x) tg y = e(x)$$

com  $a(x) \neq 0$ , tal que  $y(x_0) = y_0$  e  $y'(x_0) = y'_0$ , é equivalente a determinar a solução do sistema de equações diferenciais de 1.ª ordem

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2$$

$$\frac{dy_2}{dx} = \frac{e(x)}{a(x)} - \frac{b(x)}{a(x)} y_2^2 + \frac{\cot g(y)}{a(x)}$$

tal que seja  $y_2(x_0) = y'_0 e y_1(x_0) = y_0$ 

Consideremos o sistema de n equações diferenciais

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1, y_2, \dots y_n)$$

$$\frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1, y_2, \dots y_n)$$

$$\frac{dx_n}{dx} = f_n(x, y_1, y_2, \dots y_n)$$

onde  $f_1, f_2, \ldots f_n$  representam funções contínuas das variáveis  $x, y_1, y_2, \ldots y_n$  sendo  $y_1, y_2, \ldots y_n$  funções a determinar (pela integração do sistema).

De um modo abreviado, este mesmo sistema pode ser representado por

$$\frac{dy_j}{dx} = f_j (x, y_1, y_2, \dots y_n)$$
 para  $j = 1, 2, 3, \dots n$ .

Chama-se solução deste sistema num intervalo  $a \leq x \leq b$  ao conjunto de funções  $y_1(x), y_2(x), \ldots y_n(x)$  admitindo primeiras derivadas  $y_1(x), y_2(x), \ldots y_n(x)$  contínuas naquele intervalo e verificando as equações do sistema em todos os pontos do intervalo.

Introduzindo notação vectorial, escreveremos

$$Y = (y_1, y_2, \dots y_n)$$

para representar o vector n-dimensional Y de componentes  $y_1, y_2, \dots y_n$ .

Usaremos o símbolo ||Y|| para representar a *norma* (ou módulo) do vector Y, sendo

$$||Y|| = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_n^2}.$$

Se as componentes do vector forem funções de x, explicitaremos esse facto escrevendo

$$Y(x) = (y, (x), y_2(x), ... y_n(x))$$

Se um vector F for função das componentes  $y_i$  (x) de um vector Y, escreveremos.

$$F(Y) = (f_1(y_1, y_2, \dots y_n), f_2(y_1, y_2, \dots y_n), \dots f_n(y_1, y_2, \dots y_n))$$

Este vector F(Y) diz-se contínuo se cada uma das suas componentes  $f_j(y_1, y_2, \dots y_n)$  for contínua nas n variáveis  $y_1, y_2, \dots y_n$ .

Com vista ao estudo do sistema dado, definiremos os vectores

$$Y = (y_1, y_2, ... y_n)$$
 e  $F(x, y) = (f_1, f_2, ... f_n)$ 

vindo então aquele sistema representado pela equação diferencial vectorial

$$\frac{d Y}{d x} = F(x, Y) \tag{XII}$$

sendo o vector F(x, Y) contínuo em x e Y, simultâneamente, num domínio

$$\mathrm{D}^{n+1} \ (a \leqslant x \leqslant b, \ -\infty < y_{_1} < \infty, -\infty < y_{_2} < \infty, \ldots -\infty \leq y_{_n} < \infty).$$

## Teorema da existência e unidade da solução da equação vectorial:

Dada a equação vectorial  $\frac{dY}{dx} = F(x, Y)$ , se existir um vector constante  $L = (l_1, l_2 \dots l_n)$  tal que, para todo o par  $(x, Y_1)$  e  $(x, Y_2)$  em  $D^{n+1}$ , se verifique a relação

$$|| F(x, Y_1) - F(x, Y_2) || \le || L | (Y_1 - Y_2) ||,$$

qualquer que seja  $x \in [a, b]$ , então fixado um ponto  $(x_0, Y_0) \in D^{n+1}$  existe um e só um vector Y(x) / [a, b] solução da equação diferencial contendo aquele mesmo ponto, isto é, tal que  $Y(x_0) = Y_0$ .

As fórmulas de integração numérica da equação vectorial XII obtêm-se sem dificuldade a partir das que anteriormente estabelecemos. Assim das fórmulas (X), por exemplo, vem sob a forma vectorial

$$K_{1}^{i} = h F (x_{i}, Y_{i})$$

$$K_{2}^{i} = h F (x_{i} + h, Y_{i} + K_{1}^{i})$$

$$Y_{i+1} = Y_{i} + \frac{1}{2} (K_{1}^{i} + K_{2}^{i})$$
(XIII)

ou, explicitando as componentes dos vectores  $K_1^i,\ K_2^i,\ F,\ Y_{i+1}$  e  $Y_i$  que ali intervêm.

$$\begin{aligned} k_{1}^{i},_{j} &= h f_{j} \left( x_{i}, \ y_{1}^{i}, \ y_{2}^{i}, \ \dots \ y_{n}^{i} \right) \\ k_{2}^{i},_{j} &= h f_{j} \left( x_{i} + h, y_{1}^{i} + k_{1}^{i},_{1}, \ y_{2}^{i} + k_{1}^{i},_{2}, \ \dots \ y_{n}^{i} + k_{1}^{i},_{n} \right) \\ y_{j}^{i+1} &= y_{j}^{i} + \frac{1}{2} (k_{1}^{i},_{j} + k_{2}^{i},_{j}) \\ \text{para} \quad j = 1, \ 2, \ 3, \ \dots \ n \end{aligned}$$
 (XIV)

sendo

$$\begin{split} \boldsymbol{Y}_i &= (\boldsymbol{y}_1^{\;i},\; \boldsymbol{y}_2^{\;i},\; \dots \boldsymbol{y}_n^{\;i}) \\ K_1^{\;i} &= (k_1^{\;i},_1,\; k_1^{\;i},_2,\; \dots k_1^{\;i},_n) \\ K_2^{\;i} &= (k_2^{\;i},_1,\; k_2^{\;i},_2,\; \dots k_2^{\;i},_n) \end{split}$$

Exemplo: Integrar o sistema

$$\begin{cases} y'=z\\ z'=x-y+2z \end{cases} \qquad \text{no intervalo} \qquad 0 \leqslant x \leqslant \frac{1}{2} \end{cases}$$
 sendo  $y(0)=0$  e  $z(0)=2$ .

Em linguagem vectorial, o problema consiste na determinação do vector Y = (y, z) solução da equação

$$\frac{dY}{dx} = (z, x-y+2z)$$

tal que Y(0) = (0, 2).

Fazendo  $y(x) = y_1(x)$  e  $z(x) = y_2(x)$ , usando as fórmulas (XIV), tendo em conta que neste caso é j = 1, 2 e tomando h = 0, 1 vem

$$\begin{aligned} k_1^{i},_1 &= 0.1 \ y_2^{i} \\ k_{1,2} &= 0.1 \ (x_t - y_1^{i} + 2 \ y_2^{i}) \\ k_2^{i},_1 &= 0.1 \ (y_2^{i} + k_1,_2^{i}) \\ k_{2,2} &= 0.1 \ [x_i + 0.1 - (y_1^{i} + k_1,_1^{i}) + 2 \ (y_2^{i} + k_1,_2^{i})] \\ y_1^{i+1} &= y_1^{i} + \frac{1}{2} \ (k_1,_1^{i} + k_2,_1^{i}) \\ y_2^{i+1} &= y_2^{i} + \frac{1}{2} \ (k_1,_2^{i} + k_2,_2^{i}) \\ \text{com} \quad y_1^0 &= 0 \quad \text{e} \quad y_2^0 = 2. \end{aligned}$$

E assim obtivemos os valores expressos no quadro seguinte

$\chi^i$	$k_1,^{i}_{1}$	$k_1,^{i}_{2}$	$k_{2},^{i}_{1}$	$k_2,^{i}{}_{2}$	$y_1^i$	$y_2^i$	$\begin{array}{ c c }\hline 10^4 \\ \Delta_1{}^i \end{array}$	$10^4 \Delta_2^i$	$10^4$ $\varepsilon_1^i$	$10^4$ $\varepsilon_2^i$
0	0,2000	0,4000	0,2400	0,4700	0,0000	2,0000	0	0	0	0
0,1	0,2435	0,4750	0,2910	0,5556	0,2200	2,4350	14	18	64	7,5
0,2	0,2950	0,5613	0,3512	0,6541	0,4872	2,9503	28	39	58	13
0,3	0,3558	0,6606	0,4219	0,7671	0,8103	3,5580	48	68	59	19
0,4	0,4272	0,7745	0,5046	0,8966	1,1991	4,2719	75	101	62	24
0,5		_	_		1,6650	5,1075	116	143	<b>7</b> 0	28

Neste exemplo é fácil calcular a solução exacta

$$y(x) = 2 + x - 2e^x + 3xe^x$$

$$z(x) = 1 + e^x + 3x e^x$$

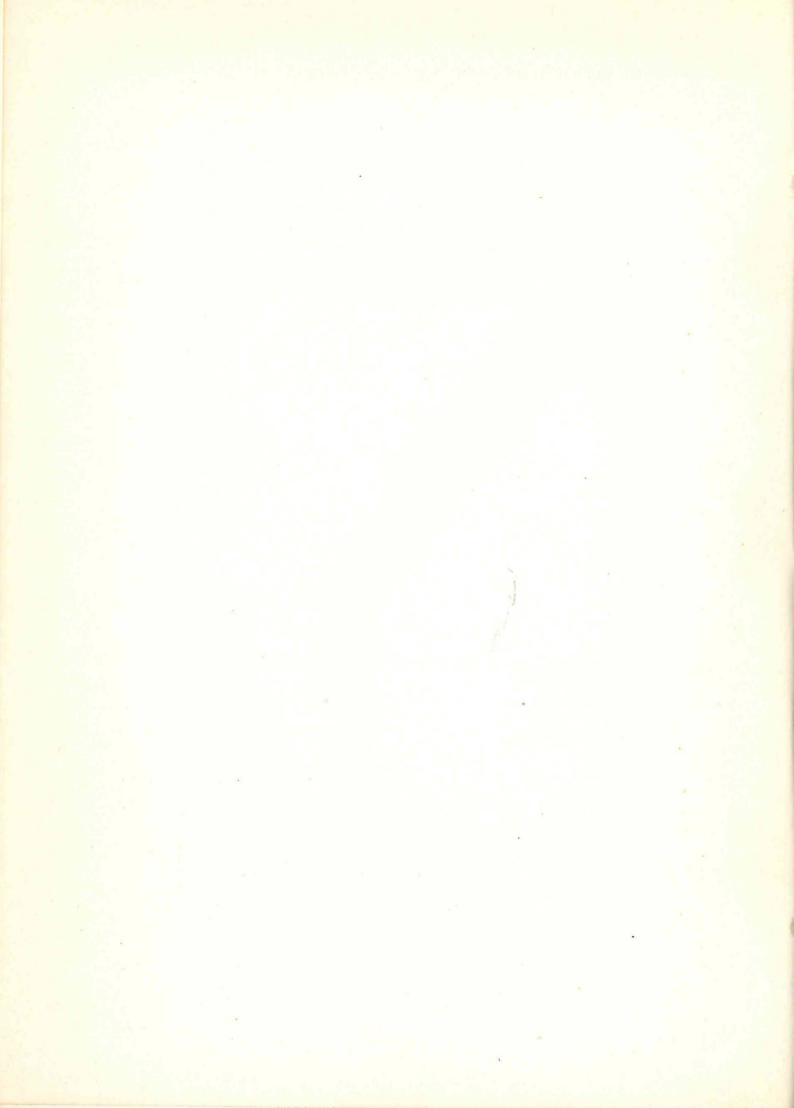
com o que podemos calcular os erros

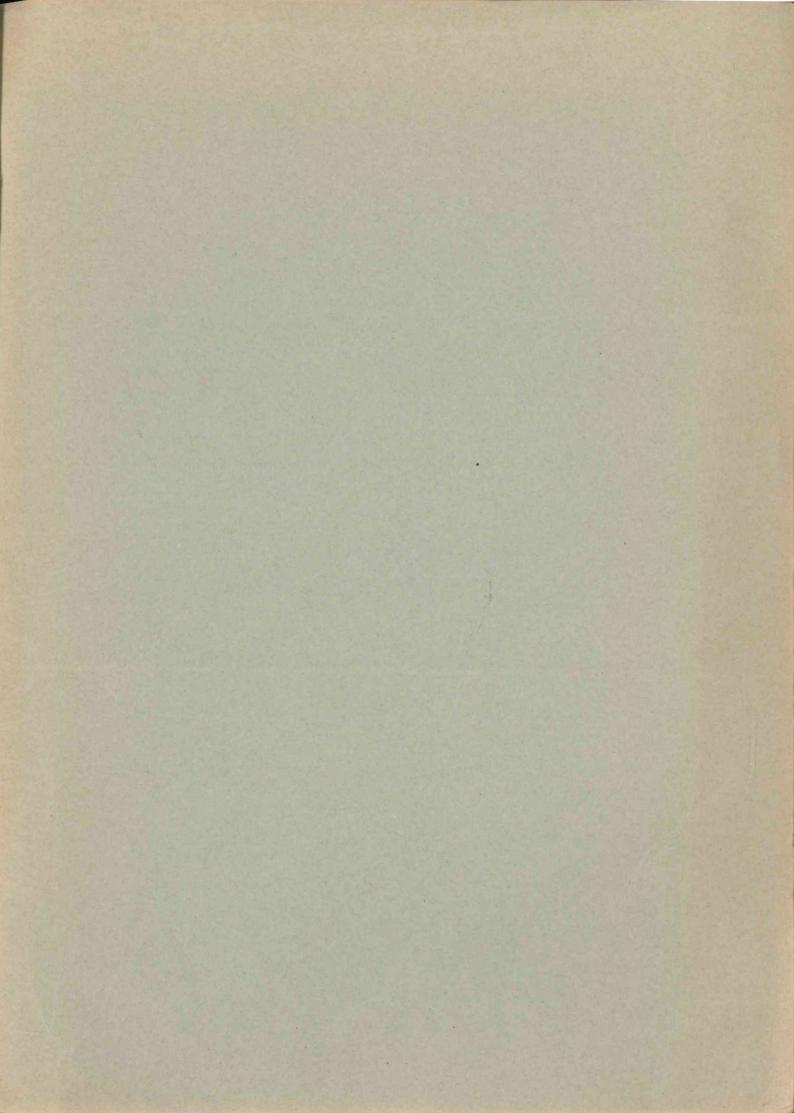
$$\Delta_{j}^{i} = y_{j}(x_{i}) - y_{j}^{i}$$
  $j = 1, 2$ 

bem como os erros relativos

$$\epsilon_j^i = \frac{\Delta_j^i}{y_j(x_i)} \qquad j = 1, \ 2$$

que em geral são os que mais interessam conhecer.







Elementos sobre integração numérica das equações d