

Solução numérica de problema de valor inicial

Irineu Palhares

November 2025

Sumário

Problema de Valor Inicial

Método de Euler

Método dos Trapézios

Métodos de Taylor

Regra do Ponto Médio

Métodos obtidos de integração numérica

Erro de truncamento local

Convergência, consistência e estabilidade

Estabilidade

Métodos de Runge-Kutta

Problema de Valor Inicial (PVI)

Um problema de valor inicial (PVI) é um problema de evolução, no qual a informação inicial (conhecida), é propagada para o interior do domínio pela equação diferencial. Matematicamente, o problema de valor inicial é definido como

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y), \\y(a) &= y_0,\end{aligned}\tag{1}$$

onde $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua. A função $y = y(x)$ ($x \geq a$) é a solução e y_0 é o valor inicial em a .

Existência e unicidade de soluções

Um ponto fundamental na resolução de uma equação diferencial, diz respeito à existência e unicidade de soluções. Por princípio, só tem sentido a solução numérica de um problema quando este tem solução. O teorema garante a existência e unicidade de um PVI.

Theorem (Existência e Unicidade de solução do PVI - Picardi)

Suponha que $D = \{(x, y) | a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty\}$ e que $f(x, y)$ seja contínua em D . Se f satisfizer a uma condição de Lipschitz em D na variável y , então o problema de valor inicial

$$\begin{aligned}y'(x) &= f(x, y), \quad a \leq x \leq b, \\y(a) &= y_0\end{aligned}\tag{2}$$

tem uma única solução $y(x)$ para $a \leq x \leq b$

Exemplo

Example

Considere o problema de valor inicial

$$y' = 1 + x \sin(xy), \quad 0 \leq x \leq 2, \quad y(0) = 0.$$

Verifique se a função f satisfaz a condição de Lipschitz e, caso satisfaça, determine a constante L .

Discretizações

Uma propriedade importante dos métodos computacionais para a solução de um PVI é a discretização, que consiste em obter a solução aproximada do PVI não num intervalo contínuo $a \leq x \leq b$, mas sim num conjunto discreto de pontos $\{x_i | i = 0, 1, \dots, N\}$. A sequência de pontos $\{x_i\}$ é definida por

$$x_i = x_0 + ih; \quad i = 0, 1, \dots, N,$$

onde $x_0 = a$, $x_N = b$ e $N = \frac{b-a}{h}$.

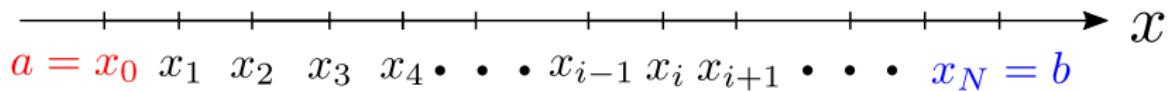


Figure: Discretização do domínio.

Dizemos que o comprimento do intervalo, h , é o tamanho do passo, os pontos x_i são os pontos da malha e N é o número de passos.

Notação

Denotaremos por y_n uma aproximação para a solução teórica em x_n , isto é: $y_n \approx y(x_n)$ e por $f_n = f(x_n, y_n)$.

Nosso objetivo é então determinar aproximações y_n da solução verdadeira $y(x_n)$ nos pontos da malha. Portanto, a solução numérica será uma tabela de valores dos pares (x_n, y_n) .

Existem vários métodos numéricos para determinação (aproximada) da solução do PVI. Descreveremos a seguir alguns desses métodos, discutindo vantagens e desvantagens.

Método de Euler explícito

Euler em 1768, usando diferenças progressivas, desenvolveu uma aproximação para o PVI. Esse método é hoje conhecido como *Método de Euler*. Aproximamos a equação diferencial por

$$\Delta y_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

ou,

$$y_{i+1} - y_i = hf(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \dots, N-1.$$

Este é o método de Euler que é um método explícito. Note que o valor de y_{i+1} é calculado explicitamente em função de y_i , mesmo quando a função f é não linear.

Método de Euler implícito

Se no lugar de Δ fosse usado ∇ teríamos a versão implícita do Método de Euler:

$$\nabla y_i = \frac{y_i - y_{i+1}}{h} = f(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

ou,

$$y_{i+1} - y_i = hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, N - 1$$

Note que no caso em que f é não linear, a equação acima define o vetor y_{i+1} implicitamente e portanto seu cálculo exige a utilização de métodos para a solução de sistemas de equações algébricas não lineares, como por exemplo, o método das aproximações sucessivas ou o método de Newton.

Exemplo

Example

Considere o PVI,

$$\begin{aligned}y' &= -y + x, \quad 0 \leq x \leq 1, \\y(0) &= 1.\end{aligned}\tag{3}$$

Determine aproximações para o PVI usando os métodos de Euler explícito e implícito, tomando $h = 0.1$.

Método dos Trapézios

Em vista dos resultados obtidos do exemplo anterior, é natural, portanto, considerarmos a combinação linear dos métodos de Euler explícito e implícito, com o objetivo de que os erros se cancelem e possamos obter uma melhor aproximação. Por exemplo, uma combinação linear é a média aritmética, que fornece o Método dos Trapézios, também conhecido como Regra dos Trapézios:

$$y_{i+1} - y_i = \frac{h}{2} (f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})), \quad i = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Obtido a partir da integração numérica

O método do trapézio pode ser obtido também a partir da integração do PVI:

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y' dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx.$$

Agora, desde que o lado esquerdo pode ser integrado exatamente, obtemos que a solução exata do PVI satisfaz a identidade:

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx$$

para quaisquer dos pontos x_n e x_{n+1} em $[a, b]$.

Regra do trapézio

Aplicando a regra do Trapézio para integração numérica em

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx,$$

resulta em

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{2} [f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))].$$

Substituindo $y(x_n)$ e $y(x_{n+1})$ por y_n e y_{n+1} , respectivamente, obtemos:

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

Representação geométrica da regra do Trapézio

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

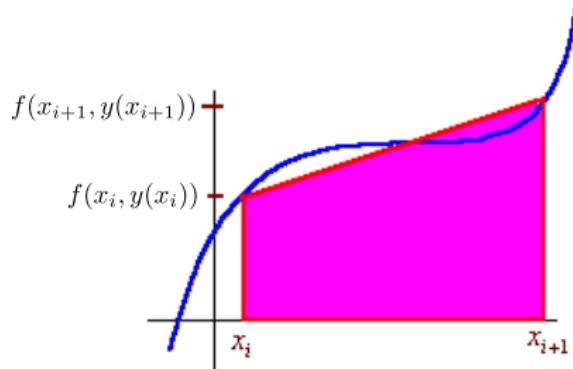


Figure: Regra do Trapézio.

Observe que o método dos Trapézios é um método impícito para y_{n+1} , uma vez que y_{n+1} aparece como argumento no segundo membro. Se $f(x, y)$ for uma função não linear, não teremos, em geral, condições de resolver a aproximação em relação a y_{n+1} de forma exata.

Método de Taylor de ordem q

O método de Taylor, que é de aplicabilidade quase geral, pode ser usado em combinação com outros métodos e servirá de introdução para outras técnicas que estudaremos.

A expansão em série de Taylor para $y(x_n + h)$ em torno do ponto x_n é, dada por:

$$y(x_n+h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}h''(x_n) + \dots + \frac{h^q}{q!}y^q(x_n) + \frac{h^{q+1}}{(q+1)!}y^{(q+1)}(\xi_n), \quad x_n < \xi_n < x_n + h,$$

onde o último termo é o erro de truncamento local.

As derivadas na expansão não são conhecidas explicitamente, uma vez que a solução exata não é conhecida. Contudo, se f é suficientemente derivável, elas podem ser obtidas considerando-se a derivada total de $y' = f(x, y)$ com respeito a x , tendo em mente que y é função de x .

Exemplo do cálculo das derivadas de y

Assim, obtemos para as primeiras derivadas:

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y), \\y'' &= f' = f_x + f_y f, \\y''' &= f'' = \text{atividade para os alunos} \\&\vdots\end{aligned}\tag{4}$$

Continuando desta maneira, podemos expressar qualquer derivada de y em termos de $f(x, y)$ e de suas derivadas parciais. Contudo, é claro que, a menos que $f(x, y)$ seja uma função muito simples, as derivadas totais de ordem mais elevada tornam-se cada vez mais complexas. Por razões práticas, deve-se então, limitar o número de termos na expansão.

Método de Taylor de ordem q

Truncando a expansão em Taylor, após $(q + 1)$ termos, obtemos:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \cdots + \frac{h^q}{q!} f^{(q-1)}(x_n, y(x_n))$$

Esta equação pode ser interpretada como uma relação aproximada entre valores exatos da solução do PVI. Uma relação exata entre valores aproximados da solução do PVI pode ser obtida substituindo-se $y(x_n)$ por y_n e $f^j(x_n, y(x_n))$ por f_n^j , $j = 0, 1, \dots, q - 1$. Fazendo isso, obtemos:

$$y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{h^2}{2!} f'_n + \cdots + \frac{h^q}{q!} f_n^{(q-1)},$$

que é chamado Método de Taylor de ordem q .

Método de Taylor

Observe que, para calcular uma aproximação para a solução no ponto x_{n+1} , o método de Taylor requer informação apenas sobre o último ponto calculado, isto é, sobre x_n . Métodos com esta característica são chamados de Métodos de 1-passo. Além disso, o esquema numérico é uma equação explícita para y_{n+1} , uma vez que os termos do lado direito dependem apenas de y_n , e por este motivo são chamados de métodos explícitos.

Exemplo

Example

Resolver o pvi:

$$\begin{aligned}y' &= -y + x + 2, \\y(0) &= 2, \quad x \in [0, 0.3], \quad h = 0.1,\end{aligned}\tag{5}$$

usando o método de Taylor de ordem 3.

Exemplo

Example

Resolver o pvi:

$$\begin{aligned}y' &= y^{\frac{1}{3}}, \\y(0) &= 0, \quad x \in [0, 0.3], \quad h = 0.1,\end{aligned}\tag{6}$$

usando o método de Taylor de ordem 3.

Regra do ponto médio

Considere agora o desenvolvimento de $y(x_n + h)$ e $y(x_n - h)$ em série de Taylor em torno do ponto x_n :

Fazer na lousa

Calculando $y(x_n + h) - y(x_n - h)$, obtemos:

$$y(x_n + h) - y(x_n - h) = 2hy'(x_n) + \frac{h^3}{3}y'''(x_n) + \dots$$

Considerando apenas o primeiro termo do lado direito desta expansão, substituindo $y(x_n + h)$ por y_{n+1} , $y(x_n - h)$ por y_{n-1} e $y'(x_n)$ por f_n , obtemos:

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

Esta fórmula pode ser colocada na forma:

$$y_{n+2} = y_n + 2hf_{n+1},$$

que é um método explícito de 2-passos chamado Regra do Ponto Médio.

Observação

Observe que, para resolver um pvi usando um método explícito de 2-passos, como é o caso da regra do ponto médio, devemos ter disponível, além do valor de y_0 , o valor de y_1 . Assim, o valor de y_1 deve ser obtido de alguma outra forma, por exemplo, usando método numérico de 1-passo.

Método de Simpson

Da mesma forma como feito para o método dos trapézios, podemos integrar o pvi, porém, agora, aproximando a integral do lado direito pela regra 1/3 de Simpson, ou seja,

$$\int_{x_n}^{x_{n+2}} y' dx = \int_{x_n}^{x_{n+2}} f(x, y) dx$$

$$y(x_{n+2}) = y(x_n) + \frac{h}{3} [f(x_n, y(x_n)) + 4f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) + f(x_{n+2}, y(x_{n+2}))]$$

e, como no caso do método do trapézio, obtemos:

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

que é um método implícito de 2-passos chamado Método de Simpson.

Método de Adams-Moulton

Se ao invés de usarmos as fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado, usarmos do tipo aberto, obteremos outras equações de diferenças. Por exemplo, seja $P(x)$ o polinômio de interpolação da função $f(x, y)$ sobre os pontos:

$$(x_n, f_n), (x_{n+1}, f_{n+1}), (x_{n+2}, f_{n+2}).$$

Mas, ao invés de integrar o polinômio $P(x)$ entre x_n e x_{n+2} , integramos entre x_{n+1} e x_{n+2} , resultando na seguinte formula de diferenças:

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{12} [-f_n + 8f_{n+1} + 5f_{n+2}],$$

que é um método implícito de 2-passos chamado Método de Adams-Moulton.

Método de Adams-Bashforth

De maneira semelhante ao método anterior, se aproximarmos $f(x, y(x))$ por um polinômio de interpolação sobre os pontos (x_n, f_n) , (x_{n+1}, f_{n+1}) , isto é, por um polinômio do primeiro grau, e integrarmos a equação diferencial de primeira ordem do PVI, de x_{n+1} até x_{n+2} , obtemos:

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

que é um método explícito de 2-passos chamado Método de Adams-Bashforth. Como na regra do ponto médio, para aplicar este método devemos obter, inicialmente, o valor de y_1 por método de 1-passo.

Erro de truncamento local

Agora, podemos definir formalmente o erro de truncamento local de um método linear de passo múltiplo.

Definition

Definimos o Erro de Truncamento Local, em x_{n+k} do método linear de passo múltiplo, definido por $\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}$, por:

$$\tau_{n+k} = \sum_{j=0}^k [\alpha_j y(x_{n+j}) - h\beta_j y'(x_{n+j})],$$

onde $y(x)$ é a solução exata do PVI.

Observações

Observe que o erro de truncamento é chamado local, pois supomos que nenhum erro foi cometido anteriormente, isto é, impomos:

$$y_{n+j} = y(x_{n+j}), \quad j = 0, 1, \dots, k-1,$$

e então só consideramos o erro em y_{n+k} .

No livro do Suli and Mayers o erro de truncamento local é definido como:

$$\tau_n = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - \Phi(x_n, y(x_n); h),$$

onde $\Phi(.,.;.)$ é uma função contínua em suas variáveis. Além disso, Φ é usada para definir métodos de 1-passo:

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n; h), \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad y(x_0) = y_0.$$

Exemplo

Example

O erro de truncamento do método de Euler explícito é dado por:

$$\tau = \frac{h^2}{2!} y''(\xi), \text{ onde } x_n < \xi < x_{n+1},$$

isto é, o erro de truncamento local é da $O(h^2)$.

Exemplo

Example

O erro de truncamento local do método do trapézio é dado por:

$$\tau = -\frac{h^3}{12}y'''(\xi), \text{ onde } x_n < \xi < x_{n+1},$$

isto é, o erro de truncamento local é da $O(h^3)$, o que representa um aperfeiçoamento sobre o método de Euler.

Pedir para que os alunos verifiquem.

Exercícios

1. Utilizando a linguagem de programação python, resolva o PVI abaixo pelo método do ponto médio, Euler explícito, implícito e regra dos trapézios, no intervalo $[0, 2]$, usando $h = 0.1$.

$$y' = 5y - 1, \quad y(0) = 1.2.$$

Explique o comportamento de cada um desses métodos à luz das propriedades discutidas neste capítulo. Solução exata:

$y(x) = \exp(5x) + 0.2$. Pedir para os alunos fazerem.

2. Determine o erro de truncamento local para:

- a) regra do ponto médio,
- b) método de Simpson,
- c) método de Adams-Moulton,
- d) método de Adams-Bashforth,
- e) método $\frac{3}{8}$ de Simpson.

Erro global

Definition

O erro global no ponto x_n é definido por:

$$e_n = y(x_n) - y_n$$

A análise do erro global nos permite estabelecer a convergência de um método. Esta é uma propriedade muito desejável para um método numérico, pois ela irá nos garantir que ao refinarmos a malha o resultado numérico se torna mais próximo do resultado exato.

Convergência

Definition

Dizemos que um método numérico é convergente se o erro global e_n converge para zero quando n tende para infinito de maneira que o ponto x_n permaneça fixo.

Isto quer dizer que a convergência está sendo analisada no ponto $x_n = a + nh$ e para que este ponto permaneça fixo, a quantidade nh deve permanecer fixa, portanto se n tende para infinito, necessariamente, h deve tender a zero, ou seja, a malha está sendo refinada para cada novo valor de n da sequência.

Relação entre erro global e de truncamento

Theorem

Considere o método de 1-passo na sua forma geral, isto é,
 $y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n; h)$. Estamos assumindo que Φ satisfaça a condição de Lipschitz com respeito ao seu segundo argumento, ou seja, existe a constante $L_\Phi > 0$ tal que, para $0 \leq h \leq h_0$ e para todo (x, u) e (x, v) no retângulo

$$D = \{(x, y) : a \leq x \leq b, |y - y_0| \leq C\},$$

temos que

$$|\Phi(x, u; h) - \Phi(x, v; h)| \leq L_\Phi |u - v|.$$

Nesta condições, temos a seguinte desigualdade:

$$|e_n| \leq \frac{\tau}{L_\Phi} \left(e^{L_\Phi(b-a)} - 1 \right), \quad n = 0, 1, \dots, N,$$

onde $\tau = \max_{0 \leq n \leq N-1} |\tau_n|$.

Prova do teorema: erro global vs erro de truncamento

Proof.

Fazer prova na lousa.



Exemplo

Example

Considere o problema de valor inicial: $y' = \tan^{-1} y$, $y(0) = y_0$, onde y_0 é um valor dado. De modo a determinar o limitante do erro $e_n = y(x_n) - y_n$, onde y_n é aproximado pelo método de Euler, precisamos determinar os valores de L e M_2 .

Pedir aos alunos para determinarem L e M_2 .

Exemplos

Example

Aplicar o teorema ao método de Euler:

$$|e_n| \leq \frac{1}{2} M_2 \left[\frac{e^{L(x_n-a)} - 1}{L} \right] h, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

Exemplo

Example

Verificar que para o método dos trapézios temos a seguinte desigualdade:

$$|e_n| \leq \frac{h^2 M}{L} \left(e^{(x_n - a) \left(\frac{L}{1 - \frac{hL}{2}} \right)} - 1 \right),$$

onde M é um limitante de $|y'''(x)|$, isto é,

$$|y'''(x)| \leq 12M.$$

Pedir para os alunos fazerem.

Observação

Note que o conceito de convergência aqui definido não é de aplicação prática direta, pois para calcular o erro global precisamos da solução exata que não está disponível. Portanto para testar na prática a convergência de um método numérico, resolve-se o problema para vários valores decrescentes de h e observa-se a sequência assim obtida se está se aproximando de algum valor fixado, ou seja testa-se, de maneira empírica, se essa sequência é de Cauchy e portanto convergente.

Perguntas motivadoras

No entanto, o fato da sequência ser convergente não implica que ela converge para um limite que é a solução da equação diferencial. Assim, algumas questões práticas relacionadas ao conceito de convergência merecem ser salientadas, como por exemplo:

- ▶ Havendo convergência no sentido prático, a solução numérica obtida representa a solução do problema?
- ▶ A discretização numérica introduz alguma perturbação ("ruído") que não está presente na equação original? Neste caso é este ruído controlável ou não?
- ▶ Quão rápida é a convergência?

Consistência

Parece natural admitir que a solução numérica aproxime a solução teórica do problema em estudo. No entanto, este não é sempre o caso pois a equação de diferenças tem vida própria e portanto sua própria solução, que não necessariamente guarda relação alguma com a solução do problema original, a menos que assim seja explicitamente exigido desta equação de diferenças. Essa propriedade, chamada consistência, é imposta à equação de diferenças e "amarra-a" à equação diferencial. Inversamente, a solução do problema contínuo não é, em geral, solução da equação de diferenças e o erro cometido ao substituirmos a solução exata na equação de diferenças é chamado de erro de truncamento local.

Consistência

Se o erro de truncamento local é de $O(h^p)$, com $p \geq 1$ dizemos que esse método tem ordem de consistência p , ou simplesmente que esse método é de ordem p .

O erro de truncamento local pode também ser interpretado como o erro cometido ao calcularmos a solução num ponto x_{i+1} sem levar em consideração os erros dos passos anteriores, isto é, levando em conta somente o erro cometido no passo atual.

Exemplo

Example

Para o método de Euler com $h \rightarrow 0$ a equação de diferenças aproxima-se da equação diferencial com erro de truncamento local $\tau_{i+1} = -\frac{h}{2}y''(\xi)$, ou seja, com ordem $O(h)$. Dizemos que o método de Euler é consistente de ordem 1. Analogamente, o método dos trapézios é consistente de ordem 2, por que seu erro é $O(h^2)$.

Relação entre ordem de convergência e consistência

O erro global é formado pela acumulação dos erros de truncamento local a cada passo juntamente com os erros de arredondamento. Portanto, a ordem de consistência de um método está relacionada com sua ordem de convergência. Essa ordem é um indicativo da velocidade com que se dá a convergência. Assim um método com ordem $O(h^2)$ deve convergir mais rapidamente que outro com erro $O(h)$. Isso significa, pelo menos teoricamente, que para o mesmo tamanho de passo h um método com ordem mais alta produz aproximações mais precisas.

Zero Estabilidade

Similarmente às equações diferenciais, uma solução da equação de diferenças de segunda ordem é uma combinação linear de duas soluções básicas. De forma que, enquanto a equação diferencial tem apenas uma solução básica (no caso em que $y \in \mathbb{R}$) a equação de diferenças tem duas distintas. Assim, essas duas soluções não podem convergir para a solução do problema ao mesmo tempo. A solução que não converge para a solução exata é denominada solução espúria à qual não é permitido crescer de maneira ilimitada, sob pena de inviabilizar a aplicação do método. O efeito das soluções espúrias na solução numérica é, comumente, o aparecimento de oscilações.

Zero estabilidade

Quando o método é razoável essas oscilações decrescem com a evolução, o que significa que as soluções espúrias decaem para zero à medida que i cresce. Um primeiro teste para esta condição de decaimento é feito para o caso em que $f(x, y) = 0$, impondo que a solução do método deve oscilar em torno de uma constante. Se o método é razoável, as oscilações se dissipam e o método é dito ser zero estável, caso contrário as oscilações são amplificadas prejudicando a convergência.

Definição de zero estabilidade

Definition

Um método é dito ser zero-estável se as soluções básicas da equação de diferenças associada, tomando $f(x, y) = 0$, são limitadas.

As soluções básicas da equação de diferenças são dadas pelas raízes do polinômio característico a ela associado.

Exemplo

Example

A fórmula do ponto médio $y_{i+2} - y_i = 0$ tem polinômio característico $\rho(z) = z^2 - 1 = 0$, cujas raízes são 1 e -1 , e as soluções básicas, ϕ e ψ , dadas por $\phi_n = (1)^n$ e $\psi_n = (-1)^n$, $n = 1, 2, \dots$. Já a fórmula $3y_{i+2} - 4y_{i+1} + y_i = 0$ tem polinômio característico $\rho(z) = 3z^2 - 4z + 1 = 0$, cujas raízes são 1 e $\frac{1}{3}$, e as soluções básicas, ϕ e ψ , dadas por $\phi_n = (1)^n$ e $\psi_n = (\frac{1}{3})^n$, $n = 1, 2, \dots$.

No contexto de problema de valor inicial para equações ordinárias, um método baseado em diferenças finitas é convergente se, e somente se, ele é consistente e zero-estável.

Teorema: Equivalência de Lax

Theorem

No contexto de problema de valor inicial para equações ordinárias, um método baseado em diferenças finitas é convergente se, e somente se, ele é consistente e zero-estável.

É importante notar entretanto, que no caso de equações parciais, apesar de existir determinada analogia, os resultados não são suficientemente abrangentes, ou seja, são válidos somente em alguns casos particulares. O teorema acima garante a convergência, mas não especifica a ordem de convergência. Como regra, pode-se dizer que a ordem de convergência é a mesma da consistência.

Motivação

- ▶ Ao diminuir o passo h , aumenta o número de operações e, portanto, o acúmulo de erros de arredondamento e truncamento.
- ▶ Um **método estável** evita que esses erros sejam amplificados ao longo das iterações.
- ▶ Se o método amplifica erros, dizemos que ele é **instável**; a solução numérica rapidamente perde significado.
- ▶ Estabilidade é analisada com h fixo (várias aplicações do esquema), observando o crescimento (ou não) do erro global.

Consistência, Estabilidade e Convergência

Consistência

O erro de truncamento local tende a zero quando $h \rightarrow 0$.

Estabilidade (com h fixo)

Pequenas perturbações nos dados/iterações não produzem crescimento descontrolado do erro global.

Teorema de Lax (ideia)

Consistência + Estabilidade \Rightarrow Convergência.

Do método às equações do erro

Considere os métodos (com passo uniforme h):

$$\text{Ponto médio: } y_{i+2} - y_i = 2h f(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad (7)$$

$$\text{Trapézio: } y_{i+1} - y_i = \frac{h}{2} \left(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}) \right). \quad (8)$$

Substituindo a solução exata $y(x)$ chega-se às formas com erro de truncamento local τ :

$$y(x_{i+2}) - y(x_i) = 2h f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + \tau_{i+2}, \quad (9)$$

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \frac{h}{2} \left(f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \right) + \tau_{i+1}. \quad (10)$$

Equações de erro global

Defina $e_i = y(x_i) - y_i$. Usando o Teorema do Valor Médio em f :

Ponto médio: $e_{i+2} - e_i = 2h f_y(x_{i+1}, \zeta_i) e_{i+1} + \tau_{i+2}, \quad (11)$

Trapézio: $e_{i+1} - e_i = \frac{h}{2} \left(f_y(x_i, \zeta_1) e_i + f_y(x_{i+1}, \zeta_2) e_{i+1} \right) + \tau_{i+1}. \quad (12)$

Equação-teste de Dahlquist

Para estudar estabilidade absoluta, considera-se o PVI linear

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Assumindo $f_y \equiv \lambda$ e, para analisar a parte homogênea, tomando $\tau \equiv 0$, obtêm-se **equações de diferenças lineares** para e_i cuja solução é combinação de potências das raízes do *polinômio de estabilidade*.

Critério

Seja r uma raiz da equação característica associada ao método (fator de amplificação por passo).

Condição para estabilidade absoluta

Todas as raízes devem satisfazer

$$|r| < 1.$$

O conjunto de $z = h\lambda$ para os quais a condição vale é a **região de estabilidade absoluta** do método.

Euler Explícito

Partindo de $e_{i+1} - e_i = h\lambda e_i$,

$$e_{i+1} = (1 + z) e_i, \quad z = h\lambda.$$

- ▶ Estável se $|1 + z| < 1$ com $z \in \mathbb{C}$.
- ▶ Para $\lambda \in \mathbb{R}_-$: $-2 \leq z \leq 0$ (*estabilidade condicional*).

Euler Implícito

De $e_{i+1} - e_i = h\lambda e_{i+1}$,

$$e_{i+1} = \frac{1}{1 - z} e_i.$$

- ▶ Região de estabilidade: $\Re(z) \leq 0$.
- ▶ *A-estável*: permite qualquer h para λ com parte real não positiva.
- ▶ Para $-z \rightarrow \infty$: fator $\rightarrow 0$ (amortecimento forte).

Método do Trapézio (Crank–Nicolson)

De $e_{i+1} - e_i = \frac{z}{2}(e_{i+1} + e_i)$,

$$e_{i+1} = \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}} e_i.$$

- ▶ Também *A-estável* ($\Re(z) \leq 0$).
- ▶ Para $-z \rightarrow \infty$: fator $\rightarrow -1$ (amortecimento sem dissipação: tendência à oscilação).

Ponto Médio (leapfrog, 2 passos)

Da homogênea de (11) com $f_y = \lambda$ e $\tau = 0$:

$$e_{i+2} - 2z e_{i+1} - e_i = 0, \quad z = h\lambda.$$

Polinômio de estabilidade: $r^2 - 2zr - 1 = 0$ com raízes

$$r_{1,2} = z \pm \sqrt{1 + z^2}.$$

- ▶ $|r_1 r_2| = 1 \Rightarrow$ não é absolutamente estável (não existe disco unitário contendo ambas as raízes para $z \neq 0$).
- ▶ Útil em problemas oscilatórios quando combinado com controles adicionais, mas carece de amortecimento.

Outro exemplo de fórmula de 2 passos

Considere a fórmula

$$3(1 + 2z) e_{i+2} - 4 e_{i+1} + e_i = 0, \quad z = h\lambda.$$

As raízes são

$$r_{1,2} = \frac{2 \pm \sqrt{1 - 6z}}{3 + 6z},$$

e a estabilidade exige $|r_{1,2}| < 1$.

Observações

Absolutamente vs. Condisionalmente estável

Métodos absolutamente estáveis permitem qualquer tamanho de passo h (para $\Re(\lambda) \leq 0$); os condisionalmente estáveis impõem restrições em h .

Amortecimento vs. Oscilação (para $-z$ grande)

- ▶ Euler implícito: fator $(1 - z)^{-1} \rightarrow 0 \Rightarrow \text{forte amortecimento.}$
- ▶ Trapézio: $\frac{1 + z/2}{1 - z/2} \rightarrow -1 \Rightarrow \text{tendência à oscilação.}$

Preferências: Euler implícito para decaimento difusivo (p.ex. equações parabólicas); Trapézio para soluções periódicas/conservativas (p.ex. formas de conservação hiperbólicas).

PVI de referência

$$y' = 4x\sqrt{y}, \quad y(0) = 1, \quad 0 \leq x \leq 2,$$

Solução exata: $y(x) = (1 + x^2)^2$.

Esquema explícito de 2 passos

Método proposto:

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{3}(3f_{n+1} - 2f_n), \quad f_n = f(x_n, y_n).$$

- ▶ **Zero-estável**, mas **não consistente** (logo, não convergente).
- ▶ Exercício sugerido: verificar a inconsistência mostrando que o erro de truncamento local *não* é $o(1)$ quando $h \rightarrow 0$.

Takeaways

- ▶ Estabilidade controla a amplificação de erros ao longo das iterações.
- ▶ A equação-teste $y' = \lambda y$ leva ao conceito de *região de estabilidade absoluta* em termos de $z = h\lambda$.
- ▶ Euler implícito e Trapézio são A-estáveis; Euler explícito é condicionalmente estável; Ponto médio não é absolutamente estável.
- ▶ Consistência + Estabilidade \Rightarrow Convergência;
zero-estabilidade sozinha não garante consistência.

Métodos Runge-Kutta

A idéia básica destes métodos é aproveitar as qualidades dos métodos de série de Taylor e ao mesmo tempo eliminar seu maior defeito que é o cálculo de derivadas de $f(x, y)$ que, conforme vimos, torna os métodos de série de Taylor computacionalmente inaceitáveis.

Podemos dizer que os métodos de Runge-Kutta de ordem p se caracterizam pelas três propriedades:

- ▶ são de passo um;
- ▶ não exigem o cálculo de qualquer derivada de $f(x, y)$; pagam por isso, o preço de calcular $f(x, y)$ em vários pontos;
- ▶ após expandir $f(x, y)$ por Taylor para função de duas variáveis em torno de (x_n, y_n) e agrupar os termos semelhantes, sua expressão coincide com a do método de série de Taylor de mesma ordem.

Métodos de Runge-Kutta de 1^a ordem - método de Euler

Já vimos que o método de Euler é um método de série de Taylor de 1^a ordem:

$$y_{n+1} = y_n + hy', \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (13)$$

então,

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

e o método de Euler satisfaz as três propriedades acima que o caracterizam como um método de Runge-Kutta de ordem $p = 1$.

Métodos de Runge-Kutta de 2^a ordem - Euler melhorado

Exporemos inicialmente um método particular que é o método de Heun, ou método de Euler Aperfeiçoado, pois ele tem uma interpretação geométrica bastante simples.

Conforme o próprio nome indica, este método consiste em fazer mudanças no método de Euler para assim conseguir um método de ordem mais elevada.

Método de Euler Aperfeiçoado - GRAFICAMENTE

O valor fornecido para y_{n+1} pelo método de Euler Aperfeiçoado é:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hy'_n)], \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

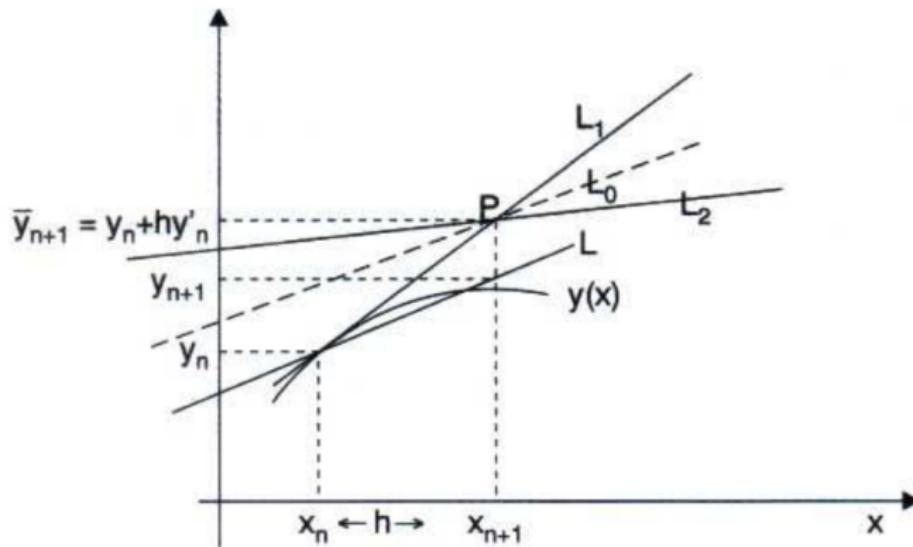


Figure: Euler aperfeiçoado.

Verificar que o método de Euler Aperfeiçoado tem ordem 2

Observamos que este método é de passo um e só trabalha com cálculos de $f(x, y)$, não envolvendo suas derivadas. Assim, para verificarmos que ele realmente é um método de Runge-Kutta de 2^a ordem, falta verificar se sua fórmula concorda com a do método de série de Taylor até os termos de 2^a ordem em h :

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2}f_x(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2}f(x_n, y_n)f_y(x_n, y_n) \quad (16)$$

com $e(x_{n+1}) = \frac{h^2}{3!}y'''(\xi_{n+1})$.

Runge-Kutta de segunda ordem (General formula)

In the forward Euler method, we used the information on the slope or the derivative of y at the given time step to extrapolate the solution to the next time-step. The LTE for the method is $O(h^2)$, resulting in a first order numerical technique. Runge-Kutta methods are a class of methods which judiciously uses the information on the 'slope' at more than one point to extrapolate the solution to the future time step. Let's discuss first the derivation of the second order RK method where the LTE is $O(h^3)$. Given the IVP of Eq. 6, and a time step h , and the solution y_n at the n th time step, let's say that we wish to compute y_{n+1} in the following fashion:

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(y_n, t_n) \\k_2 &= hf(y_n + \beta k_1, t_n + \alpha h) \\y_{n+1} &= y_n + ak_1 + bk_2\end{aligned}\tag{17}$$

Runge-Kutta 2

where the constants α , β , a and b have to be evaluated so that the resulting method has a LTE $O(h^3)$. Note that if $k_2 = 0$ and $a = 1$, then Eq. reduces to the forward Euler method.

Now, let's write down the Taylor series expansion of y in the neighborhood of t_n correct to the h^2 term i.e.,

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h \frac{dy}{dt} \Big|_{t_n} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2} \Big|_{t_n} + O(h^3). \quad (18)$$

However, we know from the IVP that $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$ so that

$$\frac{d^2y}{dt^2} = \frac{df(t, y)}{dt} = f_t + ff_y. \quad (19)$$

Construction of the RK2

So from the above analysis, we get

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_n, t_n) + \frac{h^2}{2} (f_t + ff_y) + O(h^3). \quad (20)$$

However, the term k_2 in the proposed RK method can be expanded correct to $O(h^3)$ as

$$\begin{aligned} k_2 &= hf(t_n + \alpha h, y_n + \beta k_1) \\ &= h(f(t_n, y_n + \alpha hf_t) + \beta k_1 f_t) + O(h^3). \end{aligned} \quad (21)$$

Determination of the constants

Comparing the terms with identical coefficients gives us the following system of equations to determine the constants:

$$a + b = 1$$

$$\alpha b = \frac{1}{2} \quad (22)$$

$$\beta b = \frac{1}{2}.$$

There are infinitely many choices of a , b , α and β which satisfy Eq., we can choose for instance $\alpha = \beta = 1$ and $a = b = \frac{1}{2}$. With this choice, we have the classical second order accurate Runge-Kutta method (RK2) which is summarized as follows.

Algorithm of the RK2 method

The Second Order Runge-Kutta Method (RK2) is given as

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n) \\ k_2 &= hf(y_n + k_1, t_n + h). \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2} (k_1 + k_2) \end{aligned} \tag{23}$$

Método Runge-Kutta de ordem 4

O mais usado e popular dos métodos Runge-Kutta é o método de ordem 4, também conhecido como método Runge-Kutta clássico. Seja o problema de valor inicial dado a seguir:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0. \quad (24)$$

Here y is an unknown function (scalar or vector) of time t , which we would like to approximate; we are told that $\frac{dy}{dt}$, the rate at which y changes, is a function of t and of y itself. At the initial time t_0 the corresponding y value is y_0 . The function f and the initial conditions t_0, y_0 are given.

RK4

Now we pick a step-size $h > 0$ and define:

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\t_{n+1} &= t_n + h\end{aligned}\tag{25}$$

for $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, using [3]

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_n, y_n), \\k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + h\frac{k_1}{2}\right), \\k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + h\frac{k_2}{2}\right), \\k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3).\end{aligned}\tag{26}$$

RK4

Here y_{n+1} is the RK4 approximation of $y(t_{n+1})$, and the next value (y_{n+1}) is determined by the present value (y_n) plus the weighted average of four increments, where each increment is the product of the size of the interval, h , and an estimated slope specified by function f on the right-hand side of the differential equation.

- ▶ k_1 is the slope at the beginning of the interval, using y (Euler's method);
- ▶ k_2 is the slope at the midpoint of the interval, using y and k_1 ;
- ▶ k_3 is again the slope at the midpoint, but now using y and k_2 ;
- ▶ k_4 is the slope at the end of the interval, using y and k_3 .

RK4

In averaging the four slopes, greater weight is given to the slopes at the midpoint. If f is independent of y , so that the differential equation is equivalent to a simple integral, then RK4 is Simpson's rule.[5]

The RK4 method is a fourth-order method, meaning that the local truncation error is on the order of $O(h^5)$, while the total accumulated error is on the order of $O(h^4)$.

In many practical applications the function f is independent of t (so called autonomous system, or time-invariant system, especially in physics), and their increments are not computed at all and not passed to function f , with only the final formula for t_{n+1} used.

Figura RK4

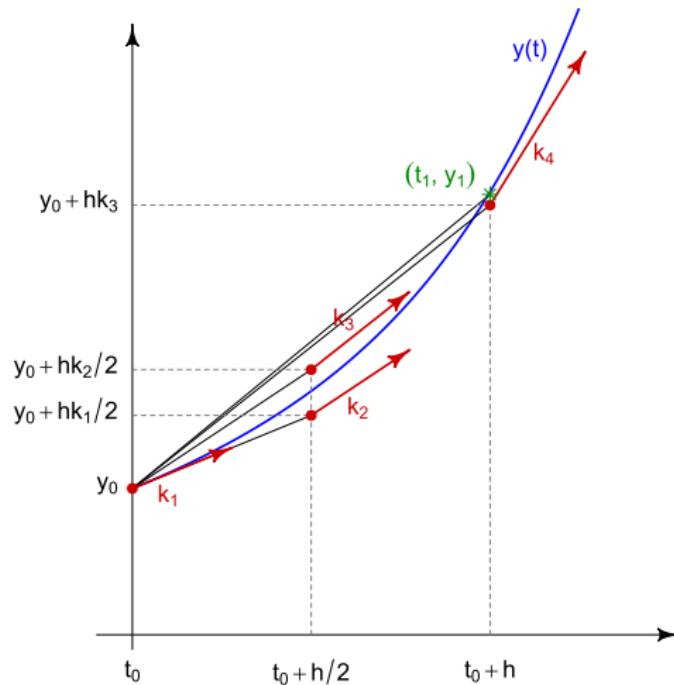


Figure: Slopes do método RK4