Métodos para a solução numérica de equações diferenciais ordinárias a valores iniciais

Notas de aula em construção

Texto original de 2014

Alexandre Megiorin Roma
roma@ime.usp.br
Joyce da Silva Bevilacqua
joyce@ime.usp.br

Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Matemática e Estatística
Universidade de São Paulo

Rudimar Luiz Nós
rudimarnos@utfpr.edu.br

Departamento Acadêmico de Matemática
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Edição de 2019

Pedro da Silva Peixoto
pedrosp@ime.usp.br
Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Matemática e Estatística
Universidade de São Paulo

Capítulo 3

Métodos de passo único de altas ordens

Dentre os métodos apresentados até aqui, apenas métodos de passo único de no máximo segunda ordem foram vistos. Neste Capítulo, duas técnicas para se obter métodos de passo único de ordens mais elevadas são apresentadas. Numa primeira abordagem, utiliza-se a Fórmula de Taylor com resto de Lagrange para se obter os *métodos da Série de Taylor*, Seção 3.1. Na prática, tais métodos são pouco utilizados devido ao grande número requerido de derivações de $f(t,y)$, o que imprime a tais métodos complexidade algébrica elevada (impactando, inclusive, a eficiência computacional). Numa segunda abordagem, substituindo-se as derivações por cálculos de $f(t,y)$ em pontos estrategicamente posicionados, obtêm-se os *métodos de Runge-Kutta*, Seção 3.2, bastante difundidos e utilizados, os quais são relativamente simples de serem implementados. No que vem a seguir, supõe-se que a solução do Problema de Cauchy tenha tantas derivadas quantas forem necessárias para que se possa apresentar estas duas abordagens.

3.1 Métodos da Série de Taylor

Da Fórmula de Taylor de grau q com centro em $t = t_k$, tem-se a expressão para $y(t_k + h)$,

$$\begin{aligned} y(t_k+h) &\doteq y(t_{k+1}) = y(t_k) + h\,y'(t_k) + \frac{h^2}{2!}y''(t_k) + \cdots + \frac{h^q}{q!}y^{(q)}(t_k) + \\ &+ \frac{h^{q+1}}{(q+1)!}y^{(q+1)}(\xi), \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

na qual $\xi \in (t_k, t_k + h)$. A substituição $y'(t) = f(t, y(t))$ em (3.1.1), fornece

$$\begin{aligned} y(t_{k+1}) &= y(t_k) + h\,f(t_k, y(t_k)) + \frac{h^2}{2!}\frac{d}{dt}f(t_k, y(t_k)) + \cdots + \\ &+ \frac{h^q}{q!}\frac{d^{q-1}}{dt^{q-1}}f(t_k, y(t_k)) + \frac{h^{q+1}}{(q+1)!}\frac{d^q}{dt^q}f(\xi, y(\xi)). \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

Como

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}f(t,y(t)) &= \frac{\partial f}{\partial t}\frac{dt}{dt}+\frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt}= \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t}+f\frac{\partial}{\partial y}\right)[f](t,y(t)), \\
\frac{d^2}{dt^2}f(t,y(t)) &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}+2f\frac{\partial^2 f}{\partial t\partial y}+f^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+\frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial f}{\partial y}+f\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2\right)= \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t}+f\frac{\partial}{\partial y}\right)^2[f](t,y(t)), \\
&\vdots \\
\frac{d^j}{dt^j}f(t,y(t)) &= \left(\frac{\partial}{\partial t}+f\frac{\partial}{\partial y}\right)^j[f](t,y(t)),
\end{aligned}$$

de (3.1.2), vem de maneira natural a proposta do método numérico da forma descrita a seguir.

Método 3.1 (Série de Taylor)**.**

$$\left\{\begin{array}{rcl} y_0 &=& y(t_0), \\ y_{k+1} &=& y_k + h\,\Phi(t_k,y_k,h), \end{array}\right. \tag{3.1.3}$$

no qual

$$\Phi(t,y,h) = f(t,y)+\frac{h}{2!}Df(t,y)+\frac{h^2}{3!}D^2f(t,y)+\cdots+\frac{h^{q-1}}{q!}D^{q-1}f(t,y),$$

com $D=\dfrac{\partial}{\partial t}+f\dfrac{\partial}{\partial y}$.

Este será denominado de Método da Série de Taylor de ordem q se (3.1.3) contiver termos de ordem até $q-1$ (isto é, seu erro de discretização local é $O(h^q)$). Verifique!

3.2 Métodos de Runge-Kutta explícitos

Os métodos de Runge-Kutta surgiram como uma extensão do método de Euler para ordens mais altas, usando apenas avaliações de f, sem a necessidade de cálculos de suas derivadas [5]. Neste sentido, um método é dito de Runge-Kutta explícito se ele:

1. for um método de passo único explícito,
2. substituir as derivadas de $f(t,y)$ por cálculos de $f(t,y)$ em pontos "convenientemente escolhidos" e, por fim,
3. concordar com o Método da Série de Taylor (3.1.3) até o termo de q-ésima ordem, para algum $q>0$.

Veja um pouca da história dos métodos de Runge-Kutta em [4].

3.2.1 Métodos de Runge-Kutta explícitos de 2-estágios

O método de Euler necessita de apenas uma avaliação de f (um estágio). Vamos supor um método de passo único explícito que use duas avaliações de f (2 estágios), da seguinte forma:

$$y_{k+1} = y_k + h(b_1 f(t_k, y_k) + b_2 f(\tilde{t}_k, \tilde{y}_k)), \tag{3.2.4}$$

onde b_1 e b_2 são constantes e $\tilde{y}_k$ define uma aproximação para $y(\tilde{t}_k)$, para algum $\tilde{t}_k \in [t_k, t_k + h]$, com

$$\begin{aligned} \tilde{t}_k &= t_k + \theta h, \\ \tilde{y}_k &= y_k + \theta h f(t_k, y_k). \end{aligned} \tag{3.2.5}$$

Seja $f_k = f(t_k, y_k)$ e $Df_k = \dfrac{\partial f}{\partial t}(t_k, y_k) + f(t_k, y_k)\dfrac{\partial f}{\partial y}(t_k, y_k)$. Agora, expandindo $f(\tilde{t}_k, \tilde{y}_k)$ em Série de Taylor bivariada em torno de (t_k, y_k), temos que (verifique!)

$$f(\tilde{t}_k, \tilde{y}_k) = f_k + \theta h D f_k + O(h^2). \tag{3.2.6}$$

Para garantirmos que um método desta forma seja de segunda ordem, concordando portanto com o Método da Série de Taylor até segunda ordem, precisamos que

$$b_1 f_k + b_2(f_k + \theta h D f_k) = f_k + \frac{h}{2} D f_k. \tag{3.2.7}$$

Portanto,

$$b_1 + b_2 = 1 \tag{3.2.8}$$

$$b_2 \theta = \frac{1}{2}, \tag{3.2.9}$$

e então o método terá que ter a seguinte forma

$$y_{k+1} = y_k + h\left(\left[1 - \frac{1}{2\theta}\right] f(t_k, y_k) + \frac{1}{2\theta} f(t_k + \theta h, y_k + \theta h f(t_k, y_k))\right). \tag{3.2.10}$$

Variando θ, restrito a $\theta \in (0, 1)$, obtemos diferentes métodos de Runge-Kutta de 2 estágios, com garantia de ordem 2 de consistência. Tomando $\theta = 1$ temos o Método de Euler Aprimorado (veja a equação (1.4.25)) e com $\theta = 1/2$ temos o Método de Euler Modificado, descrito no exemplo a seguir.

Método 3.2 (Euler Modificado ou do Ponto Médio Explícito)**.**

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0), \\ y_{k+1} = y_k + h\Phi(t_k, y_k, h), \end{cases} \tag{3.2.11}$$

com $t_{k+1} = t_k + h$, $h = \dfrac{b-a}{n}$, $0 \le k \le n-1$ *e*

$$\Phi(t_k, y_k, h) = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2} f(t_k, y_k)\right).$$

Exemplo 3.1. *O Método de Euler Modificado é um Método de Runge-Kutta de 2 estágios de segunda ordem.*

Por inspeção, observa-se que o método (3.2.11) é de passo único e explícito. Além disso, não existem cálculos de derivadas de $f(t,y)$. Basta então verificar se (3.2.11) concorda com o Método da Série de Taylor (3.1.3) para alguma ordem q.

Desenvolvendo-se $f\left(t+\Delta t, y+\Delta y\right)$ em Série de Taylor em torno de (t_k, y_k), onde $\Delta t = \dfrac{h}{2}$ e $\Delta y = \dfrac{h}{2} f(t,y)$, tem-se

$$\begin{aligned} f\left(t_k+\Delta t, y_k+\Delta y\right) &= f(t_k,y_k) + \left[\begin{array}{cc} \dfrac{\partial}{\partial t} f(t_k,y_k) & \dfrac{\partial}{\partial y} f(t_k,y_k) \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Delta t \\ \Delta y \end{array}\right] + \\ &+ \frac{1}{2!} \left[\begin{array}{cc} \Delta t & \Delta y \end{array}\right] \left[\begin{array}{cc} \frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t_k,y_k) & \frac{\partial^2}{\partial t \partial y} f(t_k,y_k) \\ \frac{\partial^2}{\partial t \partial y} f(t_k,y_k) & \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(t_k,y_k) \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Delta t \\ \Delta y \end{array}\right] + \\ &+ O(\Delta t^3, \Delta y^3), \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \Phi(t_k,y_k,h) &= f_k + \frac{h}{2}\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} + f_k \frac{\partial f_k}{\partial y}\right) + \frac{1}{2!}\frac{h^2}{4}\left(\frac{\partial^2 f_k}{\partial t^2} + 2 f_k \frac{\partial^2 f_k}{\partial t \partial y} + f_k^2 \frac{\partial^2 f_k}{\partial y^2}\right) + \\ &+ O(h^3), \end{aligned} \tag{3.2.12}$$

sendo $f_k = f(t_k, y_k)$.

Substituindo-se (3.2.12) em (3.2.11), obtém-se

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h f_k + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} + f_k \frac{\partial f_k}{\partial y}\right) + \frac{1}{2!}\frac{h^3}{4}\left(\frac{\partial^2 f_k}{\partial t^2} + 2 f_k \frac{\partial^2 f_k}{\partial t \partial y} + f_k^2 \frac{\partial^2 f_k}{\partial y^2}\right) + \\ &+ O(h^4), \end{aligned} \tag{3.2.13}$$

cujos termos concordam com os do Método da Série de Taylor (3.1.3) até a segunda ordem (verifique que a partir dos termos de terceira ordem não há coincidência!). Desta maneira, o Método de Euler Modificado é um Método de Runge-Kutta de ordem 2.

3.2.2 Métodos de Runge-Kutta explícitos de R-estágios

Nos métodos de Runge-Kutta (ou RK), o número de estágios diz respeito ao número de vezes que $f(t,y)$ deve ser calculada. Os métodos RK explícitos com R-estágios clássicos têm a forma descrita a seguir.

Método 3.3 (Rung-Kutta explícito de R-estágios)**.**

$$\left\{\begin{array}{rcl} y_0 &=& y(t_0), \\ y_{k+1} &=& y_k + h\Phi(t_k, y_k, h)\,, \end{array}\right.$$

onde

$$\Phi(t,y,h) = \sum_{r=1}^{R} b_r \kappa_r, \tag{3.2.14}$$

com

$$\begin{aligned}
\kappa_1(t,y) &= f(t,y), \\
\kappa_2(t,y) &= f(t+hc_2, y+ha_{21}\kappa_1), \\
\kappa_3(t,y) &= f(t+hc_3, y+ha_{31}\kappa_1+hb_{32}\kappa_2), \\
&\vdots \\
\kappa_r(t,y) &= f\left(t+hc_r, y+h\sum_{s=1}^{r-1}a_{rs}\kappa_s\right), \quad 2\le r\le R. \qquad (3.2.15)
\end{aligned}$$

Os parâmetros a_{rs}, b_r e c_r satisfazem as relações

$$\text{(i)} \qquad \sum_{r=1}^{R} b_r = 1, \qquad (3.2.16)$$

$$\text{(ii)} \qquad c_r = \sum_{s=1}^{r-1} a_{rs}, \quad 2\le r\le R. \qquad (3.2.17)$$

A primeira condição, (i), é suficiente, e necessária, para obtermos consistência. De fato, quando $h\to 0$, $\kappa_r(t,y)\to f(t,y)$. Portanto $\Phi(t,y,0)=f(t,y)\sum_{r=1}^{R}b_r$ e precisamos da primeira condição para termos $\Phi(t,y,0)=f(t,y)$, sendo esta também suficiente para garantir a consistência.

A segunda condição, (ii), é conveniente para garantirmos que o método concorde com o termo de ordem 2 (referente a $y''=Df$) do Método de Série de Taylor. De tal forma, um método com mais de um estágio ($R>1$) terá condições necessárias para ser, pelo menos, de segunda ordem. A Série de Taylor de κ_r em torno do ponto (t_k,y_k) será da forma

$$\kappa_r(t_k,y_k) = f_k + hc_r\frac{\partial f_k}{\partial t} + h\left(\sum_{s=1}^{r-1}a_{rs}\kappa_s\right)\frac{\partial f_k}{\partial y} + O(h^2). \qquad (3.2.18)$$

Agora, substituímos a Série de Taylor de κ_s, que pode ser escrita, em primeira ordem, como $\kappa_s(t_k,y_k)=f_k+O(h)$, na série de Taylor de κ_r acima. Com isso, notamos que para que o método concorde com a Φ do Método da Série de Taylor até o termo de ordem um (relativo a Df), será necessário termos

$$c_r\frac{\partial f_k}{\partial t} + \left(\sum_{s=1}^{r-1}a_{rs}f_k\right)\frac{\partial f_k}{\partial y} = \theta_r\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} + f_k\frac{\partial f_k}{\partial y}\right), \qquad (3.2.19)$$

para algum $\theta_r>0$. Portanto, a condição (ii) em (3.2.17) garante que, se $r>1$, o método resultante tem chances de ter pelo menos ordem 2, sendo esta uma condição necessária para atingir segunda ordem. Ela não é suficiente para obtermos segunda ordem pois, para concordar com o método da Série de Taylor até pelo menos ordem 2, temos que considerar também os valores de b_r.

Os métodos Runge-Kutta podem ser expressos na forma de uma tabela, conhecida por Tabela de Butcher [5]. Ela é composta pelos coeficientes a_{rs}, b_r e c_r da seguinte forma,

$$\begin{array}{c|ccccccc} 0 & & & & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & & & & \\ c_4 & a_{41} & a_{42} & a_{43} & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & & \\ c_R & a_{R1} & a_{R2} & a_{R3} & \cdots & a_{R,R-1} & & \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 & \cdots & b_{R-1} & b_R \end{array}$$

ou, na forma compacta,

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \end{array}$$

onde c é vetor de coeficientes c_r, denominados como nós. b^t é a transposta do vetor de coeficientes b_r, denominados como pesos[1]. A matrix A, definida pelos coeficientes a_{rs}, é conhecida como matriz de Runge-Kutta.

Retomando o caso de dois estágios ($R = 2$), de (3.2.14)-(3.2.17) tem-se

$$\begin{aligned} \Phi(t_k, y_k, h) &= b_1\kappa_1 + b_2\kappa_2 \\ &= b_1 f\left(t_k, y_k\right) + b_2 f\left(t_k + hc_2, y_k + ha_{21} f(t_k, y_k)\right), \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

com $c_2 = a_{21}$, que é igual ao θ da seção anterior (vide equação (3.2.10)).

Exemplo 3.2. *Tem-se no Método de Euler Modificado (3.2.11)*

$$\Phi(t, y, h) = f\left(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} f(t, y)\right). \quad (3.2.21)$$

Comparando-se (3.2.21) com (3.2.20), constata-se que $b_1 = 0$ *e* $b_2 = 1$ *(logo* $b_1 + b_2 = 1$*) e que* $c_2 = a_{21} = \frac{1}{2}$*. Assim, o Método de Euler Modificado é um Método de Runge-Kutta de segunda ordem com* 2 *estágios.*

Exemplo 3.3. *Tem-se no Método de Euler Aprimorado (1.4.25),*

$$\Phi(t, y, h) = \frac{1}{2} f\left(t, y\right) + \frac{1}{2} f\left(t + h, y + hf(t, y)\right). \quad (3.2.22)$$

Comparando-se (3.2.22) com (3.2.20), constata-se que $b_1 = \frac{1}{2}$ *e* $b_2 = \frac{1}{2}$ *(logo* $b_1 + b_2 = 1$*) e que* $c_2 = a_{21} = 1$*. Assim, o Método de Euler Aprimorado é um Método de Runge-Kutta de segunda ordem com* 2 *estágios.*

3.2.3 Métodos de Runge-Kutta de ordens mais elevadas

Método 3.4 (Runge-Kutta de Terceira Ordem com Três Estágios (RK33))**.**

$$\Phi(t, y, h) = \frac{1}{6}\left(\kappa_1 + 4\kappa_2 + \kappa_3\right), \quad (3.2.23)$$

[1] O termo "pesos" vem dos pesos usados em um método de integração numérica para equação em sua forma integral.

com

$$\begin{cases} \kappa_1 = f\left(t, y\right), \\ \kappa_2 = f\left(t + \dfrac{h}{2}, y + \dfrac{h}{2}\kappa_1\right), \\ \kappa_3 = f\left(t + h, y - h\kappa_1 + 2h\kappa_2\right). \end{cases}$$

Método 3.5 (Runge-Kutta de Quarta Ordem com Quatro Estágios (RK44))**.**

$$\Phi(t, y, h) = \frac{1}{6}\left(\kappa_1 + 2\kappa_2 + 2\kappa_3 + \kappa_4\right), \tag{3.2.24}$$

com

$$\begin{cases} \kappa_1 = f\left(t, y\right), \\ \kappa_2 = f\left(t + \dfrac{h}{2}, y + \dfrac{h}{2}\kappa_1\right), \\ \kappa_3 = f\left(t + \dfrac{h}{2}, y + \dfrac{h}{2}\kappa_2\right), \\ \kappa_4 = f\left(t + h, y + h\kappa_3\right). \end{cases}$$

Método 3.6 (Runge-Kutta de Quarta Ordem com Cinco Estágios (RK45))**.**

$$\Phi(t, y, h) = \frac{25}{216}\kappa_1 + \frac{1408}{2565}\kappa_3 + \frac{2197}{4104}\kappa_4 - \frac{1}{5}\kappa_5, \tag{3.2.25}$$

com

$$\begin{cases} \kappa_1 = f\left(t, y\right), \\ \kappa_2 = f\left(t + \dfrac{h}{4}, y + \dfrac{h}{4}\kappa_1\right), \\ \kappa_3 = f\left(t + \dfrac{3h}{8}, y + \dfrac{3h}{32}\kappa_1 + \dfrac{9h}{32}\kappa_2\right), \\ \kappa_4 = f\left(t + \dfrac{12h}{13}, y + \dfrac{1932h}{2197}\kappa_1 - \dfrac{7200h}{2197}\kappa_2 + \dfrac{7296h}{2197}\kappa_3\right), \\ \kappa_5 = f\left(t + h, y + \dfrac{439h}{216}\kappa_1 - 8h\kappa_2 + \dfrac{3680h}{513}\kappa_3 - \dfrac{845h}{4104}\kappa_4\right). \end{cases}$$

Método 3.7 (Runge-Kutta de Quinta Ordem com Seis Estágios (RK56))**.**

$$\Phi(t, y, h) = \frac{16}{135}\kappa_1 + \frac{6656}{12825}\kappa_3 + \frac{28561}{56430}\kappa_4 - \frac{9}{50}\kappa_5 + \frac{2}{55}\kappa_6, \tag{3.2.26}$$

com

$$\begin{cases} \kappa_1 = f\left(t, y\right), \\ \kappa_2 = f\left(t + \dfrac{h}{4}, y + \dfrac{h}{4}\kappa_1\right), \\ \kappa_3 = f\left(t + \dfrac{3h}{8}, y + \dfrac{3h}{32}\kappa_1 + \dfrac{9h}{32}\kappa_2\right), \\ \kappa_4 = f\left(t + \dfrac{12h}{13}, y + \dfrac{1932h}{2197}\kappa_1 - \dfrac{7200h}{2197}\kappa_2 + \dfrac{7296h}{2197}\kappa_3\right), \\ \kappa_5 = f\left(t + h, y + \dfrac{439h}{216}\kappa_1 - 8h\kappa_2 + \dfrac{3680h}{513}\kappa_3 - \dfrac{845h}{4104}\kappa_4\right), \\ \kappa_6 = f\left(t + \dfrac{h}{2}, y - \dfrac{8h}{27}\kappa_1 + 2h\kappa_2 - \dfrac{3544h}{2565}\kappa_3 + \dfrac{1859h}{4104}\kappa_4 - \dfrac{11h}{40}\kappa_5\right). \end{cases}$$

3.2.4 Exercícios

Exercício 3.1. *Proponha um Método RK de primeira ordem e dois estágios.*

Exercício 3.2. *Mostre que o Método de Euler Aprimorado (1.4.25) concorda com o Método da Série de Taylor apenas até o termo de segunda ordem.*

Exercício 3.3. *Interprete geometricamente o Método de Euler Modificado e o Método de Euler Aprimorado.*

Exercício 3.4. *Mostre que todos os métodos de ordens mais elevadas (maiores que 2), apresentados na seção 3.2.3, são de fato consistentes e de, pelo menos, segunda ordem.*

Exercício 3.5. *Encontre as condições necessárias sobre os parâmetros da tabela de Butcher para que um método de 3 estágios seja de ordem 3.*

Exercício 3.6. *Considere o método com a seguinte tabela de Butcher*

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

conhecido como método de Ralston. Mostre que o método tem ordem 2 e estime o erro local de discretização. Este método é conhecido por minimizar a constante do erro local de discretização.

3.3 Controle automático do passo de integração

Já sabemos que o erro dos métodos estudados dependem do tamanho do passo de integração h. Discutiremos nesta seção uma forma de escolher h, ao longo da integração, de tal forma a garantir que o erro associado a discretização seja controlado.

A ideia consiste basicamente em usar informações de 2 métodos com ordens diferentes para controlar o erro. Isso é computacionalmente mais eficiente se os métodos coincidirem nas avaliações de f, portanto, essa forma de controle comumente faz uso de métodos de Runge-Kutta que tenham κ_r iguais.

Considere dois métodos explícitos de passo único com ordens $p+1$ e p,

$$y_{k+1}^{p+1} = y_k^{p+1} + h\Phi^{p+1}(t_k, y_k^{p+1}, h), \tag{3.3.27}$$
$$y_{k+1}^{p} = y_k^{p} + h\Phi^{p}(t_k, y_k^{p}, h), \tag{3.3.28}$$

definidos pelas funções de iterações Φ^{p+1} e Φ^p,

$$\Phi^{p+1}(t,y,h) = \sum_{r=1}^{R} b_r^{p+1}\kappa_r(t,y,h) \tag{3.3.29}$$

$$\Phi^{p}(t,y,h) = \sum_{r=1}^{R} b_r^{p}\kappa_r(t,y,h), \tag{3.3.30}$$

onde R é o número de estágios do método de ordem mais alta. Caso o método de ordem mais baixa tenha número de estágios, R_p, menor que R, os últimos estágios devem assumir valor nulo ($b_r^p = 0$ para $r = R_p + 1, R_p + 2, ..., R$).

Subtraindo os erros locais de discretizações (α_k^p e α_k^{p+1}), considerando que os métodos tem avaliações de κ_r iguais (mesmos c_r e a_{rs}), temos que

$$\begin{aligned}\alpha_k^p - \alpha_k^{p+1} &= \Phi^p(t_k, y(t_k), h) - \Phi^{p+1}(t_k, y(t_k), h)\\ &= \sum_{r=1}^{s}(b_r^p - b_r^{p+1})\kappa_r(t_k, y(t_k), h).\end{aligned}$$

Como α_k^{p+1} tem ordem $p+1$, podemos estimar α_k^p como base em

$$\alpha_k^p = \sum_{r=1}^{s}(b_r^p - b_r^{p+1})\kappa_r(t_k, y(t_k), h) + O(h^{p+1}), \tag{3.3.31}$$

usando

$$\alpha_k^p \approx \sum_{r=1}^{s}(b_r^p - b_r^{p+1})\kappa_r(t_k, y_k, h). \tag{3.3.32}$$

Note que, usando as definições de erros locais de discretizações, isso também poderia ser estimado como

$$\alpha_k^p \approx \frac{1}{h}(y_{k+1}^p - y_{k+1}^{p+1}), \tag{3.3.33}$$

ao custo de termos que avaliar ambos métodos. Por outro lado, usando (3.3.32), aproveitamos as contas dos κ_r.

A estimativa de α_k^p pode ser usada para escolhermos um passo de integração h dentro de uma tolerância para o erro local de discretização. Seja $\epsilon > 0$ uma tolerância fixada. Suponha que demos um passo de integração, com tamanho h_k, para o qual, com base na estimativa de α_k, temos

$$|\alpha_k^p(h_k)| \leq \epsilon, \tag{3.3.34}$$

Sabemos que $\alpha_k^p(h) \approx Ch_k^p$, para algum C que pode depender de t_k, mas não depende de h_k. Gostaríamos de achar h_{k+1} de tal forma a garantir que o erro permaneça dentro da tolerância. Assim, precisamos que

$$|\alpha_{k+1}(h_{k+1})| \approx |C|h_{k+1}^p \leq \epsilon. \tag{3.3.35}$$

Portanto, uma primeira aproximação para h_{k+1} pode ser obtida considerando que, tanto no passo k quanto em $k+1$, temos a mesma constante C, de forma a obter que

$$|\alpha_k^p(h_k)|\frac{h_{k+1}^p}{h_k^p} \leq \epsilon. \tag{3.3.36}$$

Podemos então adotar como próximo passo de integração

$$h_{k+1} = h_k \left(\frac{\epsilon}{|\alpha_k(h_k)|}\right)^{1/p}. \tag{3.3.37}$$

Com base no h_{k+1} calculado, estima-se $\alpha_{k+1}(h_{k+1})$. Se este for menor que a tolerância, passa-se para o próximo passo de integração, senão, deve-se diminuir o h_{k+1} e re-calcular $\alpha_{k+1}(h_{k+1})$ até obtermos a precisão desejada.

Implementações mais simples estimam diretamente $\alpha_k(h_k)$ a cada passo de tempo e consideram, de forma iterativa, diferentes valores de h_k até que a tolerância seja atingida ($|\alpha_k(h_k)| < \epsilon$). Uma possibilidade é, por exemplo, multiplicar sucessivamente h_k por $0 < \beta < 1$ até obter a precisão desejada.

Exemplo 3.4. *Ilustraremos o procedimento com os métodos de Euler Modificado (3.2.11) e de Runge-Kutta RK33 (3.2.23). Para estes métodos temos, respectivamente, os seguinte erros de discretização locais são*

$$\alpha_k^{EM} = \frac{y(t_{k+1}) - y(t_k)}{h} - \kappa_2 \tag{3.3.38}$$

e

$$\alpha_k^{RK33} = \frac{y(t_{k+1}) - y(t_k)}{h} - \frac{1}{6}(\kappa_1 + 4\kappa_2 + \kappa_3), \tag{3.3.39}$$

para os quais é possível observar que ambos métodos tem a mesma avaliação de κ_2.

Calculando-se a diferença entre (3.3.38) e (3.3.39), chega-se a

$$\begin{aligned} \alpha_k^{EM} - \alpha_k^{RK33} &= -\kappa_2 + \frac{1}{6}(\kappa_1 + 4\kappa_2 + \kappa_3) = & (3.3.40)\\ &= \frac{1}{6}(\kappa_1 - 2\kappa_2 + \kappa_3). & (3.3.41) \end{aligned}$$

Como $\alpha_k^{RK33} = O(h^3)$, pode-se reescrever (3.3.40) na forma

$$\alpha_k^{EM} = \frac{1}{6}(\kappa_1 - 2\kappa_2 + \kappa_3) + O(h^3),$$

ou aproximadamente

$$\alpha_k^{EM} \approx \frac{1}{6}(\kappa_1 - 2\kappa_2 + \kappa_3). \tag{3.3.42}$$

Empregando-se (3.3.42) como uma estimativa para o erro de discretização local do Método de Euler Modificado, pode-se propor uma estratégia ingênua para controlar o passo de integração no Método de Euler Modificado. Dados (t_k, y_k), $h > 0$ e $\epsilon > 0$, um passo típico de integração dessa estratégia, sem usar (3.3.37), é descrita no Algoritmo (3.3.1).

O algoritmo 3.3.1 possui duas constantes, β e δ, que agem da seguinte forma. β reduz o passo de integração para que a tolerância seja alcançada, e δ aumenta o

1. Calcule κ_i, $i = 1, 2, 3$ e α_k^{EM},

   $\kappa_1 = f(t_k, y_k)$,
   $\kappa_2 = f(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}\kappa_1)$,
   $\kappa_3 = f(t_k + h, y_k - h\kappa_1 + 2h\kappa_2)$,

   $\alpha_k^{EM} = \frac{1}{6}(\kappa_1 - 2\kappa_2 + \kappa_3)$.

2. Ache um h adequado a tolerância ϵ.
   Enquanto $\alpha_k^{EM} > \epsilon$ faça

   - Reduza o passo de integração, $h \leftarrow \beta h$, $0 < \beta < 1$;
   - Recalcule κ_i, $i = 1, 2, 3$ e $\alpha_k^{EM} = \frac{1}{6}(\kappa_1 - 2\kappa_2 + \kappa_3)$.

3. Avance a solução numérica e atualize o marcador de tempo:

   $y_k \leftarrow y_k + h\Phi_{EM}$,
   $t_k \leftarrow min\{t_k + h, t_{final}\}$.

4. Se $t_k < t_{final}$ então

   - aumente o passo de integração, $h \leftarrow \delta h$, $\delta > 1$,
     e retorne a 1,

   senão FIM

Algoritmo 3.3.1: Controle do passo de integração no Método de Euler Modificado.

passo de integração para que sempre consideremos passos suficientemente grandes e evitarmos darmos passos pequenos demais (correndo o risco de ficarmos quase parados!). O algoritmo pode facilmente incluir também a estimativa para o h do próximo passo com base na equação (3.3.37).

A combinação dos Métodos RK45 (3.2.25) e RK56 (3.2.26) é conhecida como *Método de Runge-Kutta-Fehlberg* [3, 24]. Essa combinação é comumente empregada na prática para controlar automaticamente o passo de integração.

3.3.1 Exercícios

Exercício 3.7. *Escreva um algoritmo que empregue o Método de Euler com controle automático do passo de integração baseado nos erros locais de discretização dos Métodos de Euler e de Euler Modificado.*

Exercício 3.8. *Escreva um algoritmo que empregue o Método de Runge-Kutta* 45 *com controle automático do passo de integração baseado nos erros locais de discretização dos Métodos de Runge-Kutta* 45 *(3.2.25) e de Runge-Kutta* 56 *(3.2.26) (Runge-Kutta-Felhberg). Verifique que a estimativa para o erro local de discretização é dada por*

$$\alpha_k^{RKF} \approx \frac{1}{360}\kappa_1 - \frac{128}{4275}\kappa_3 - \frac{2197}{75240}\kappa_4 + \frac{1}{50}\kappa_5 + \frac{2}{55}\kappa_6.$$

(Sugestão: veja o algoritmo proposto por Burden [3].)

3.4 Suplemento teórico

Teorema 3.1 (Barreira Explícita (Butcher)). *Se um método de Runge-Kutta com R-estágios tem ordem p, então $R \geq p$. Além disso, se $p \geq 5$, então $R > p$.*

Este importante teorema nos diz que são necessários pelo menos q estágios para obter um método de Runge-Kutta de ordem q. A demonstração exige definições que vão além do escopo dessas notas, mas pode ser encontrada em [5].

3.5 Exercícios resolvidos

Exercício Resolvido 3.1. *Determine os parâmetros a_2, c_1 e c_2 do Método de Runge-Kutta com 2 estágios de modo que este tenha ordem máxima. Mostre que a ordem não pode exceder dois e deduza os métodos de Euler Aprimorado*

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0), \\ y_{k+1} = y_k + h\Phi(t_k, y_k, h), \quad t_{k+1} = t_k + h, \quad 0 \leq k \leq n-1, \end{cases}$$

$$\Phi(t_k, y_k, h) = \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{2} \quad e \quad \begin{array}{l} \kappa_1 = f(t_k, y_k), \\ \kappa_2 = f(t_k + h, y_k + h\kappa_1), \end{array}$$

e de Euler Modificado

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0), \\ y_{k+1} = y_k + h\Phi(t_k, y_k, h), \quad t_{k+1} = t_k + h, \quad 0 \leq k \leq n-1, \end{cases}$$

$$\Phi(t_k, y_k, h) = \kappa_2 \quad e \quad \begin{array}{l} \kappa_1 = f(t_k, y_k), \\ \kappa_2 = f(t_k + \dfrac{h}{2}, y_k + \dfrac{h}{2}\kappa_1), \end{array}$$

ambos com $h = \dfrac{b-a}{n}$.

Solução:

O Método da Série de Taylor de ordem 3 é dado por

$$y_{k+1} = y_k + hy^{(1)}(t_k) + \frac{h^2}{2!}y^{(2)}(t_k) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(t_k) + O(h^4)$$

onde as derivadas são dadas por

$$y^{(1)}(t) = f(t,y), \quad y^{(2)}(t) = f_t(t,y) + f_y(t,y)f(t,y) \quad e \quad y^{(3)}(t) = f_{tt}(t,y) +$$

$$+2f_{ty}(t,y)f(t,y) + f_{yy}(t,y)f^2(t,y) + f_t(t,y)f_y(t,y) + f_y^2(t,y)f(t,y).$$

Em uma única expressão, tem-se

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + hf(t_k,y_k) + \frac{h^2}{2!}\left[f_t(t_k,y_k) + f_y(t_k,y_k)f(t_k,y_k)\right] + \\ &+ \frac{h^3}{3!}\left[f_{tt}(t_k,y_k) + 2f_{ty}(t_k,y_k)f(t_k,y_k) + f_{yy}(t_k,y_k)f^2(t_k,y_k)\right] + \\ &+ \frac{h^3}{3!}\left[f_t(t_k,y_k)f_y(t_k,y_k) + f_y^2(t_k,y_k)f(t_k,y_k)\right] + O(h^4). \end{aligned} \tag{3.5.43}$$

Um Método de Runge-Kutta de 2 estágios se escreve como

$$y_{k+1} = y_k + h\left(c_1\kappa_1 + c_2\kappa_2\right), \tag{3.5.44}$$

com $\kappa_1 = f(t_k, y_k)$ *e* $\kappa_2 = f(t_k + a_2h, y_k + hb_{21}\kappa_1)$. *Como* $a_2 = b_{21}$, *tem-se para* κ_2

$$\kappa_2 \quad = \quad f(t_k + a_2h, y_k + ha_2\kappa_1). \tag{3.5.45}$$

Truncando-se a expansão de (3.5.45) em Série de Taylor ao redor de (t_k, y_k) *nos termos de ordem 2, obtém-se*

$$\begin{aligned} \kappa_2 &= f(t_k, y_k) + a_2h\left[f_t(t_k, y_k) + \kappa_1 f_y(t_k, y_k)\right] + \\ &+ \frac{a_2^2h^2}{2!}\left[f_{tt}(t_k, y_k) + 2\kappa_1 f_{ty}(t_k, y_k) + \kappa_1^2 f_{yy}(t_k, y_k)\right]. \end{aligned} \tag{3.5.46}$$

Após reorganização em potências de h, *a substituição de (3.5.46) em (3.5.44) resulta em*

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + (c_1 + c_2)hf(t_k, y_k) + \\ &+ a_2c_2h^2\left[f_t(t_k, y_k) + f(t_k, y_k)f_y(t_k, y_k)\right] + \\ &+ \frac{a_2^2c_2h^3}{2!}\left[f_{tt}(t_k, y_k) + 2f(t_k, y_k)f_{ty}(t_k, y_k) + f^2(t_k, y_k)f_{yy}(t_k, y_k)\right]. \end{aligned} \tag{3.5.47}$$

Comparando-se (3.5.43) e (3.5.47), conclui-se que

$$\begin{cases} c_1 + c_2 &= 1, \\ a_2c_2 &= \dfrac{1}{2!}. \end{cases}$$

Assim, se $c_1 = c_2 = \dfrac{1}{2}$ *então* $a_2 = 1$ *e tem-se o Método de Euler Aprimorado. Se* $c_1 = 0$ *e* $c_2 = 1$ *então* $a_2 = \dfrac{1}{2}$ *e tem-se o Método de Euler Modificado. Não é possível estabelecer concordância entre os termos de terceira ordem de (3.5.43) e (3.5.47). Em (3.5.47) há três termos com o fator* h^3, *enquanto que em (3.5.43) há cinco termos com esse fator. Portanto, a ordem não pode exceder dois.*

Exercício Resolvido 3.2. *Obtenha um método de Runge-Kutta de três estágios de terceira ordem para o qual* $c_2 = c_3$ *e* $a_2 = a_3$.
Solução:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h\sum_{r=1}^{3} c_r\kappa_r = \\ &= y_k + h\left(c_1\kappa_1 + c_2\kappa_2 + c_3\kappa_3\right). \end{aligned}$$

Como $c_2 = c_3$, *tem-se que*

$$y_{k+1} = y_k + h\left(c_1\kappa_1 + c_2\kappa_2 + c_2\kappa_3\right), \tag{3.5.48}$$

sendo

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(t, y), \\ \kappa_2 &= f(t + ha_2, y + hb_{21}\kappa_1), \\ \kappa_3 &= f(t + ha_3, y + hb_{31}\kappa_1 + hb_{32}\kappa_2). \end{aligned}$$

De $a_r = \sum_{s=1}^{r-1} b_{rs}$, $0 < r \leq 3$, *e* $a_2 = a_3$, *obtêm-se* $a_2 = b_{21}$, $a_3 = b_{31} + b_{32}$ *e* $a_2 = b_{31} + b_{32}$, *o que implica que* $b_{31} = a_2 - b_{32}$.

Assim,

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(t, y), \\ \kappa_2 &= f(t + ha_2, y + ha_2\kappa_1), \\ \kappa_3 &= f(t + ha_2, y + h(a_2 - b_{32})\kappa_1 + hb_{32}\kappa_2). \end{aligned}$$

Considere que $f(t, y)$ *tenha derivadas parciais contínuas até a ordem necessária, então expande-se* κ_2 *e* κ_3 *em torno do ponto* (t, y) *até o termo de segunda ordem. Durante a expansão, todos os termos de terceira ordem são desprezados porque na substituição em (3.5.48) esses termos acabam compondo termos de ordem quatro.*

- *Expansão de* κ_2 *(com* $\kappa_1 = f$*):*

$$\begin{aligned} \kappa_2 &= f + ha_2(f_t + ff_y) + \frac{h^2a_2^2}{2}(f_{tt} + 2ff_{ty} + f^2f_{yy}) = \\ &= f + ha_2F + \frac{h^2a_2^2}{2}G, \end{aligned} \tag{3.5.49}$$

onde $F = f_t + ff_y$ *e* $G = f_{tt} + 2ff_{ty} + f^2f_{yy}$.

- *Expansão de* κ_3 *(com* $\kappa_1 = f$*):*

$$\begin{aligned} \kappa_3 &= f + h\left\{a_2f_t + \left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]f_y\right\} + \\ &+ \frac{h^2}{2}\{a_2^2f_{tt} + 2a_2\left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]f_{ty} + \\ &+ \left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]^2 f_{yy}\} = \\ &= f + h\boxed{A} + \frac{h^2}{2}\boxed{B}, \end{aligned}$$

onde $\boxed{A} = \{a_2f_t + \left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]f_y\}$ *e*

$\boxed{B} = \{a_2^2f_{tt} + 2a_2\left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]f_{ty} + \left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]^2 f_{yy}\}$.

Desenvolvimento de $\boxed{A}$*:*

$$\begin{aligned} \boxed{A} &= a_2f_t + \left[(a_2 - b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]f_y \\ &= a_2f_t + a_2ff_y - b_{32}ff_y + b_{32}f_y\left(f + ha_2F + \frac{h^2a_2^2}{2}G\right) \\ &= a_2f_t + a_2ff_y - b_{32}ff_y + b_{32}ff_y + ha_2b_{32}Ff_y + \frac{h^2a_2^2}{2}b_{32}Gf_y \\ &= a_2(f_t + ff_y) - b_{32}ff_y + b_{32}ff_y + ha_2b_{32}Ff_y + \frac{h^2a_2^2}{2}b_{32}Gf_y \\ &= a_2F + ha_2b_{32}Ff_y + \frac{h^2a_2^2b_{32}}{2}Gf_y. \end{aligned}$$

Assim,

$$\boxed{A} = a_2F + ha_2b_{32}Ff_y + \frac{h^2a_2^2b_{32}}{2}Gf_y. \tag{3.5.50}$$

Desenvolvimento de $\boxed{B}$*:*

$$\begin{aligned}\boxed{B} &= a_2^2f_{tt} + 2a_2\left[(a_2-b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]f_{ty} + \\ &+ \left[(a_2-b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]^2 f_{yy} = \\ &= a_2^2f_{tt} + 2a_2^2ff_{ty} - 2a_2b_{32}ff_{ty} + \underbrace{2a_2b_{32}f_{ty}\kappa_2}_{B_1} + \\ &+ \underbrace{\left[(a_2-b_{32})f + b_{32}\kappa_2\right]^2 f_{yy}}_{B_2}.\end{aligned} \tag{3.5.51}$$

Substituindo-se (3.5.49) em B_1 *e* B_2*, chega-se a:*

$$\begin{aligned}B_1 &= 2a_2b_{32}ff_{ty} + 2ha_2^2b_{32}Ff_{ty}, \\ B_2 &= a_2^2f^2f_{yy} + 2ha_2^2b_{32}Fff_{yy}.\end{aligned}$$

Em B_1 *e* B_2*, descartaram-se termos com fator* h^p*,* $p > 1$*. Substituindo-se* B_1 *e* B_2 *em (3.5.51), obtém-se*

$$\boxed{B} = a_2^2G + 2ha_2^2b_{32}Ff_{ty} + 2ha_2^2b_{32}Fff_{yy}. \tag{3.5.52}$$

Substituindo-se (3.5.50) e (3.5.52) em (3.5.50), tem-se

$$\begin{aligned}\kappa_3 &= f + h\left(a_2F + ha_2b_{32}Ff_y + \frac{h^2a_2^2b_{32}}{2}Gf_y\right) \\ &+ \frac{h^2}{2}\left(a_2^2G + 2ha_2^2b_{32}Ff_{ty} + 2ha_2^2b_{32}Fff_{yy}\right) = \\ &= f + ha_2F + \frac{h^2}{2}\left(a_2^2G + 2a_2b_{32}Ff_y\right).\end{aligned} \tag{3.5.53}$$

Em (3.5.53), descartou-se o termo com fator h^3*.*

Substituindo κ_1*,* κ_2 *e* κ_3 *em (3.5.48), tem-se*

$$\begin{aligned}y_{k+1} &= y_k + h\left[c_1f + c_2\left(f + ha_2F + \frac{h^2a_2^2}{2}G\right)\right] + \\ &+ hc_2\left[f + ha_2F + \frac{h^2}{2}\left(a_2^2G + 2a_2b_{32}Ff_y\right)\right] = \\ &= y_k + h(c_1+2c_2)f + 2h^2a_2c_2F + h^3\left(a_2^2c_2 + a_2b_{32}c_2Ff_y\right).\end{aligned} \tag{3.5.54}$$

O Método da Série de Taylor de terceira ordem é dado pela expressão

$$y_{k+1} = y_k + hf + \frac{h^2}{2}F + \frac{h^3}{6}\left(G + Ff_y\right). \tag{3.5.55}$$

Para que (3.5.54) coincida com (3.5.55), deve-se ter

$$\begin{cases} c_1 + 2c_2 = 1 \\ 2a_2c_2 = \dfrac{1}{2} \\ a_2^2c_2 = \dfrac{1}{6} \\ a_2^2b_{32}c_2 = \dfrac{1}{6} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_2 = \dfrac{2}{3} \\ b_{32} = \dfrac{2}{3} \\ c_1 = \dfrac{1}{4} \\ c_2 = \dfrac{3}{8} \end{cases}.$$

Com os valores anteriores, tem-se $a_3 = \dfrac{2}{3}$, $c_3 = \dfrac{3}{8}$ *e* $b_{31} = 0$. *Assim, o Método de Runge-Kutta de terceira ordem, com as condições impostas, é dado por*

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{4}\left(\kappa_1 + \frac{3}{2}\kappa_2 + \frac{3}{2}\kappa_3\right),$$

com $\kappa_1 = f(t,y)$, $\kappa_2 = f\left(t + \dfrac{2h}{3}, y + \dfrac{2h}{3}\kappa_1\right)$ *e* $\kappa_3 = f\left(t + \dfrac{2h}{3}, y + \dfrac{2h}{3}\kappa_2\right)$.

Exercício Resolvido 3.3. *Mostre que o Método de Runge-Kutta 44 clássico,*

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0), \\ y_{k+1} = y_k + h\Phi(t_k, y_k, h), \quad t_{k+1} = t_k + h, \quad 0 \le k \le n-1, \end{cases}$$

onde $\Phi(t_k, y_k, h) = \frac{1}{6}(\kappa_1 + 2\kappa_2 + 2\kappa_3 + \kappa_4)$, *com*

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(t_k, y_k), \\ \kappa_2 &= f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, y_k + \tfrac{h}{2}\kappa_1\right), \\ \kappa_3 &= f\left(t_k + \tfrac{h}{2}, y_k + \tfrac{h}{2}\kappa_2\right), \\ \kappa_4 &= f(t_k + h, y_k + h\kappa_3) \end{aligned}$$

e $h = \dfrac{(b-a)}{n}$, *aplicado à equação diferencial* $\dot{y} = py$, p *constante, fornece*

$$\frac{y_{k+1}}{y_k} = e^{ph} + O(ph)^5.$$

Solução:

Calculando-se κ_1, κ_2, κ_3 *e* κ_4 *para a equação* $\dot{y} = py$, *têm-se*

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(t_k, y_k) = py_k, \\ \kappa_2 &= f(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}\kappa_1) = p\left(y_k + \frac{h}{2}py_k\right) = \left(p + \frac{p^2h}{2}\right)y_k, \\ \kappa_3 &= f(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}\kappa_2) = p\left[y_k + \frac{h}{2}\left(p + \frac{p^2h}{2}\right)y_k\right] = \\ &= \left(p + \frac{p^2h}{2} + \frac{p^3h^2}{4}\right)y_k, \\ \kappa_4 &= f(t_k + h, y_k + h\kappa_3) = p\left[y_k + h\left(p + \frac{p^2h}{2} + \frac{p^3h^2}{4}\right)y_k\right] = \\ &= \left(p + p^2h + \frac{p^3h^2}{2} + \frac{p^4h^3}{4}\right)y_k. \end{aligned}$$

Aplicando-se os resultados acima no Método de Runge-Kutta de quarta ordem, obtém-se

$$y_{k+1} = \left(1 + ph + \frac{p^2h^2}{2} + \frac{p^3h^3}{6} + \frac{p^4h^4}{24}\right) y_k,$$

donde

$$\frac{y_{k+1}}{y_k} = 1 + ph + \frac{p^2h^2}{2!} + \frac{p^3h^3}{3!} + \frac{p^4h^4}{4!}. \tag{3.5.56}$$

Como

$$e^{ph} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ph)^n}{n!} = 1 + ph + \frac{p^2h^2}{2!} + \frac{p^3h^3}{3!} + \frac{p^4h^4}{4!} + O\left((ph)^5\right),$$

pode-se reescrever (3.5.56) como

$$\frac{y_{k+1}}{y_k} = e^{ph} + O(p^5h^5).$$

Exercício Resolvido 3.4. *Considere o problema de valor inicial*

$$\begin{cases} \dot{y} = e^{2t}, \ 0 \leq t \leq 1, \\ y(0) = \frac{1}{2}. \end{cases}$$

(a) Estime h para que o erro de discretização local para o Método de Euler seja menor que 10^{-4}.

(b) A estimativa para h obtida no item (a) pode ser usada como aproximação inicial do passo de integração para o Método de Runge-Kutta-Fehlberg? Justifique.

Solução:

(a) O Método de Euler

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ y_{k+1} = y_k + hf(t_k, y_k) \end{cases}$$

tem erro local de discretização dado por

$$\alpha_k = \frac{y(t_{k+1}) - y(t_k)}{h} - f\left((t_k, y(t_k)\right). \tag{3.5.57}$$

Truncando-se no segundo termo a expansão em série de Taylor de $y(t_{k+1})$ com centro em $t = t_k$, obtém-se

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + (t_{k+1} - t_k)y'(t_k) + \frac{(t_{k+1} - t_k)^2}{2!}y''(\xi), \tag{3.5.58}$$

com $\xi \in (t_k, t_{k+1})$.

Denotando-se $h = t_{k+1} - t_k$ e substituindo-se (3.5.58) em (3.5.57), tem-se que

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{y(t_k) + hy'(t_k) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi) - y(t_k)}{h} - f\left(t_k, y(t_k)\right) \\ &= y'(t_k) + \frac{h}{2!}y''(\xi) - f\left(t_k, y(t_k)\right) \\ &= \frac{h}{2}y''(\xi). \end{aligned} \tag{3.5.59}$$

Assim,

$$\begin{aligned} |\alpha_k| &= \frac{h}{2}\,|y''(\xi)|\,, \\ \max_k |\alpha_k| &\leq \frac{h}{2}\max_{\xi\in I}|y''(\xi)|, \\ \frac{h}{2}\max_{\xi\in I}|y''(\xi)| &< 10^{-4}, \\ h &< \frac{2.10^{-4}}{\max\limits_{\xi\in I}|y''(\xi)|}. \end{aligned} \tag{3.5.60}$$

Ainda,

$$\begin{aligned} I &= [0,1], \\ y(t) &= \frac{e^{2t}}{2}, \\ y'(t) &= e^{2t}, \\ y''(t) &= 2e^{2t}. \end{aligned} \tag{3.5.61}$$

Como a função (3.5.61) é estritamente crescente no intervalo $[0,1]$*, assumindo o valor máximo* $2e^2$ *em* $t=1$*, pode-se reescrever (3.5.60) como*

$$h < \frac{2.10^{-4}}{2e^2},$$

$$\boxed{h < \frac{10^{-4}}{e^2} \approx 1,35335x10^{-5}.} \tag{3.5.62}$$

(b) Uma aproximação para o erro local de discretização do Método de Runge-Kutta-Felhberg é dada por

$$\alpha_k^{RKF} \approx \frac{1}{360}\kappa_1 - \frac{128}{4275}\kappa_3 - \frac{2197}{75240}\kappa_4 + \frac{1}{50}\kappa_5 + \frac{2}{55}\kappa_6. \tag{3.5.63}$$

Calculando (3.5.63) com $f(t,y(t)) = e^{2t}$*,* $t_0 = 0$ *e* $h = \dfrac{10^{-4}}{e^2}$*, obtém-se*

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= (t_0, y_0) = e^{2t_0} = e^0 = 1, \\ \kappa_2 &= f\left(t_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{h}{4}\kappa_1\right) \\ &= e^{2\left(t_0+\frac{h}{4}\right)} = e^{\frac{h}{2}} \approx 1,000006767, \\ \kappa_3 &= f\left(t_0 + \frac{3h}{8}, y_0 + \frac{3h}{32}\kappa_1 + \frac{9h}{32}\kappa_2\right) \\ &= e^{2\left(t_0+\frac{3h}{8}\right)} = e^{\frac{3h}{4}} \approx 1,00001015, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\kappa_4 &= f\left(t_0+\frac{12h}{13}, y_0+\frac{1932h}{2197}\kappa_1-\frac{7200h}{2197}\kappa_2+\frac{7296h}{2197}\kappa_3\right)\\ &= e^{2\left(t_0+\frac{12h}{13}\right)}=e^{\frac{24h}{13}}\approx 1,000024985,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\kappa_5 &= f\left(t_0+h, y_0+\frac{439h}{216}\kappa_1-8h\kappa_2+\frac{3680h}{513}\kappa_3-\frac{845h}{4104}\kappa_4\right)\\ &= e^{2(t_0+h)}=e^{2h}\approx 1,000027067,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\kappa_6 &= f\left(t_0+\frac{h}{2}, y_0-\frac{8h}{27}\kappa_1+2h\kappa_2-\frac{3544h}{2565}\kappa_3+\frac{1859h}{4104}\kappa_4-\frac{11h}{40}\kappa_5\right)\\ &= e^{2\left(t_0+\frac{h}{2}\right)}=e^{h}\approx 1,000013534,\end{aligned}$$

$$\alpha_0^{RKF} \approx 1,96784x10^{-11}. \tag{3.5.64}$$

Como no Método de Runge-Kutta Fehlberg tem-se que

$$\left|\alpha_0^{RKF}\right| = 1,96784x10^{-11} < \epsilon = 10^{-4}, \tag{3.5.65}$$

pode-se usar $\dfrac{10^{-4}}{e^2}$ *como valor inicial para o passo de integração* h*. O mesmo se verifica para* $h < \dfrac{10^{-4}}{e^2}$*.*