MATEMÁTICA COMPUTACIONAL

Cap. 10. Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias: Problemas de Valor Inicial

Filipe J. Romeiras

Departamento de Matemática
Instituto Superior Técnico

Apontamentos das aulas da disciplina do mesmo nome do 2º ano de
Mestrados Integrados e Licenciaturas em Ciências de Engenharia
do Instituto Superior Técnico

10. RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS: PROBLEMAS DE VALOR INICIAL

Introdução: Problemas de Valor Inicial (PVI)

• As equações diferenciais são uma das mais importantes ferramentas matemáticas usadas na modelação de problemas em Física, Química e Engenharia. Neste capítulo derivamos e analisamos métodos numéricos para resolver problemas para equações diferenciais ordinárias (EDO's).

• Vamos considerar em primeiro lugar o chamado **problema de valor inicial** ou **problema de Cauchy**.

Definição. Seja $f : D \subset \mathbb{R}^{1+1} \to \mathbb{R}$ uma função contínua numa região D e $(x_0, Y_0) \in D$. O **PVI**

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \\ y(x_0) = Y_0, \end{cases} \tag{P}$$

é o problema de determinar uma função $Y : I_\alpha \to \mathbb{R}$, $\quad I_\alpha = [x_0 - \alpha, x_0 + \alpha]$, $\quad \alpha > 0$, tal que:

(i) $(x, Y(x)) \in D, \quad \forall x \in I_\alpha$;

(ii) $Y \in C^1(I_\alpha)$ e $Y'(x) = f(x, Y(x)), \quad \forall x \in I_\alpha$;

(iii) $Y(x_0) = Y_0$.

Esta função é a **solução** do PVI (P).

• Os resultados que iremos obter para o PVI (P) generalizam-se facilmente quer para sistemas de EDO's de $1^{\underline{a}}$ ordem quer para EDO's de ordem superior à $1^{\underline{a}}$, desde que se utilize a apropriada notação vectorial e matricial. Assim, no caso de um sistema de d EDO's de $1^{\underline{a}}$ ordem, temos:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \\ y(x_0) = Y_0, \end{cases}$$

onde $f : D \subset \mathbb{R}^{1+d} \to \mathbb{R}^d$ e $(x_0, Y_0) \in D$, com

$$\begin{aligned} y &= [y_1 \;\; y_2 \;\; \cdots \;\; y_d]^T \\ f(x, y) &= [f_1(x, y) \;\; f_2(x, y) \;\; \cdots \;\; f_d(x, y)]^T \\ Y_0 &= [Y_{01} \;\; Y_{02} \;\; \cdots \;\; Y_{0d}]^T, \end{aligned}$$

enquanto que no caso de uma EDO de ordem d,

$$\begin{cases} y^{(d)}(x) = f\left(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(d-1)}(x)\right), \\ y(x_0) = Y_0, \;\; y'(x_0) = Y_0', \;\; \ldots, \;\; y^{(d-1)}(x_0) = Y_0^{(d-1)}, \end{cases}$$

temos a formulação equivalente

$$\begin{cases} z'(x) = g(x, z(x)), \\ z(x_0) = Z_0, \end{cases}$$

com

$$\begin{aligned} z &= [y \;\; y' \;\; \cdots \;\; y^{(d-1)}]^T, \\ g(x,z) &= [z_2 \;\; z_3 \;\; \cdots \;\; z_d \;\; f(x, z_1, z_2, \ldots, z_d)]^T, \\ Z_0 &= [Y_0 \;\; Y_0' \;\; \cdots \;\; Y_0^{(d-1)}]^T. \end{aligned}$$

Exemplo. Escrever na forma de um PVI para um sistema de EDO's de 1ª ordem o seguinte PVI para uma EDO de 2ª ordem:

$$\begin{cases} y''(x) + a(x)y'(x) + b(x)y(x) = r(x), \\ y(x_0) = Y_0, \qquad y'(x_0) = Y_0', \end{cases}$$

onde $a, b, r : I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ são funções contínuas num intervalo I e $x_0 \in I$.

$$z(x) = \begin{bmatrix} z_1(x) \\ z_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y(x) \\ y'(x) \end{bmatrix}$$

$$z'(x) = \begin{bmatrix} y'(x) \\ y''(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2(x) \\ r(x) - b(x)z_1(x) - a(x)z_2(x) \end{bmatrix} = g(x, z(x))$$

$$z(x_0) = \begin{bmatrix} y(x_0) \\ y'(x_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_0 \\ Y_0' \end{bmatrix} = Z_0$$

• Antes de iniciar a análise numérica do PVI (P) apresentamos alguns resultados teóricos sobre este problema que ajudam a compreender melhor os métodos numéricos que discutiremos a seguir. São tratados com mais pormenor na disciplina de Análise Complexa e Equações Diferenciais.

Proposição (Teorema de Picard-Lindelöf). Seja $f : D \subset \mathbb{R}^{1+1} \to \mathbb{R}$ uma função contínua numa região D e que satisfaz a uma condição de Lipschitz em relação à 2ª variável com constante L em D, isto é,

$$|f(x,u) - f(x,v)| \leq L|u - v|, \qquad \forall (x,u), (x,v) \in D.$$

Então para qualquer $(x_0, Y_0) \in D$ o PVI (P) tem uma solução única definida num intervalo $[x_0 - \alpha, x_0 + \alpha]$ para algum $\alpha > 0$ suficientemente pequeno.

Notas.

(a) Sendo

$$D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^{1+1} : \; |x - x_0| \leq a, \;\; |y - Y_0| \leq b\},$$

com $a, b > 0$, então

$$\alpha = \min\left\{a, \frac{b}{M}\right\}, \qquad M = \max_{(x,y)\in D} |f(x,y)|.$$

(b) Sendo
$$D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^{1+1} : \; |x - x_0| \le a, \;\; |y| < \infty\},$$
então $\alpha = a$.

(c) Sendo $D = \mathbb{R}^{1+1}$, f contínua em D e satisfazendo a uma condição de Lipschitz em qualquer conjunto
$$D_a = \{(x, y) \in \mathbb{R}^{1+1} : \; |x| \le a, \;\; |y| < \infty\},$$
então $\alpha = \infty$.

Notas.

(a) Se $D \subset \mathbb{R}^{1+d}$ o teorema continua válido, sendo agora a condição de Lipschitz
$$\|f(x, u) - f(x, v)\| \le L\|u - v\|, \qquad \forall (x, u), (x, v) \in D,$$
onde $\| \cdot \|$ designa uma qualquer norma vectorial em $\mathbb{R}^d$.

(b) Se $f \in C^1(D), \quad D \subset \mathbb{R}^{1+1}$, então f satisfaz a uma condição de Lipschitz com constante
$$L = \sup_{(x,y)\in D} \left| \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right| .$$

(c) Se $f \in C^1(D), \quad D \subset \mathbb{R}^{1+d}$, então f satisfaz a uma condição de Lipschitz com constante
$$L = \sup_{(x,y)\in D} \|J_f(x, y)\|,$$
onde $\| \cdot \|$ é a norma matricial induzida pela norma vectorial utilizada em $\mathbb{R}^d$.

Exemplo. O PVI
$$\begin{cases} y'(x) = [y(x)]^2, \\ y(x_0) = Y_0, \end{cases}$$
onde $x_0 \in \mathbb{R}, Y_0 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ tem a solução única
$$Y(x) = \frac{1}{Y_0^{-1} - (x - x_0)},$$
definida para $x - x_0 < Y_0^{-1}$, se $Y_0 > 0$, e para $x - x_0 > Y_0^{-1}$, se $Y_0 < 0$.

Exemplo. O PVI
$$\begin{cases} y'(x) = 2\sqrt{y(x)}, \\ y(0) = 0. \end{cases}$$
tem uma infinidade de soluções dadas por
$$Y_c(x) = \begin{cases} 0, & x \le c, \\ (x - c)^2, & x > c, \end{cases}$$

onde $c \geq 0$. O PVI tem também a solução

$$\tilde{Y}(x) = 0, \qquad x \in \mathbb{R}.$$

Note-se que $f(y) = 2\sqrt{y}$ é contínua em $[0, \infty[$ mas não satisfaz a uma condição de Lipschitz em qualquer intervalo que contenha a origem. Consequentemente o teorema de Picard-Lindelöf não é aplicável.

Exemplo. O PVI

$$\begin{cases} y'(x) = \lambda y(x) + g(x), \\ y(x_0) = Y_0, \end{cases}$$

onde $g \in C(\mathbb{R})$, $\lambda, x_0, Y_0 \in \mathbb{R}$, tem a solução única definida em $\mathbb{R}$,

$$Y(x) = Y_0 e^{\lambda(x-x_0)} + \int_{x_0}^{x} e^{\lambda(x-t)} g(t)\, dt.$$

Introdução: métodos numéricos

• Consideremos o PVI

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \\ y(x_0) = Y_0, \end{cases} \tag{P}$$

onde $f : D \subset \mathbb{R}^{1+1} \to \mathbb{R}$ é uma função contínua numa região D e que satisfaz a uma condição de Lipschitz em relação à $2^{\underline{a}}$ variável. Para qualquer $(x_0, Y_0) \in D$ o PVI (P) tem uma solução única $Y : I_\alpha \to \mathbb{R}$, para algum $\alpha > 0$.

Pretendemos obter uma aproximação desta solução única do PVI (P) no intervalo $[x_0, b] \subset I_\alpha$.

Consideremos então uma partição do intervalo $[x_0, b]$:

$$x_0 < x_1 < \cdots < x_N = b,$$

com

$$x_n = x_0 + nh, \qquad n = 0, 1, \ldots, N, \qquad h = \frac{b - x_0}{N},$$

onde $h > 0$ é o **passo** da partição.

O objectivo dos métodos numéricos para a resolução do PVI (P) é construir aproximações $y_0, y_1, \ldots, y_N$ para os valores da solução exacta $Y(x_0), Y(x_1), \ldots, Y(x_N)$ nos pontos da partição $x_0, x_1, \ldots, x_N$.

Definição. Um **método de passo simples** ou **único** para a resolução do PVI (P) consiste em construir uma aproximação y_n para a solução exacta $Y(x_n)$ em cada ponto x_n pela fórmula

$$y_{n+1} = y_n + h\, \varphi(x_{n+1}, y_{n+1}, x_n, y_n; h), \qquad n \geq 0,$$

onde y_0 é tal que $(x_0, y_0) \in D$ e $\varphi : D^2 \times]0, \infty[\to \mathbb{R}$ é uma função dada em termos de f, designada por vezes por *função incremento*. Se φ não depender de y_{n+1} o método diz-se **explícito**; caso contrário o método diz-se **implícito**.

Definição. Um **método de passo múltiplo** ou **multipasso**, com $p+1$ passos, $p \in \mathbb{N}_1$, para a resolução do PVI (P) consiste em construir uma aproximação y_n para a solução exacta $Y(x_n)$ em cada ponto x_n pela fórmula

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{p} a_k y_{n-k} + h\varphi(x_{n+1}, y_{n+1}, x_n, y_n, x_{n-1}, y_{n-1}, \ldots, x_{n-p}, y_{n-p}; h), \qquad n \geq p,$$

onde $y_0, y_1, \ldots, y_p$ são valores dados, ou obtidos por outro método, tais que $(x_0, y_0), \ldots, (x_p, y_p) \in D$ e $\varphi : D^{p+2} \times]0, \infty[\to \mathbb{R}$. Se φ não depender de y_{n+1} o método diz-se **explícito**; caso contrário o método diz-se **implícito**.

Exemplos. Os quatro primeiros são métodos de passo simples. O quarto e o sexto são métodos implícitos

(i) Método de Euler (ordem 1)

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \qquad n \geq 0.$$

(ii) Método de Taylor de ordem 2

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right)(x_n, y_n), \qquad n \geq 0.$$

(iii) Método de Runge-Kutta clássico de ordem 2

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4}\left[f(x_n, y_n) + 3f\left(x_n + \frac{2h}{3}, y_n + \frac{2h}{3}f(x_n, y_n)\right)\right], \qquad n \geq 0.$$

(iv) Método trapezoidal ou método de Adams-Moulton com um passo (ordem 2)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_{n+1}, y_{n+1}) + f(x_n, y_n)], \qquad n \geq 0.$$

(v) Método de Adams-Bashforth com dois passos (ordem 2)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[3f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})], \qquad n \geq 1.$$

(vi) Método de Adams-Moulton com dois passos (ordem 3)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 8f(x_n, y_n) - f(x_{n-1}, y_{n-1})], \qquad n \geq 1.$$

Métodos de passo simples: consistência e convergência

Definição. Um **método de passo simples** ou **único**, **explícito**, para a resolução do PVI (P) consiste em construir uma aproximação y_n para a solução exacta $Y(x_n)$ em cada ponto x_n pela fórmula

$$y_{n+1} = y_n + h\,\varphi(x_n, y_n; h), \qquad n \in \mathbb{N},$$

onde y_0 é tal que $(x_0, y_0) \in D$ e $\varphi : D \times]0, \infty[\to \mathbb{R}$ é uma função dada em termos de f.

Exemplo. "Dedução" do método de Euler: (i) a partir da fórmula de Taylor; (ii) a partir da equação integral equivalente usando uma fórmula de quadratura para aproximar o integral.

(i) Fórmula de Taylor

$$Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2} Y''(x+\theta h), \qquad \theta \in]0,1[.$$

$$Y(x+h) = Y(x) + hf(x, Y(x)) + \frac{h^2}{2} \left(\frac{d}{dx} f(x, Y(x)) \right) (x+\theta h).$$

(ii) Fórmula de quadratura aplicada à equação integral

$$Y(x+h) = Y(x) + \int_x^{x+h} f(t, Y(t))\, dt,$$

$$\int_x^{x+h} g(t)\, dt = hg(x) + \frac{h^2}{2} g'(x+\theta h),$$

$$Y(x+h) = Y(x) + hf(x, Y(x)) + \frac{h^2}{2} \left(\frac{d}{dx} f(x, Y(x)) \right) (x+\theta h).$$

Desprezando os termos de $\mathcal{O}(h^2)$ obtém-se

$$Y(x+h) \approx Y(x) + hf(x, Y(x)),$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n).$$

A quantidade

$$\tau(x, y; h) = \frac{Y(x+h) - Y(x)}{h} - f(x, Y(x)) = \frac{h}{2} Y''(x+\theta h),$$

designada por *erro de discretização local*, desempenha um papel importante no estudo dos métodos numéricos para EDO's.

Nota. Qualquer destas abordagens pode ser generalizada para obter métodos de ordem mais elevada.

Definição. Para cada $(x, y) \in D$ seja $Z(t)$ a solução única do PVI

$$\begin{cases} z'(t) = f(t, z(t)), \\ z(x) = y. \end{cases}$$

Chama-se **erro de discretização local** a

$$\tau(x, y; h) = \frac{Z(x+h) - Z(x)}{h} - \varphi(x, y; h), \qquad Z(x) = y.$$

O método de passo simples diz-se **consistente** (com o PVI) se

$$\lim_{h \to 0} \tau(x, y; h) = 0,$$

uniformemente para todos os $(x, y) \in D$, e diz-se ter **consistência de ordem** $q \in \mathbb{N}_1$ se

$$\tau(x, y; h) = \mathcal{O}(h^q), \qquad h \to 0,$$

$\forall (x, y) \in D$.

Nota. $F(h) = \mathcal{O}(h^q)$, $h \to 0+$, $q > 0$, se existirem $h_0 > 0$ e $C > 0$ tais que

$$|F(h)| \leq Ch^q, \qquad \forall h \in]0, h_0].$$

Nota. O erro de discretização local é a diferença entre a diferença dividida da solução exacta do PVI e a diferença dividida da solução aproximada do PVI, para o mesmo passo h. É pois uma medida da forma como a solução exacta satisfaz à equação do método numérico.

Proposição. Um método de passo simples é consistente se e só se

$$\lim_{h \to 0} \varphi(x, y; h) = f(x, y),$$

uniformemente para todos os $(x, y) \in D$.

Proposição. O método de Euler é consistente. Se $f \in C^1(D)$ então o método de Euler tem consistência de ordem 1.

Definição. Sejam $y_0, y_1, \ldots, y_N$ os valores aproximados obtidos por um método de passo simples para os valores $Y(x_0), Y(x_1), \ldots, Y(x_N)$ da solução do PVI (P). Chama-se **erro de discretização global** a

$$e_n = e_n(h) := Y(x_n) - y_n, \qquad n = 0, 1, \ldots, N,$$

e chama-se **erro de discretização global máximo** a

$$E = E(h) := \max_{0 \leq n \leq N} |e_n(h)|.$$

O método de passo simples diz-se **convergente** se

$$\lim_{h \to 0} E(h) = 0,$$

e diz-se ter **convergência de ordem** q se

$$E(h) = \mathcal{O}(h^q), \qquad h \to 0.$$

Proposição. Considere-se um método de passo simples em que a função φ é contínua e Lipschitziana em relação à segunda variável com constante de Lipschitz M independente de h, isto é,

$$\exists h_0 > 0, \ \ \exists M > 0 : \ \ \forall h \in]0, h_0], \forall (x, y), (x, z) \in D \Rightarrow |\varphi(x, y; h) - \varphi(x, z; h)| \leq M|y - z|.$$

Então o erro de discretização global satisfaz à desigualdade

$$|e_n(h)| \leq e^{M(x_n-x_0)}|e_0(h)| + \frac{\tau(h)}{M}\left[e^{M(x_n-x_0)}-1\right], \qquad 0 \leq n \leq N(h),$$

e o erro de discretização global máximo satisfaz à desigualdade

$$E(h) \leq e^{M(b-x_0)}|e_0(h)| + \frac{\tau(h)}{M}\left[e^{M(b-x_0)}-1\right],$$

onde

$$\tau(h) = \max_{0\leq n\leq N(h)-1} |\tau(x_n, Y(x_n); h)|.$$

Se o método for consistente e $e_0(h) \to 0,\ h \to 0$, então o método é convergente. Se o método tiver consistência de ordem q e $e_0(h) = O(h^q),\ h \to 0$, então o método tem convergência de ordem q.

Dem.: $(\cdots)$

Métodos de passo simples: métodos de Taylor

- Vimos como o método de Euler pode ser "deduzido" a partir da fórmula de Taylor

$$Y(x+h) = Y(x) + hY'(x) + \frac{h^2}{2}Y''(x+\theta h), \qquad \theta \in]0,1[,$$

considerando a aproximação

$$Y(x+h) \approx Y(x) + hY'(x),$$

e usando a EDO para exprimir a derivada $Y'(x)$ em termos de $Y(x)$:

$$Y'(x) = f(x, Y(x)).$$

Considerando a fórmula de Taylor de ordem q

$$Y(x+h) = \sum_{j=0}^{q} \frac{h^j}{j!}Y^{(j)}(x) + \frac{h^{q+1}}{(q+1)!}Y^{(q+1)}(x+\theta h), \qquad \theta \in]0,1[,$$

e procedendo de forma semelhante obtemos os métodos de Taylor de ordem q. As sucessivas derivadas $Y^{(j)}(x)$ são obtidas a partir da EDO:

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

$$Y^{(j)}(x) = (d_f^{j-1} f)(x, Y(x)), \qquad j \geq 3,$$

onde d_f designa o operador diferencial parcial definido por

$$d_f g = g_x + f g_y = \frac{\partial g}{\partial x} + f\frac{\partial g}{\partial y}.$$

para qualquer função g diferenciável em D.

Definição. Os **métodos de Taylor de ordem** q são métodos de passo simples em que a função de incremento é dada por

$$\varphi(x, y; h) = \sum_{k=0}^{q-1} \frac{h^k}{(k+1)!} \left(d_f^k f\right)(x, y).$$

Proposição. O método de Taylor de ordem $q \in \mathbb{N}_1$ é consistente. Se $f \in C^q(D)$ então o método tem consistência de ordem q.

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. O método de Taylor de ordem $q \in \mathbb{N}_1$ é convergente. Se $f \in C^q(D)$ então o método tem convergência de ordem q.

Dem.: $(\cdots)$

Métodos de passo simples: métodos de Runge-Kutta

• Os métodos de Runge-Kutta imitam os métodos de Taylor de ordem q mas requerem apenas o cálculo de valores da função f e não das suas derivadas.

Definição. Os **métodos de Runge-Kutta de** s **etapas, explícitos**, são métodos de passo simples em que a função incremento é

$$\varphi(x, y; h) = \sum_{j=1}^{s} \gamma_j \varphi_j(x, y; h),$$

onde

$$\begin{cases} \varphi_1(x, y; h) = f(x, y) \\ \varphi_j(x, y; h) = f\left(x + \alpha_j h, y + h\sum_{i=1}^{j-1} \beta_{ji}\varphi_i(x, y; h)\right), \qquad 2 \le j \le s. \end{cases}$$

Os coeficientes são determinados por forma a tornar a ordem de consistência, e, portanto, a ordem de convergência, a maior possível. A ordem de consistência q é a ordem ($\mathcal{O}(h^q)$, $h \to 0$) do erro de discretização local:

$$\tau(x, y; h) = \frac{Z(x+h) - y}{h} - \varphi(x, y; h), \qquad Z(x) = y.$$

Proposição. (Teorema de Butcher)

(1) $s \geq q$; (2) $s > q \geq 5$.

Nota.

s	1	2	3	4	5	6	7	8	$\cdots$
$q_{\max}$	1	2	3	4	4	5	6	6	$\cdots$
$\nu(s)$	1	4	8	13	19	26	34	43	$\cdots$

$$\nu(s) = \frac{s(s+3)}{2} - 1 \qquad \text{(número de coeficientes)}$$

Quadro de Butcher:

$$\begin{array}{c|ccccc}
\alpha_1 & & & & & \\
\alpha_2 & \beta_{21} & & & & \\
\alpha_3 & \beta_{31} & \beta_{32} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
\alpha_q & \beta_{q1} & \beta_{q2} & \cdots & \beta_{q,q-1} & \\
\hline
 & \gamma_1 & \gamma_2 & \cdots & \gamma_{q-1} & \gamma_q
\end{array}$$

Exemplo. Os seguintes métodos de Runge-Kutta encontram-se no Anexo. Apresentam-se aqui os respectivos quadros de Butcher.

◇ Métodos de Runge-Kutta de ordem 2 ($s = 2$)
- Método de Euler modificado ou do ponto médio
- Método de Runge-Kutta clássico
- Método de Heun

$$\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
1 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}$$

◇ Métodos de Runge-Kutta de ordem 3 ($s = 3$)
- Método de Runge-Kutta clássico
- Método de Runge-Kutta-Nystrom

– Método de Runge-Kutta-Heun

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & & \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\ \hline & \frac{1}{4} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\ \hline & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} \end{array}$$

◇ Métodos de Runge-Kutta de ordem 4 ($s = 4, s = 5$)
  – Método de Runge-Kutta clássico ($s = 4$)
  – Método de Runge-Kutta-Gill ($s = 4$)
  – Método de Runge-Kutta-Merson ($s = 5$)

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}-1}{2} & \frac{2-\sqrt{2}}{2} & & \\ 1 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{2+\sqrt{2}}{2} & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2-\sqrt{2}}{6} & \frac{2+\sqrt{2}}{6} & \frac{1}{6} \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccccc} 0 & & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{8} & 0 & \frac{3}{8} & & \\ 1 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{3}{2} & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Proposição. Os métodos de Runge-Kutta de ordem $q = 2, 3, 4$ considerados são consistentes e convergentes. Se $f \in C^q(D)$ então os métodos têm consistência e convergência de ordem q.

Dem.: $(\cdots)$

Exemplo. Considere os métodos de Runge-Kutta de 2 etapas,

$$\varphi(x,y;h) = \gamma_1 f(x,y) + \gamma_2 f\left(x+\alpha h, y+\beta h f(x,y)\right)$$

Determine os parâmetros $\alpha, \beta, \gamma_1, \gamma_2$ por forma a que os métodos tenham a maior ordem de consistência possível.

$$\tau(x,y;h) = \frac{Z(x+h)-y}{h} - \varphi(x,y;h) \qquad (y = Z(x))$$

$$\begin{aligned} Z(x+h) &= Z(x) + hZ'(x) + \frac{h^2}{2}Z''(x) + \frac{h^3}{6}Z'''(x) + \mathcal{O}(h^4) \\ &= Z(x) + hf(x,Z(x)) + \frac{h^2}{2}(d_f f)(x,Z(x)) + \frac{h^3}{6}(d_f^2 f)(x,Z(x)) + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

$$d_f f = f_x + f f_y$$

$$d_f^2 f = f_{xx} + f_x f_y + 2 f f_{xy} + f f_y^2 + f^2 f_{yy}$$

$$\varphi(x,y;h) = \varphi(x,y;0) + h\frac{\partial\varphi}{\partial h}(x,y;0) + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial h^2}(x,y;0) + \mathcal{O}(h^3)$$

$$\begin{aligned} \tau(x,y;h) = {} & f(x,y) - \varphi(x,y;0) + \frac{h}{2}\left[(d_f f)(x,y) - 2\frac{\partial\varphi}{\partial x}(x,y;0)\right] \\ & + \frac{h^2}{6}\left[(d_f^2 f)(x,y) - 3\frac{\partial^2\varphi}{\partial h^2}(x,y;0)\right] + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

$$\varphi(x,y;0) = (\gamma_1+\gamma_2) f(x,y)$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial h}(x,y;0) = \gamma_2[\alpha f_x + \beta f f_y](x,y)$$

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial h^2}(x,y;0) = \gamma_2[\alpha^2 f_{xx} + 2\alpha\beta f f_{xy} + \beta^2 f^2 f_{yy}](x,y)$$

$$\begin{aligned} \tau(x,y;h) = {} & (1-\gamma_1-\gamma_2) f(x,y) + h\left[\left(\frac{1}{2} - \alpha\gamma_2\right) f_x + \left(\frac{1}{2} - \beta\gamma_2\right) f f_y\right](x,y) \\ & + \frac{h^2}{6}\left[\left(1-3\gamma_2\alpha^2\right) f_{xx} + 2\left(1-3\gamma_2\alpha\beta\right) f f_{xy} + \left(1-3\gamma_2\beta^2\right) f^2 f_{yy} \right. \\ & \left. + f_x f_y + f f_y^2\right](x,y) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

$$\boxed{\gamma_1 = 1-\gamma_2, \qquad \alpha = \beta = \frac{1}{2\gamma_2}}$$

$$\boxed{\varphi(x,y;h) = (1-\gamma_2) f(x,y) + \gamma_2 f\left(x + \frac{h}{2\gamma_2}, y + \frac{h}{2\gamma_2} f(x,y)\right)}$$

$$\begin{aligned} \tau(x,y;h) &= \frac{h^2}{6}\left[\left((1 - \frac{3}{4\gamma_2}\right)(f_{xx} + 2 f f_{xy} + f^2 f_{yy}) + f_x f_y + f f_y^2\right](x,y) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= c(f,\gamma_2) h^2 + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

$$|c(f,\gamma_2)| \leq \frac{1}{6}\left[\left|1 - \frac{3}{4\gamma_2}\right| |f_{xx} + 2 f f_{xy} + f^2 f_{yy}| + \left|f_x f_y + f f_y^2\right|\right]$$

Casos particulares:

– Método de Euler modificado ou do ponto médio ($\gamma_2 = 1$):

$$\varphi(x, y; h) = f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}\, f(x, y)\right)$$

– Método de Runge-Kutta clássico de ordem 2 $\left(\gamma_2 = \dfrac{3}{4}\right)$:

$$\varphi(x, y; h) = \frac{1}{4}\left[f(x, y) + 3f\left(x + \frac{2h}{3}, y + \frac{2h}{3}\, f(x, y)\right)\right]$$

– Método de Heun $\left(\gamma_2 = \dfrac{1}{2}\right)$:

$$\varphi(x, y; h) = \frac{1}{2}\left[f(x, y) + f\left(x + h, y + hf(x, y)\right)\right]$$

Exemplo. Considere o problema de valor inicial

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

onde $f : I \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ é contínua e Lipschitziana em relação à segunda variável, I é um intervalo de $\mathbb{R}$, $x_0 \in I$, e y_0 é uma constante real.

(a) Obtenha um valor aproximado y_2^E para $Y(x_0 + h)$ usando dois passos de comprimento $h/2$ do método de Euler.

(b) Obtenha um valor aproximado y_1^T para $Y(x_0 + h)$ usando um passo de comprimento h do método de Taylor de 2ª ordem.

(c) Obtenha um valor aproximado y_1^{RK} para $Y(x_0 + h)$ usando um passo de comprimento h de qualquer dos métodos de Runge-Kutta de 2ª ordem ($s = 2$).

(d) Particularize os resultados das alíneas anteriores para $f(x, y) = x^2 - y$. Tendo em atenção que a solução exacta do problema de valor inicial é,

$$Y(x) = x^2 - 2x + 2 + Ke^{x_0 - x}, \quad \text{onde } K = y_0 - x_0^2 + 2x_0 - 2,$$

obtenha expansões em série de Mac-Laurin de potências de h para os erros

$$Y(x_0 + h) - y_2^E, \qquad Y(x_0 + h) - y_1^T, \qquad Y(x_0 + h) - y_1^{RK}.$$

Resolução:

(a) $y_1 = y_0 + \dfrac{h}{2}\, f(x_0, y_0)$

$$y_2^E = y_1 + \frac{h}{2}\, f(x_1, y_1), \qquad x_1 = x_0 + \frac{h}{2}$$

$$y_2^E = y_0 + \frac{h}{2}\left[f(x_0,y_0) + f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}\, f(x_0,y_0)\right)\right]$$

(b) $y_1^T = y_0 + hf(x_0,y_0) + \dfrac{h^2}{2}\,(d_f f)(x_0,y_0)$

$$d_f f = f_x + f f_y$$

(c) $y_1^{RK} = y_0 + h\left[(1-\gamma)f(x_0,y_0) + \gamma f\left(x_0 + \dfrac{h}{2\gamma}, y_0 + \dfrac{h}{2\gamma}\, f(x_0,y_0)\right)\right]$

(d) $y_2^E = y_0 + h(x_0^2 - y_0) + \dfrac{h^2}{4}\,(y_0 - x_0^2 + 2x_0) + \dfrac{h^3}{8}$

$$y_1^T = y_0 + h(x_0^2 - y_0) + \frac{h^2}{2}\,(y_0 - x_0^2 + 2x_0)$$

$$y_1^{RK} = y_0 + h(x_0^2 - y_0) + \frac{h^2}{2}\,(y_0 - x_0^2 + 2x_0) + \frac{h^3}{2\gamma}$$

$$Y(x_0+h) - y_2^E = \frac{h^2}{4}\,(K+2) + \mathcal{O}(h^3)$$

$$Y(x_0+h) - y_1^T = -\frac{h^3}{6}\,K + \mathcal{O}(h^4)$$

$$Y(x_0+h) - y_1^{RK} = -\frac{h^3}{12}\left(\frac{3}{\gamma} + 2K\right) + \mathcal{O}(h^4)$$

Exemplo. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x), z(x)), \\ z'(x) = g(x, y(x), z(x)), \\ y(x_0) = y_0, \qquad z(x_0) = z_0, \end{cases}$$

onde $f, g : I \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ são contínuas e Lipschitzianas em relação às segunda e terceira variáveis, I é um intervalo de $\mathbb{R}$, $x_0 \in I$, e y_0, z_0 são constantes reais. Repita as três primeiras alíneas do exemplo anterior.

Resolução:

$$W(x) = \begin{bmatrix} y(x) \\ z(x) \end{bmatrix}, \qquad W'(x) = \begin{bmatrix} y'(x) \\ z'(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x,y(x),z(x)) \\ g(x,y(x),z(x)) \end{bmatrix} = F(x, W(x))$$

$$W(x_0) = \begin{bmatrix} y(x_0) \\ z(x_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = W_0$$

(a) $W_1 = W_0 + \dfrac{h}{2}\, F(x_0, W_0) = \begin{bmatrix} y_0 + \frac{h}{2}\, f(x_0,y_0,z_0) \\ z_0 + \frac{h}{2}\, g(x_0,y_0,z_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$

$$W_2^E = W_1 + \frac{h}{2}\,F(x_1, W_1) = \begin{bmatrix} y_1 + \frac{h}{2}\,f(x_1, y_1, z_1) \\ z_1 + \frac{h}{2}\,g(x_1, y_1, z_1) \end{bmatrix}, \qquad x_1 = x_0 + \frac{h}{2}$$

(b) $W_1^T = W_0 + hF(x_0, W_0) + \dfrac{h^2}{2}\,(d_F F)(x_0, W_0)$

$$d_F F = \left(\frac{\partial}{\partial x} + F \cdot \nabla_W\right) F = \left(\frac{\partial}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial y} + g\frac{\partial}{\partial z}\right) F$$

$$W_1^T = \begin{bmatrix} y_0 + hf(x_0, y_0, z_0) + \frac{h^2}{2}\,(f_x + ff_y + gf_z)(x_0, y_0, z_0) \\ z_0 + hg(x_0, y_0, z_0) + \frac{h^2}{2}\,(g_x + fg_y + gg_z)(x_0, y_0, z_0) \end{bmatrix}$$

(c) $W_1^{RK} = W_0 + h\left[(1-\gamma)F(x_0, W_0) + \gamma F\left(x_0 + \dfrac{h}{2\gamma}, W_0 + \dfrac{h}{2\gamma}\,F(x_0, W_0)\right)\right]$

$$\tilde{x}_1 = x_0 + \frac{h}{2\gamma}$$

$$\tilde{W}_1 = W_0 + \frac{h}{2\gamma}\,F(x_0, W_0) = \begin{bmatrix} y_0 + \frac{h}{2\gamma}\,f(x_0, y_0, z_0) \\ z_0 + \frac{h}{2\gamma}\,g(x_0, y_0, z_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{z}_1 \end{bmatrix}$$

$$W_1^{RK} = \begin{bmatrix} y_0 + h\,[(1-\gamma)f(x_0, y_0, z_0) + \gamma f(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1)] \\ z_0 + h\,[(1-\gamma)g(x_0, y_0, z_0) + \gamma g(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1)] \end{bmatrix}$$

Exemplo. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y''(x) = g(x, y(x), y'(x)), \\ y(x_0) = y_0, \qquad y'(x_0) = z_0, \end{cases}$$

onde $g : I \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ é contínua e Lipschitziana em relação às segunda e terceira variáveis, I é um intervalo de $\mathbb{R}$, $x_0 \in I$, e y_0, z_0 são constantes reais. Repita as três primeiras alíneas dos exemplos anteriores.

Resolução:

$$W(x) = \begin{bmatrix} y(x) \\ z(x) \end{bmatrix}, \qquad W'(x) = \begin{bmatrix} y'(x) \\ y''(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z(x) \\ g(x, y(x), z(x)) \end{bmatrix} = F(x, W(x))$$

$$W(x_0) = \begin{bmatrix} y(x_0) \\ z(x_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = W_0$$

Caso anterior com $f(x, y, z) = z$.

(a) $W_1 = \begin{bmatrix} y_0 + \frac{h}{2}\,z_0 \\ z_0 + \frac{h}{2}\,g(x_0, y_0, z_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$

$$W_2^E = \begin{bmatrix} y_1 + \frac{h}{2}\, z_1 \\ z_1 + \frac{h}{2}\, g(x_1, y_1, z_1), \end{bmatrix}, \qquad x_1 = x_0 + \frac{h}{2}$$

(b) $$W_1^T = \begin{bmatrix} y_0 + hz_0 + \frac{h^2}{2}\, g(x_0, y_0, z_0) \\ z_0 + hg(x_0, y_0, z_0) + \frac{h^2}{2}\, (g_x + zg_y + gg_z)(x_0, y_0, z_0) \end{bmatrix}$$

(c) $$\tilde{x}_1 = x_0 + \frac{h}{2\gamma}, \qquad \tilde{W}_1 = \begin{bmatrix} y_0 + \frac{h}{2\gamma}\, z_0 \\ z_0 + \frac{h}{2\gamma}\, g(x_0, y_0, z_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{z}_1 \end{bmatrix}$$

$$W_1^{RK} = \begin{bmatrix} y_0 + h\,[(1-\gamma)z_0 + \gamma\tilde{z}_1] \\ z_0 + h\,[(1-\gamma)g(x_0, y_0, z_0) + \gamma g(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{z}_1)] \end{bmatrix}$$

Métodos multipasso lineares: introdução

Definição. Um **método multipasso linear** (MPL) com $p+1$ passos ($p \geq 0$) para a resolução do PVI (P) consiste em construir uma aproximação y_n para a solução exacta $Y(x_n)$ em cada ponto $x_n = x_0 + nh,\ n = 0, 1, \ldots, N$, pela fórmula

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{p} a_k y_{n-k} + h \sum_{k=-1}^{p} b_k f(x_{n-k}, y_{n-k}), \qquad n \geq p,$$

onde $y_0, y_1, \ldots, y_p$ são valores dados (ou obtidos por outro método) e $a_0, a_1, \ldots, a_p$, $b_{-1}, b_0, b_1, \ldots, b_p$ são constantes reais tais que $|a_p| + |b_p| \neq 0$. Se $b_{-1} = 0$ o método diz-se **explícito**; se $b_{-1} \neq 0$ o método diz-se **implícito**.

• Uma classe importante de métodos MPL baseia-se na integração numérica. A ideia geral é a seguinte. Reescreve-se a EDO como uma equação integral

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_{n-r}) + \int_{x_{n-r}}^{x_{n+1}} f(t, Y(t))\, dt,$$

para algum $r \geq 0$ e $n \geq r$; constrói-se um polinómio interpolador de grau $\nu \leq p+1$ para f e substitui-se f por este polinómio no integral; desprezando o erro de quadratura chega-se ao método pretendido. Entre os métodos obtidos por esta forma temos:

◇ Métodos de Adams: $r = 0,\ \ \nu = p$ ou $\nu = p+1$

– Métodos de Adams explícitos ou de Adams-Bashforth: $\nu = p,\ \ p \geq 0$
– Métodos de Adams implícitos ou de Adams-Moulton: $\nu = p+1,\ \ p \geq -1$

◇ Métodos de Nyström: $r = 1,\ \ \nu = p,\ \ p \geq 1$

◇ Métodos de Milne-Thomson: $r = 1,\ \ \nu = p+1,\ \ p \geq 1$

Iremos considerar em detalhe os métodos de Adams que são os métodos MPL mais usados. Em particular são usados para produzir algoritmos preditor-corrector em que o erro é controlado por variação do passo h e da ordem do método, simultâneamente. O nosso estudo dos métodos de Adams será no entanto feito como caso particular dos métodos MPL acima definidos e não a partir da integração numérica.

Métodos MPL: consistência

• A consistência é uma propriedade que procura avaliar em que medida a solução exacta do PVI satisfaz à equação do método numérico para a sua resolução.

Definição. Para cada $(x, y) \in D$ seja $Y(t)$ a solução única do PVI

$$\begin{cases} z'(t) = f(t, z(t)), \\ z(x) = y. \end{cases}$$

Chama-se **erro de discretização local** a

$$\tau(x, y; h) = \frac{1}{h}\left[Z(x+h) - \sum_{k=0}^{p} a_k Z(x-kh)\right] - \sum_{k=-1}^{p} b_k f(x-kh, Z(x-kh)).$$

O método MPL diz-se **consistente** (com o PVI) se

$$\lim_{h\to 0} \tau(x, y; h) = 0,$$

uniformemente para todos os $(x, y) \in D$, e diz-se ter **consistência de ordem** $q \in \mathbb{N}_1$ se

$$\tau(x, y; h) = \mathcal{O}(h^q), \qquad h \to 0,$$

$\forall (x, y) \in D$.

Proposição. Sejam $C_0, C_1, \ldots$ as quantidades definidas em termos dos parâmetros de um método MPL por:

$$C_0 = 1 - \sum_{k=0}^{p} a_k, \qquad C_1 = 1 + \sum_{k=0}^{p} k a_k - \sum_{k=-1}^{p} b_k,$$
$$C_j = 1 - \sum_{k=0}^{p} (-k)^j a_k - j \sum_{k=-1}^{p} (-k)^{j-1} b_k, \qquad j = 2, 3, \ldots$$

Então:

(1) Um método MPL é consistente com o PVI (P) para qualquer $f \in C^1(D)$ se e só se

$$C_0 = C_1 = 0.$$

(2) Um método MPL tem consistência de ordem $q \geq 1$ para qualquer $f \in C^{q+1}(D)$ se e só se

$$C_0 = C_1 = C_2 = \cdots = C_q = 0, \qquad C_{q+1} \neq 0.$$

O erro de discretização local tem a forma

$$\tau(x, y; h) = h^q \, \frac{C_{q+1}}{(q+1)!} \, (d_f^q f)(x, y) + \mathcal{O}(h^{q+1})$$

Dem.: Obtém-se o desenvolvimento:

$$\tau(x, y; h) = C_0 Z(x) h^{-1} + \sum_{j=1}^{q+1} \frac{C_j}{j!} Z^{(j)}(x)\, h^{j-1} + \mathcal{O}(h^{q+1})$$

Métodos MPL: métodos de Adams

Definição. Os **métodos de Adams** são métodos MPL da forma

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=p_0}^{p} b_k f(x_{n-k}, y_{n-k}), \qquad n \geq p,$$

onde $p_0 = 0$ (métodos explícitos) ou $p_0 = -1$ (métodos implíctos) e os $p + 1 - p_0 = q$ parâmetros b_k são unicamente determinados pelo sistema de q equações

$$C_1 = C_2 = \cdots = C_q = 0,$$

onde

$$C_1 = 1 - \sum_{k=p_0}^{p} b_k, \qquad C_j = 1 - j \sum_{k=p_0}^{p} (-k)^{j-1} b_k, \quad j = 2, \ldots, q.$$

Proposição. O método de Adams com $p+1$ passos tem consistência de ordem $q = p+1-p_0$, isto é,

(1) $q = p + 1$, se é explícito;

(2) $q = p + 2$, se é implícito.

Exemplos. Apresentam-se no Anexo os primeiros métodos de Adams. Aqui apresentam-se quadros resumos dos coeficientes e da constante que ocorre no termo de ordem mais baixa do erro de discretização local.

Métodos de Adams-Bashforth ($p_0 = 0$)							
p	q	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4	$C_{q+1}/(q+1)!$
1	2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$				$\frac{5}{12}$
2	3	$\frac{23}{12}$	$-\frac{16}{12}$	$\frac{5}{12}$			$\frac{3}{8}$
3	4	$\frac{55}{24}$	$-\frac{59}{24}$	$\frac{37}{24}$	$-\frac{9}{24}$		$\frac{251}{720}$
4	5	$\frac{1901}{720}$	$-\frac{2774}{720}$	$\frac{2616}{720}$	$-\frac{1274}{720}$	$\frac{251}{720}$	$\frac{95}{288}$

Métodos de Adams-Moulton ($p_0 = -1$)							
p	q	b_{-1}	b_0	b_1	b_2	b_3	$C_{q+1}/(q+1)!$
0	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				$-\frac{1}{12}$
1	3	$\frac{5}{12}$	$\frac{8}{12}$	$-\frac{1}{12}$			$-\frac{1}{24}$
2	4	$\frac{9}{24}$	$\frac{19}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{1}{24}$		$-\frac{19}{720}$
3	5	$\frac{251}{720}$	$\frac{646}{720}$	$-\frac{264}{720}$	$\frac{106}{720}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{3}{160}$

Métodos MPL: convergência

- Consideremos o PVI (P)

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), \\ y(x_0) = Y_0, \end{cases} \tag{P}$$

onde f é contínua e Lipschitziana em relação a y.

Consideremos o método MPL (M) para resolução numérica aproximada de (P):

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{p} a_k y_{n-k} + h \sum_{k=-1}^{p} b_k f(x_{n-k}, y_{n-k}), \qquad p \leq n \leq N(h) - 1, \tag{M}$$

onde $h_0 \in]0, h_0]$ e h_0 é suficientemente pequeno por forma a que a Eq. (M) tenha a solução $\{y_n(h)\}_{0 \leq n \leq N(h)}$, $\forall h \in]0, h_0]$.

Definição. Sejam $\{y_n(h)\}_{0 \leq n \leq N(h)}$ a solução obtida pelo método MPL (M) e $Y : [x_0, b] \to \mathbb{R}$ a solução exacta do PVI (P). Define-se o **erro de discretização global** por

$$e_n = e_n(h) := Y(x_n) - y_n(h), \qquad 0 \leq n \leq N(h),$$

e **erro de discretização global máximo** por

$$E = E(h) := \max_{0 \leq n \leq N(h)} |e_n(h)|.$$

Diz-se que a solução aproximada é **convergente** para a solução exacta de

$$\lim_{h \to 0} E(h) = 0,$$

e diz-se que tem **convergência de ordem** q se

$$E(h) = \mathcal{O}(h^q), \qquad h \to 0.$$

Diz-se que o método numérico (M) é convergente, ou tem convergência de ordem q, se a convergência (ou a convergência de ordem q) se verificar para todos os PVI (P).

Definição. Os **valores iniciais** $\{y_n(h)\}_{0 \leq n \leq p}$ dizem-se **consistentes** se,

$$\lim_{h \to 0} E_p(h) = 0,$$

onde

$$E_p(h) := \max_{0\leq n\leq p} |e_n(h)|,$$

e diz-se terem **consistência de ordem** q se

$$E_p(h) = \mathcal{O}(h^q), \qquad h \to 0.$$

Nota. A consistência dos valores iniciais é condição necessária para a convergência do método.

• A convergência do método MPL está relacionada com as raízes do polinómio

$$\rho(r) := r^{p+1} - \sum_{k=0}^{p} a_k r^{p-k}.$$

Definição. Diz-se que o método MPL satisfaz à **condição da raiz** se as raízes $r_0, r_1, \ldots, r_p$ do polinómio $\rho(r)$, repetidas de acordo com as suas multiplicidades, satisfazem a

$$\text{(i)}\;\; |r_j| \leq 1, \;\; j = 0, 1, \ldots, p; \qquad \text{(ii)}\;\; |r_j| = 1 \;\;\Rightarrow\;\; \rho'(r_j) \neq 0$$

Nota. A condição (i) impõe que todas as raízes estão contidas no círculo unitário $\{z \in \mathbb{C} : |z| \leq 1\}$. A condição (ii) impõe que todas as raízes na fronteira do círculo são raízes simples de $\rho(r)$.

Nota. Fazendo $h = 0$ em (M) obtemos

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{p} a_k y_{n-k},$$

que é uma equação às diferenças de ordem $p+1$, linear e de coeficientes constantes. O seu polinómio característico é precisamente ρ. A sua solução geral é dada por

$$y_n = \sum_{j=0}^{\hat{p}} \left(\sum_{l=0}^{\mu_{j-1}} c_{jl} n^l \right) \hat{r}_j^n,$$

onde $\hat{r}_0, \hat{r}_1, \ldots, \hat{r}_{\hat{p}}$, são as raízes distintas do polinómio ρ e $\mu_0, \mu_1, \ldots, \mu_{\hat{p}}$ as suas multiplicidades. É claro que $\hat{p} \leq p$ e $\mu_0 + \mu_1 + \cdots + \mu_{\hat{p}} = p + 1$.

A condição da raiz corresponde a exigir que todas as soluções da equação às diferenças são limitadas.

Proposição. No caso de um método MPL consistente as seguintes afirmações são equivalentes:

(1) o método é convergente;

(2) o método satisfaz à condição da raiz.

Proposição. Todo o método de passo simples linear consistente é convergente.

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton são convergentes.

Dem.: $(\cdots)$

Exemplo. Para cada um dos três problemas de valor inicial considerados nos exemplos no fim do parágrafo sobre os métodos de Runge-Kutta obtenha um valor aproximado y_1^{AM} para $Y(x_0+h)$ usando um passo de comprimento h do método de Adams-Moulton de 2ª ordem.

Resolução:

(i) $y_1^{AM} = y_0 + \dfrac{h}{2}\left[f(x_0,y_0) + f\left(x_0+h, y_1^{AM}\right)\right]$

(ii) $W_1^{AM} = W_0 + \dfrac{h}{2}\left[F(x_0,W_0) + F\left(x_0+h, W_1^{AM}\right)\right]$

$$\begin{bmatrix} y_1^{AM} \\ z_1^{AM} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 + \frac{h}{2}\left[f(x_0,y_0,z_0) + f\left(x_1, y_1^{AM}, z_1^{AM}\right)\right] \\ z_0 + \frac{h}{2}\left[g(x_0,y_0,z_0) + g\left(x_1, y_1^{AM}, z_1^{AM}\right)\right] \end{bmatrix}$$

(iii) $\begin{bmatrix} y_1^{AM} \\ z_1^{AM} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 + \frac{h}{2}\left[z_0 + z_1^{AM}\right] \\ z_0 + \frac{h}{2}\left[g(x_0,y_0,z_0) + g\left(x_1, y_1^{AM}, z_1^{AM}\right)\right] \end{bmatrix}$

Exemplo. Determinar todos os métodos MPL com 2 passos e ordem de consistência 2.

$$y_{n+1} = a_0 y_n + a_1 y_{n-1} + h[b_{-1} f_{n+1} + b_0 f_n + b_1 f_{n-1}]$$

Resolução:

(i) Condições para que o método tenha ordem de consistência ≥ 2:

$$\begin{cases} C_0 = 1 - a_0 - a_1 = 0 \\ C_1 = 1 + a_1 - b_{-1} - b_0 - b_1 = 0 \\ C_2 = 1 - a_1 - 2(b_{-1} - b_1) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1 = 1 - a_0 \\ b_0 = 2 - \dfrac{a_0}{2} - 2b_{-1} \\ b_1 = -\dfrac{a_0}{2} + b_{-1} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} C_3 = 1 + a_1 - 3(b_{-1} + b_1) = 2 + \dfrac{a_0}{2} - 6b_{-1} \\ C_4 = 1 - a_1 - 4(b_{-1} - b_1) = -a_0 \\ C_5 = 1 + a_1 - 5(b_{-1} + b_1) = 2 + \dfrac{3a_0}{2} - 10b_{-1} \end{cases}$$

(ii) Condição da raiz:

$$\rho(r) = r^2 - a_0 r - a_1 = (r-1)(r+1-a_0)$$

$$\boxed{0 \leq a_0 < 2}$$

(iii) Casos particulares:

$\diamond$ $a_0 = 0, \quad b_{-1} = 0, \quad a_1 = 1, \quad b_0 = 2, \quad b_1 = 0, \quad C_3 = 2$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf_n$$

Método do ponto médio

$\diamond$ $a_0 = 1, \quad b_{-1} = 0, \quad a_1 = 0, \quad b_0 = \frac{3}{2}, \quad b_1 = -\frac{1}{2}, \quad C_3 = \frac{5}{2}$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\,[3f_n - f_{n-1}]$$

Método de Adams-Bashforth de ordem 2

$\diamond$ $a_0 = \frac{4}{3}, \quad b_{-1} = \frac{2}{3}, \quad a_1 = -\frac{1}{3}, \quad b_0 = 0, \quad b_1 = 0, \quad C_3 = -\frac{4}{3}$

$$y_{n+1} = \frac{4}{3}\,y_n - \frac{1}{3}\,y_{n-1} + \frac{2h}{3}\,f_{n+1}$$

Método BDF de ordem 2 (Backward Difference Formula)

(iv) Condições para que o método tenha ordem de consistência ≥ 3:

$$C_3 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad b_{-1} = \frac{1}{12}\,(a_0 + 4)$$

$$\Rightarrow \quad \begin{cases} a_1 = 1 - a_0, \qquad b_0 = \frac{2}{3}\,(2 - a_0), \qquad b_1 = \frac{1}{12}\,(4 - 5a_0), \\ C_4 = -a_0, \qquad C_5 = \frac{2}{3}\,(a_0 - 2) \end{cases}$$

(v) Casos particulares:

$\diamond$ $a_0 = 1, \quad b_{-1} = \frac{5}{12}, \quad a_1 = 0, \quad b_0 = \frac{2}{3}, \quad b_1 = -\frac{1}{12}, \quad C_4 = -1$

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

Método de Adams-Moulton de ordem 3

(vi) Condições para que o método tenha ordem de consistência ≥ 4:

$$C_4 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad a_0 = 0$$

$$\Rightarrow \quad b_{-1} = \frac{1}{3}, \quad a_1 = 1, \quad b_0 = \frac{4}{3}, \quad b_1 = \frac{1}{3}, \quad C_5 = -\frac{4}{3}$$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}\,[f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1}]$$

Método de Milne de ordem 4

Métodos MPL: métodos preditor-corrector

• Consideremos a expressão geral dos métodos de Adams

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=p_0}^{p} b_k f(x_{n-k}, y_{n-k}), \qquad n \geq p.$$

O valor inicial é um dado do PVI (P), $y_0 = Y_0$. Os valores iniciais $y_1, y_2, \ldots, y_p$ têm que ser obtidos por outras vias, por exemplo, por um método de passo simples (da mesma ordem).

• As fórmulas de Adams-Moulton, que definem implicitamente y_{n+1}, podem ser resolvidas pelo método iterativo do ponto fixo:

$$y_{n+1}^{(j+1)} = y_n + h \sum_{k=0}^{p} b_k f(x_{n-k}, y_{n-k}) + h b_{-1} f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}), \quad n \geq p, \;\; j \geq 0.$$

A convergência do método do ponto fixo fica assegurada se h for suficientemente pequeno, de acordo com o seguinte resultado:

Proposição. O método iterativo do ponto fixo aplicado à equação do método de Adams-Moulton converge para a solução y_{n+1} desde que seja satisfeita a desigualdade

$$h|b_{-1}|L < 1,$$

onde h é o passo de integração e L designa a constante de Lipschitz de f.

Dem.: $(\cdots)$

• Para obter a iterada inicial $y_{n+1}^{(0)}$ pode utilizar-se um método de Adams-Bashforth.

Definição. Os **métodos preditor-corrector** são constituídos por uma fórmula de Adams-Moulton (o **corrector**) e uma fórmula de Adams-Bashforth (o **preditor**):

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(j+1)} = y_n + h \displaystyle\sum_{k=0}^{p} b_k f(x_{n-k}, y_{n-k}) + h b_{-1} f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}), & n \geq p, \;\; j \geq 0, \\ y_{n+1}^{(0)} = y_n + h \displaystyle\sum_{k=0}^{\tilde{p}} \tilde{b}_k f(x_{n-k}, y_{n-k}), & n \geq \tilde{p}. \end{cases}$$

Exemplos.

(i) (AB3)+(AM3)

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + \dfrac{h}{12} [23 f_n - 16 f_{n-1} + 5 f_{n-2}], \\ y_{n+1}^{(j+1)} = y_n + \dfrac{h}{12} \left[5 f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}) + 8 f_n - f_{n-1} \right], & j \geq 0, \;\; n \geq 1. \end{cases}$$

(ii) (AB2)+(AM3)

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + \dfrac{h}{2}\,[3f_n - f_{n-1}], \\ y_{n+1}^{(j+1)} = y_n + \dfrac{h}{12}\,\Big[5f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}) + 8f_n - f_{n-1}\Big], \qquad j \geq 0, \;\; n \geq 1. \end{cases}$$

Proposição. Consideremos um preditor de ordem $\tilde{q}$ e um corrector de ordem q.

(1) Se $\tilde{q} \geq q$ então o preditor-corrector tem a mesma ordem e o mesmo EDL principal que o corrector.

(2) Se $\tilde{q} = q - 1$ então o preditor-corrector tem a mesma ordem que o corrector mas o EDL principal é diferente.

(3) Se $\tilde{q} \leq q - 2$ então o preditor-corrector tem ordem mais baixa que o corrector.

Nota. Vimos que o erro de discretização local (EDL) para um método de Adams de ordem q é dado por

$$\tau(x, y; h) = h^q \,\frac{C_{q+1}}{(q+1)!}\,(d_f^q f)(x, y) + \mathcal{O}(h^{q+1})$$

Chama-se EDL principal à primeira parcela do EDL, proporcional a h^q. A mesma designação aplica-se no caso do método preditor-corrector.

Dem.: $(\cdots)$

Anexo

- Métodos de Runge-Kutta de ordem 2:

$$\tau(x,y;h)=\frac{h^2}{6}\left[d_f^2 f(x,y)-3\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial h^2}(x,y;0)\right]+\mathcal{O}(h^3)$$

  – Método de Euler modificado ou do ponto médio

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

  – Método de Runge-Kutta clássico de ordem 2

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{4}\left[f(x_n,y_n)+3f\left(x_n+\frac{2h}{3},y_n+\frac{2h}{3}\,f(x_n,y_n)\right)\right]$$

  – Método de Heun

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

- Métodos de Runge-Kutta de ordem 3:

$$\tau(x,y;h)=\frac{h^3}{24}\left[d_f^3 f(x,y)-4\,\frac{\partial^3\varphi}{\partial h^3}(x,y;0)\right]+\mathcal{O}(h^4)$$

  – Método de Runge-Kutta clássico de ordem 3

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{6}\left[\varphi_1+4\varphi_2+\varphi_3\right]$$

$$\varphi_1=f(x_n,y_n),\qquad \varphi_2=f\left(x_n+\frac{h}{2},y_n+\frac{h}{2}\,\varphi_1\right)$$

$$\varphi_3=f\left(x_n+h,y_n-h\varphi_1+2h\varphi_2\right)$$

  – Método de Runge-Kutta-Nystrom de ordem 3

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{8}\left[2\varphi_1+3\varphi_2+3\varphi_3\right]$$

$$\varphi_1=f(x_n,y_n),\qquad \varphi_2=f\left(x_n+\frac{2h}{3},y_n+\frac{2h}{3}\,\varphi_1\right)$$

$$\varphi_3=f\left(x_n+\frac{2h}{3},y_n+\frac{2h}{3}\,\varphi_2\right)$$

  – Método de Runge-Kutta-Heun de ordem 3

$$y_{n+1}=y_n+\frac{h}{4}\left[\varphi_1+3\varphi_3\right]$$

$$\varphi_1=f(x_n,y_n),\qquad \varphi_2=f\left(x_n+\frac{h}{3},y_n+\frac{h}{3}\,\varphi_1\right)$$

$$\varphi_3=f\left(x_n+\frac{2h}{3},y_n+\frac{2h}{3}\,\varphi_2\right)$$

- Métodos de Runge-Kutta de ordem 4:

$$\tau(x,y;h) = \frac{h^4}{120}\left[d_f^4 f(x,y) - 5\,\frac{\partial^4\varphi}{\partial h^4}(x,y;0)\right] + \mathcal{O}(h^5)$$

  – Método de Runge-Kutta clássico de ordem 4:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left[\varphi_1 + 2\varphi_2 + 2\varphi_3 + \varphi_4\right]$$

$$\varphi_1 = f(x_n,y_n), \qquad \varphi_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}\,\varphi_1\right)$$
$$\varphi_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}\,\varphi_2\right), \qquad \varphi_4 = f(x_n + h, y_n + h\varphi_3)$$

  – Método de Runge-Kutta-Gill de ordem 4:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left[\varphi_1 + (2-\sqrt{2})\varphi_2 + (2+\sqrt{2})\varphi_3 + \varphi_4\right]$$

$$\varphi_1 = f(x_n,y_n), \qquad \varphi_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}\,\varphi_1\right)$$
$$\varphi_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\sqrt{2}-1}{2}\,h\varphi_1 + \frac{2-\sqrt{2}}{2}\,h\varphi_2\right)$$
$$\varphi_4 = f\left(x_n + h, y_n - \frac{\sqrt{2}}{2}\,h\varphi_2 + \frac{2+\sqrt{2}}{2}\,h\varphi_3\right)$$

  – Método de Runge-Kutta-Merson de ordem 4:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left[\varphi_1 + 4\varphi_4 + \varphi_5\right]$$

$$\varphi_1 = f(x_n,y_n), \qquad \varphi_2 = f\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{h}{3}\,\varphi_1\right)$$
$$\varphi_3 = f\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{h}{6}\,\varphi_1 + \frac{h}{6}\,\varphi_2\right)$$
$$\varphi_4 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{8}\,\varphi_1 + \frac{3h}{8}\,\varphi_3\right)$$
$$\varphi_5 = f\left(x_n + h, y_n + \frac{h}{2}\,\varphi_1 - \frac{3h}{2}\,\varphi_3 + 2h\varphi_4\right)$$

- Métodos de Adams-Bashforth ($f_m := f(x_m, y_m)$):

$$\text{(AB2)} \quad p = 1, \quad q = 2: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}\,[3f_n - f_{n-1}] \\[2mm] \tau(x, y; h) = \dfrac{5h^2}{12}\,(d_f^2 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^3) \end{cases}$$

$$\text{(AB3)} \quad p = 2, \quad q = 3: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{12}\,[23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] \\[2mm] \tau(x, y; h) = \dfrac{3h^3}{8}\,(d_f^3 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^4) \end{cases}$$

$$\text{(AB4)} \quad p = 3, \quad q = 4: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}\,[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}], \\[2mm] \tau(x, y; h) = \dfrac{251h^4}{720}\,(d_f^4 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^5) \end{cases}$$

$$\text{(AB5)} \quad p = 4, \quad q = 5: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{720}\,\begin{aligned}[t] &[1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} \\ &-1274f_{n-3} + 251f_{n-4}], \end{aligned} \\[2mm] \tau(x, y; h) = \dfrac{95h^5}{288}\,(d_f^5 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^6) \end{cases}$$

- Métodos de Adams-Moulton ($f_m := f(x_m, y_m)$):

$$\text{(AM2)} \; p = 0, \quad q = 2: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{2}\,[f_{n+1} + f_n] \\[2mm] \tau(x, y; h) = -\dfrac{h^2}{12}\,(d_f^2 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^3) \end{cases}$$

$$\text{(AM3)} \quad p = 1, \quad q = 3: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{12}\,[5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}] \\[2mm] \tau(x, y; h) = -\dfrac{h^3}{24}\,(d_f^3 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^4) \end{cases}$$

$$\text{(AM4)} \quad p = 2, \quad q = 4: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}\,[9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] \\[2mm] \tau(x, y; h) = -\dfrac{19h^4}{720}\,(d_f^4 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^5) \end{cases}$$

$$\text{(AM5)} \quad p = 3, \quad q = 5: \begin{cases} y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{720}\,\begin{aligned}[t] &[251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} \\ &+106f_{n-2} - 19f_{n-3}] \end{aligned} \\[2mm] \tau(x, y; h) = -\dfrac{3h^5}{160}\,(d_f^5 f)(x, y) + \mathcal{O}(h^6) \end{cases}$$