

Capítulo 6 – Equações Diferenciais Ordinárias

* O Problema de Cauchy ou Problema de Valor Inicial (PVI)

- **O problema:** Determinar a função $y \in C^1(J)$,
onde J denota um intervalo de $\mathbb{R}$, que satisfaz,

$$\begin{cases} y' = f(t, y(t)), & t \in J \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

- Trata-se de um **Problema de Cauchy** de **primeira ordem**, por não ocorrerem derivadas de ordem mais elevada.
- À relação $y(t_0) = y_0$ chama-se **condição inicial** ou **condição de valor inicial**.

por exemplo: o problema
$$\begin{cases} y' = y(t) \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

tem como **solução** a função $y = e^t$.

- O Problema de Valor Inicial torna-se **equivalente** à resolução da equação,

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(s, y(s)) ds$$

se e só se f for **contínua** com respeito a t .

* **Existência e Unicidade de Solução**

- **definição:** A função $f(t, y)$ satisfaz uma **condição de Lipschitz** com respeito a y se existe uma **constante** $L > 0$ tal que,

$$|f(t, y) - f(t, z)| \leq L |y - z|$$

para todo o $t \in J$ e para todos os reais y e z .

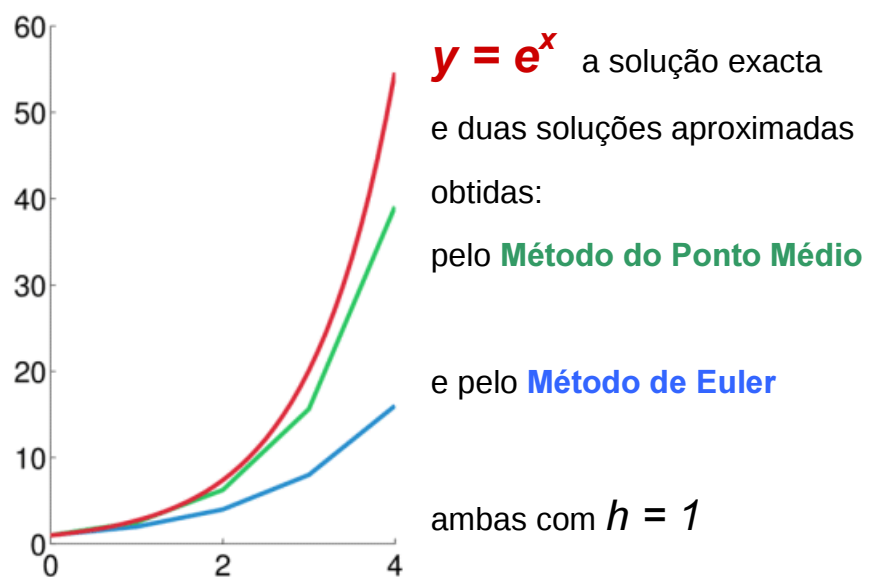
A **constante de Lipschitz** L é independente de t .

- **teorema:** O Problema de Cauchy (PVI) de primeira ordem **tem uma única solução** $y(t)$ para $t \in J$, se
 - (1) $f(t, y)$ é **contínua** em t e
 - (2) $f(t, y)$ satisfaz uma **condição de Lipschitz** com respeito a y .

* Resolução Numérica – Discretização

- Serão apenas determinados **valores aproximados** da função y num **conjunto discreto** de N pontos.
- Fixe-se $0 < T < \infty$ e seja $J = [t_0, t_0 + T]$ o **intervalo de integração**.
- Fazendo $h = T / N$ obtemos uma **malha uniforme** do intervalo J .
- h (amplitude dos subintervalos) chama-se **passo de discretização** (ou simplesmente **passo**).

para o mesmo exemplo:



- Vamos representar a **solução exacta** $y(t_n)$ no nó t_n simplesmente por y_n e a **solução numérica aproximada** no mesmo nó por u_n ,
- assim,

$$y_n \equiv y(t_n)$$

$$u_n \approx y_n$$
- Também representaremos, $f_n \equiv f(t_n, u_n)$ e obviamente que $u_0 = y_0$.

⇒ Tipos de Métodos

- **definição:** Um método numérico para a aproximação do PVI é designado de **Passo Simples** se $\forall n \geq 0$, u_{n+1} **depende só** de u_n .
Caso contrário é designado um método de **Passo Múltiplo** (ou Multipasso).
- **definição:** Um método numérico para a aproximação do PVI designa-se **explícito** se u_{n+1} pode ser calculado directamente em termos de valores u_k , $k \leq n$.
Um método diz-se ser **implícito** se u_{n+1} depende implicitamente de si próprio através de f .

* Alguns Métodos de Passo Simples

➡ Método de **Euler Explícito (ou progressivo)**

$$u_{n+1} = u_n + h f_n$$

- A estratégia do método consiste em aproximar a **derivada** pela **diferença finita progressiva**,

$$y'(t) \approx (y(t+h) - y(t)) / h$$

$$y(t+h) \approx y(t) + h y'(t)$$

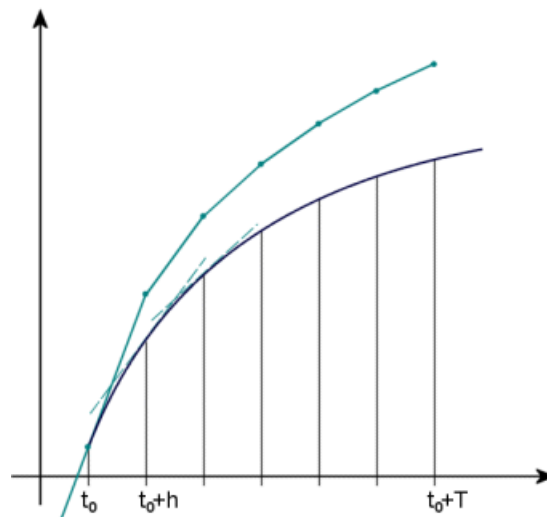
- e como, pela definição de PVI, $y'(t) = f(t, y(t))$,

$$y(t+h) \approx y(t) + h f(t, y(t))$$

- ou, na representação que usamos para as aproximações,

$$u_{n+1} = u_n + h f_n$$

- Deste modo, partindo de $u_0 = y_0$ e para o passo h estipulado, é gerada uma **sucessão de pontos** que aproximam a **solução exacta**.



- para o mesmo exemplo:
$$\begin{cases} y' = y(t) \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

obter uma aproximação da solução $y(x) = e^x$ no intervalo $[0, 1]$ com passo $h = 0.25$ pelo **Método de Euler Explícito**,

$$u_{n+1} = u_n + h f_n$$

$$u_0 = 1$$

$$u_1 = u_0 + 0.25 f_0 = 1.00000 + 0.25(1.00000) = 1.25000$$

$$u_2 = u_1 + 0.25 f_1 = 1.25000 + 0.25(1.25000) = 1.56250$$

$$u_3 = u_2 + 0.25 f_2 = 1.56250 + 0.25(1.56250) = 1.95313$$

$$u_4 = u_3 + 0.25 f_3 = 1.95313 + 0.25(1.95313) = 2.44141$$

- Comparando com os valores exactos, vemos que os resultados obtidos não são muito satisfatórios ...

nh	u_n	e^{nh}
0	1	1
0.25	1.25	1.28403
0.5	1.5625	1.64872
0.75	1.95313	2.117
1.	2.44141	2.71828

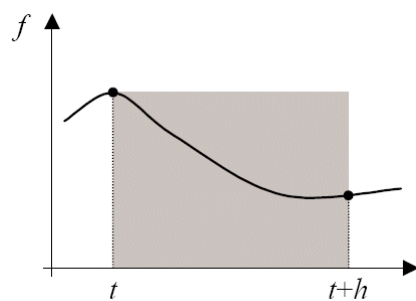
- Podemos conseguir resultados (um pouco) melhores para $h = 0.1$.

nh	u_n	e^{nh}
0	1	1
0.1	1.1	1.10517
0.2	1.21	1.2214
0.3	1.331	1.34986
0.4	1.4641	1.49182
0.5	1.61051	1.64872
0.6	1.77156	1.82212
0.7	1.94872	2.01375
0.8	2.14359	2.22554
0.9	2.35795	2.4596
1.	2.59374	2.71828

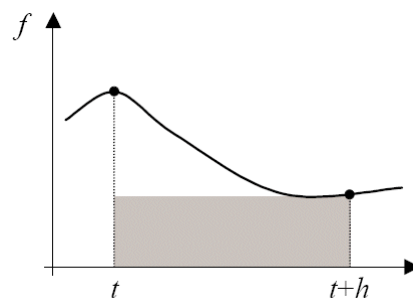
➔ Método de **Euler Implícito (ou regressivo)**

$$u_{n+1} = u_n + h f_{n+1}$$

- Neste caso, a **derivada** é aproximada pela **diferença finita regressiva**.
- O método é análogo ao anterior e a precisão dos resultados obtidos é semelhante.
- Os **erros** verificados em ambos os métodos de Euler, resultam basicamente da aproximação de um **integral** pela **área de um rectângulo**.



Euler Explícito



Euler Implícito

➔ Método de **Crank-Nicolson (ou do trapézio)**

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} (f_n + f_{n+1})$$

- Neste caso, o integral é aproximado pela **regra do trapézio**

➔ Método de **Heun**

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} [f_n + f(t_{n+1}, u_n + h f_n)]$$

- Este método consiste numa variação do anterior. Na regra do trapézio, o termo f_{n+1} é substituído por $f(t_{n+1}, u_n + h f_n)$ que corresponde ao resultado do Método de Euler Explícito.

- Deste modo, um **método implícito** foi transformado num **método explícito**.
- Os quatro métodos anteriores são casos particulares dos chamados **Métodos de Taylor**, por poderem ser deduzidos através do desenvolvimento de Taylor da função pretendida $y(t)$.

* Métodos de Taylor

- Seja a **equação diferencial** $y' = f(t, y(t))$, $t_0 \leq t \leq t_0 + T$,
com a **condição inicial** $y(t_0) = y_0$.

➔ Método de Euler Explícito

- Fazendo $h = T/N$, consideremos o desenvolvimento de Taylor da função $y(t+h)$ em torno de t ,

$$y(t+h) = y(t) + \underbrace{hy'(t)}_{f(t,y)} + \frac{h^2}{2}y''(\xi), \quad \xi \in (t, t+h),$$

$t, t+h \in [t_0, t_0 + T]$

- Tomando apenas os dois primeiros termos e para cada $t = t_n$, temos,

$$u_{n+1} = u_n + hf_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

- que é a fórmula do **Método de Euler Explícito**, bem como a informação de que o **erro** cometido depende da segunda derivada e é $O(h^2)$.

- **exemplo** : Resolver pelo Método de Euler Explícito,

$$\begin{cases} y' = t - y + 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

para $0 \leq t \leq 1$ com $h = 0.1$. (A solução é $y(t) = e^{-t} + t$)

Partindo da relação,

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + h f_n \\ &= u_n + h (t_n - u_n + 1) \\ &= (1 - h) u_n + h (t_n + 1) \end{aligned}$$

de onde calculamos,

nh	u_n	$e^{-nh} + nh$
0	1	1
0.1	1	1.00484
0.2	1.01	1.01873
0.3	1.029	1.04082
0.4	1.0561	1.07032
0.5	1.09049	1.10653
0.6	1.13144	1.14881
0.7	1.1783	1.19659
0.8	1.23047	1.24933
0.9	1.28742	1.30657
1.	1.34868	1.36788

- A maior vantagem do Método de Euler é a sua **simplicidade**. Contudo, os resultados obtidos são de **fraca precisão**, a menos que se utilize um passo muito pequeno, o que torna o processo demasiado lento.

➡ Método de Euler Implícito

- Nas mesmas condições, consideremos agora o desenvolvimento de Taylor da função $y(t-h)$ em torno de t ,

$$y(t-h) = y(t) - \underbrace{h y'(t)}_{f(t,y)} + \frac{h^2}{2} y''(\xi), \quad \xi \in (t-h, t),$$

$t-h, t \in [t_0, t_0 + T]$

- Tomando apenas os dois primeiros termos e para cada $t = t_n$, temos,

$$u_{n+1} = u_n + h f_{n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

- que é a fórmula do **Método de Euler Implícito**, bem como a informação de que o **erro** cometido depende da segunda derivada e é $O(h^2)$.

➡ Métodos de Taylor de ordem mais elevada

- Se considerarmos **mais termos** no desenvolvimento de Taylor, podemos conseguir **erros de truncatura de ordem mais elevada**.

- Por exemplo, considerando **três termos**,

$$y(t+h) = y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \left(\frac{h^3}{6}y'''(\xi)\right)$$

$$\xi \in (t, t+h)$$

$$t, t+h \in [t_0, t_0+T]$$

- À partida não temos $y''(t)$, mas podemos derivar $y'(t)$.
- Deste modo se define o **Método de Taylor de segunda ordem**,

$$u_{n+1} = u_n + hf_n + \frac{h^2}{2}f'(t_n, u_n)$$

$$n = 0, 1, \dots, N-1$$

onde,

$$f'(t_n, u_n) = \frac{\partial f}{\partial t}(t_n, u_n) + f_n \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, u_n)$$

- O **erro** cometido depende da terceira derivada e é $O(h^3)$.
- De modo análogo se podem definir métodos de Taylor de **ordem mais elevada**, mas são muito pouco utilizados.

* Alguns Métodos de Passo Múltiplo (Multipasso)

- Nos métodos anteriores, o cálculo de u_{n+1} dependia apenas de u_n . Contudo, todos os valores $u_0, u_1, \dots, u_n$ foram já calculados e podem ser utilizados.
- definição:** Um **método** diz-se **de m passos** ($m \geq 1$) se u_{n+1} depender dos m valores $u_{n+1-m}, \dots, u_n$.

➔ Método do Ponto Médio

- Neste caso, a estratégia consiste em aproximar a **derivada** pela **diferença finita centrada**,

$$y'(t) \approx \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h}$$

- donde se obtém o **método do Ponto Médio**,

$$u_{n+1} = u_{n-1} - 2hf_n, \quad n \geq 1$$

- Note-se que, à partida temos apenas o valor de $u_0 = y_0$ e não o de u_1 . Este tem de ser calculado por um dos métodos de passo simples.
- O método é **explícito** e de **passo duplo** pois u_{n+1} depende de u_{n-1} e também de $f_n \equiv f(t_n, u_n)$.

➡ Método de Simpson

- Partindo da **formulação integral** do PVI,

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(s, y(s)) ds$$

- e efectuada a discretização, o integral em cada **intervalo duplo** $[t_{n-1}, t_{n+1}]$ pode ser aproximado pela **Regra de Simpson**,

$$\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(s, y(s)) ds \approx \frac{h}{3} (f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1})$$

- donde se obtém o **Método de Simpson**,

$$u_{n+1} = u_{n-1} + \frac{h}{3} (f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}), \quad n \geq 1$$

- que é um método **implícito** pois $f_{n+1} \equiv f(t_{n+1}, u_{n+1})$ e de **passo duplo** pois $f_{n-1} \equiv f(t_{n-1}, u_{n-1})$ e $f_n \equiv f(t_n, u_n)$.
- Note-se que, todo o método de **m passos** requer uma inicialização para os **m valores iniciais** $u_0, u_1, \dots, u_{m-1}$.
- Os métodos anteriores tentam, de algum modo, obter uma aproximação do **integral** da função $f(t, y(t))$.
- Na seguinte família de métodos, a estratégia consiste não em **integrar** f mas um **polinómio interpolador** de f .

➔ A família de Métodos de Adams

- Também partindo da **formulação integral** do PVI,

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(s, y(s)) ds$$

- e da **discretização** em **nós equidistantes** $t_n = t_0 + n h$, $n \geq 1$ com passo $h > 0$,
- em primeiro lugar é efectuada uma **interpolação polinomial** em $p+1$ nós distintos e só depois é **integrado o polinómio interpolador** de grau p .
- Os **métodos da família Adams** têm como forma geral,

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=-1}^p b_j f_{n-j}, \quad n \geq p$$

- Quando $b_{-1} = 0$, os nós de interpolação são $t_{n-p}, \dots, t_n$, a relação é **explícita** e os esquemas resultantes chamam-se **Métodos de Adams-Bashforth**.
- Quando $b_{-1} \neq 0$, os nós de interpolação são $t_{n-p}, \dots, t_{n+1}$, a relação é **implícita** e os esquemas resultantes chamam-se **Métodos de Adams-Moulton**.

➔ Métodos de Adams-Bashforth

- Têm a forma geral:

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=0}^p b_j f_{n-j}$$

- Dada a equação $y' = f(t, y(t))$ a estratégia consiste em **aproximar** $f(t, y(t))$ **por um polinómio** $\Pi_p(t)$ de grau p .

Resta então resolver a equação $y' = \Pi_p(t)$, que consiste apenas na **integração de um polinómio**.

- Para $p = 0$, como o polinómio interpolador de **grau zero** $\Pi_0(t_n) = f_n$, temos o **método de Euler Explícito**.
- Para $p = 1$, construindo o **polinómio interpolador** $\Pi_1(t)$ nos **dois pontos** t_{n-1} e t_n e **integrando** no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$, não é difícil deduzir a fórmula do **Método de Adams-Bashforth de 2 passos**,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} (3f_n - f_{n-1})$$

- De forma análoga, o **Método de Adams-Bashforth de 3 passos**,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{12} (23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$$

- ou ainda o **Método de Adams-Bashforth de 4 passos**,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

- ...

⇒ **Dedução da fórmula do Método de Adams-Bashforth de 2 passos**

- O **polinómio interpolador** $\Pi_1(t)$ nos **dois pontos** t_{n-1} e t_n

$$\Pi_1(t) = f_n + \frac{f_{n-1} - f_n}{t_{n-1} - t_n} (t - t_n)$$

- e **integrando** $\Pi_1(t)$ no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$,

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Pi_1(t) dt &= \\ &= \left[f_n t + \frac{f_{n-1} - f_n}{t_{n-1} - t_n} \frac{(t - t_n)^2}{2} \right]_{t_n}^{t_{n+1}} \\ &= f_n t_{n+1} + \frac{f_{n-1} - f_n}{t_{n-1} - t_n} \frac{(t_{n+1} - t_n)^2}{2} \\ &\quad - f_n t_n + \frac{f_{n-1} - f_n}{t_{n-1} - t_n} \frac{(t_n - t_n)^2}{2} \\ &= f_n t_{n+1} - f_n t_n + \frac{f_{n-1} - f_n}{-h} \frac{h^2}{2} \\ &= f_n(t_{n+1} - t_n) - \frac{h}{2} (f_{n-1} - f_n) \\ &= f_n h - \frac{h}{2} f_{n-1} + \frac{h}{2} f_n = \frac{3h}{2} f_n - \frac{h}{2} f_{n-1} \end{aligned}$$

➔ Métodos de Adams-Moulton

- Têm a forma geral:

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=-1}^p b_j f_{n-j}$$

onde $b_{-1} \neq 0$.

- A estratégia é análoga. Contudo, como a interpolação polinomial inclui o ponto t_{n+1} , estes métodos tornam-se **implícitos**.

Também por isso (e exceptuando o caso $p = -1$) cada método de Adams-Moulton de $p+1$ **passos** resulta de uma interpolação em $p+2$ **pontos**.

- Para $p = -1$, como o polinómio interpolador de **grau zero** no ponto t_{n+1} é f_{n+1} , temos o **método de Euler Implícito**.
- Para $p = 0$, se construirmos o polinómio interpolador nos nós t_n e t_{n+1} , obtemos o **método de Crank-Nicolson**.

- O **Método de Adams-Moulton de 2 passos** é definido por,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{12} [5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}]$$

- e o **Método de Adams-Moulton de 3 passos** é definido por,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{24} (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$

- e o **Método de Adams-Moulton de 4 passos** é definido por,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{720} (251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3})$$

- ...

➔ Métodos BDF (*Backward Differentiation Formulae*)

- Esta classe de métodos segue uma **estratégia inversa** da anterior.

Uma aproximação de $y'(t_{n+1})$ é obtida por **derivação directa** do **polinómio** de grau $p+1$ **interpolador** de $y(t_{n+1})$ nos $p+1$ nós $t_{n-p}, \dots, t_n, t_{n+1}$.

- São portanto **métodos implícitos** e têm a forma geral:

$$u_{n+1} = \sum_{j=0}^p a_j u_{n-j} + h b_{-1} f_{n+1}$$

- Para $p = 0, 1, \dots, 5$ os **coeficientes** são dados por,

p	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b_{-1}
0	1	0	0	0	0	0	1
1	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	0	0	0	$\frac{2}{3}$
2	$\frac{18}{11}$	$-\frac{9}{11}$	$\frac{2}{11}$	0	0	0	$\frac{6}{11}$
3	$\frac{48}{25}$	$-\frac{36}{25}$	$\frac{16}{25}$	$-\frac{3}{25}$	0	0	$\frac{12}{25}$
4	$\frac{300}{137}$	$-\frac{300}{137}$	$\frac{200}{137}$	$-\frac{75}{137}$	$\frac{12}{137}$	0	$\frac{60}{137}$
5	$\frac{360}{147}$	$-\frac{450}{147}$	$\frac{400}{147}$	$-\frac{225}{147}$	$\frac{72}{147}$	$-\frac{10}{147}$	$\frac{60}{147}$

- Portanto, para resolver a equação $y'(t) = f(t, y(t))$:

- ⇒ **Métodos de Adams:** - aproximar $f(t, y(t))$ por um polinómio;
- integrar polinómio.

⇒ **Métodos BDF:** - aproximar $y(t)$ por um polinómio;
- derivar polinómio.

* A abordagem do tipo Preditor – Corrector

- Estes métodos destinam-se a tirar partido das propriedades dos métodos implícitos, evitando o problema da recursão que lhes é inerente.
- São portanto a **combinação** de um **método explícito** com um **método implícito**:
 - Em primeiro lugar um **método explícito** calcula um U_{n+1}^* , valor aproximado de U_{n+1} .
 - Depois, esse U_{n+1}^* é usado do **lado direito** da expressão de um **método implícito**, gerando um melhor valor para U_{n+1} .
- como por exemplo:

⇒ Método de Adams Preditor-Corrector de 3ª ordem

- Como **preditor** é usado o **Método de Adams-Bashforth de 3 passos**
- Como **corrector** é usado o **Método de Adams-Moulton de 2 passos**
- Assim:

u_0 é dado;

u_1 e u_2 são calculados por um método de passo simples;

e para $n = 2, 3, \dots$

$$u_{n+1}^* = u_n + \frac{h}{12} (23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{12} (5f(t_{n+1}, u_{n+1}^*) + 8f_n - f_{n-1})$$

⇒ Método de Adams Preditor-Corrector de 4ª ordem

- Como **preditor** é usado o **Método de Adams-Bashforth de 4 passos**
- Como **corrector** é usado o **Método de Adams-Moulton de 3 passos**
- Assim:

u_0 é dado;

u_1 , u_2 e u_3 são calculados por um método de passo simples;

e para $n = 3, 4, \dots$

$$u_{n+1}^* = u_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{24} (9f(t_{n+1}, u_{n+1}^*) + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$

- Esta combinação dos dois métodos é geralmente chamada **método de Adams-Bashforth-Moulton**, tal como no módulo **abm.m** do MATLAB:

(...)

for n=4:N

%Preditor

yp=Y(n)+(h/24)*(F*[-9 37 -59 55]');

F=[F(2) F(3) F(4) feval(f,T(n+1),yp)];

%Corrector

Y(n+1)=Y(n)+(h/24)*(F*[1 -5 19 9]');

F(4)=feval(f,T(n+1),Y(n+1));

end

A=[T' Y'];

- Seguindo uma abordagem do tipo Preditor – Corrector, várias **combinações de métodos** podem ser estabelecidas, como por exemplo,

O **método Preditor – Corrector Euler – Trapézio** onde,

- U_{n+1}^* é calculado pelo método de **Euler explícito**
- e utilizado pelo método **implícito do trapézio** (Crank-Nicolson)

Aproximando o integral

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t) dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt$$

pela regra do trapézio obtém-se

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) \approx \frac{h}{2} [f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) + f(t_n, y(t_n))],$$

onde $h = t_{n+1} - t_n$.

Considere um método preditor-corrector Euler-Trapézio, onde

u_{n+1}^* (passo preditor) se obtém pelo método de Euler e u_{n+1} (passo corrector) se obtém a partir da fórmula anterior, i.e.

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} (f_n + f_{n+1}), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

onde $u_n \approx y(t_n)$, $f_n \equiv f(t_n, u_n)$, $n = 0, 1, \dots$.

- facilmente se conclui,

$$\begin{aligned} u_{n+1}^* &= u_n + h f_n, \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{h}{2} [f_n + f(t_{n+1}, u_{n+1}^*)] \end{aligned}$$

- que corresponde ao **método de Heun**, por isso também chamado **método de Euler melhorado**.

* Os Métodos de Runge-Kutta (RK)

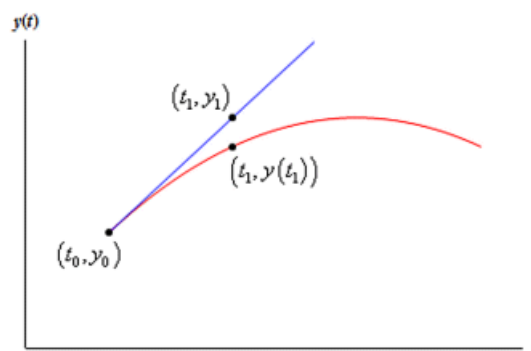
- Retomemos os métodos de **um só passo** e **explícitos**.
- Por exemplo o método de **Euler explícito** é muito simples, mas também muito pouco preciso. Para aumentar a precisão, ou **diminuímos a amplitude** do passo ou usamos métodos de **ordem mais elevada**.
- Mas, métodos de ordem mais elevada requerem o **cálculo de mais derivadas** (mais termos da série de Taylor).
- C. Runge e M.W. Kutta tentaram uma abordagem diferente.
- Consideremos um **caso particular** ...

⇒ RK4

- Pretendemos resolver:
$$\begin{cases} y' = f(t, y(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$
- Começemos por calcular,

$$K_1 = f(t_n, y_n)$$

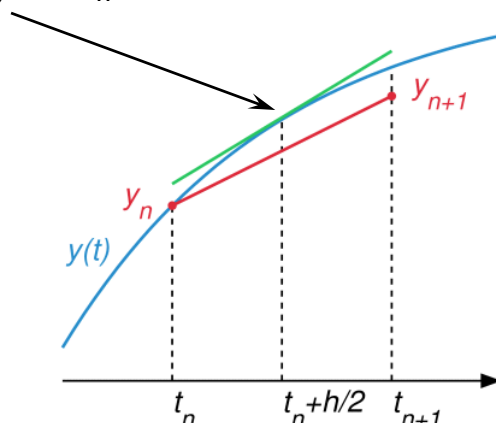
Como $y' = f(t, y(t))$, o valor de K_1 é o **declive** (da tangente à curva) em t_n , tal como no método de **Euler explícito**.



- Calculemos agora,

$$K_2 = f(t_n + \frac{1}{2} h, y_n + \frac{1}{2} h K_1)$$

Neste caso K_2 é o **declive** no **ponto médio** do intervalo, tal como no **método do ponto médio**, mas onde K_1 foi utilizado para determinar o valor de y em $t_n + \frac{1}{2} h$.



- Sendo K_2 uma aproximação melhor que K_1 , porque não continuar?
- Calculemos então também:

$$K_3 = f(t_n + \frac{1}{2} h, y_n + \frac{1}{2} h K_2)$$

Agora K_3 é o **declive** no **ponto médio** do intervalo, mas onde K_2 foi utilizado para determinar o valor de y em $t_n + \frac{1}{2} h$.

- E ainda,

$$K_4 = f(t_n + h, y_n + h K_3)$$

onde K_4 é o **declive** no **extremo direito** do intervalo $t_n + h$, com K_3 utilizado para determinar o respectivo valor de y .

- Por fim, calculamos uma **média dos 4 declives**, mas uma **média pesada** de modo a favorecer os valores interiores.

$$\text{declive} = (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) / 6$$

- Com este valor para o **declive** podemos estabelecer a relação,

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

que define o método de **método de Runge-Kutta de 4ª ordem**, também chamado **O Método de Runge-Kutta**,

onde,

$$K_1 = f_n,$$

$$K_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}K_1),$$

$$K_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}K_2),$$

$$K_4 = f(t_{n+1}, u_n + hK_3).$$

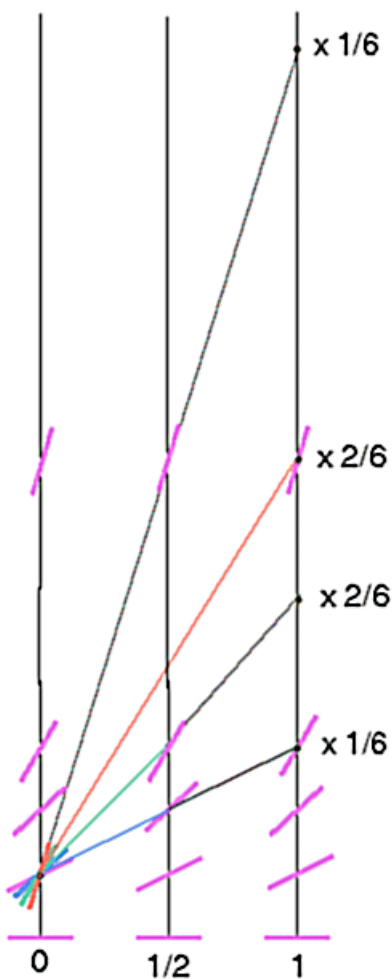
- Como mnemónica das constantes envolvidas nas fórmulas, costuma utilizar-se uma **tabela**,

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

- Vejamos por **exemplo** o PVI,

$$\begin{cases} y' = 2y \\ y(0) = \frac{1}{4} \end{cases}$$

e tentemos obter o valor de $y(1)$ com $h = 1$.



- $K_1 = f(t_n, y_n) = f(t_0, y_0) = 2 \cdot \frac{1}{4} = \frac{1}{2}$

declive da **recta azul** em $(0, \frac{1}{4})$

que encontra o ponto $(\frac{1}{2}, \frac{3}{4})$.

- $K_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}h K_1)$

$$= f(0 + \frac{1}{2}, \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2})$$

$$= 2 \cdot \frac{1}{2} = 1$$

declive da **recta verde** em $(0, \frac{1}{4})$

que encontra o ponto $(\frac{1}{2}, \frac{5}{4})$.

- $K_3 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}h K_2)$

$$= f(\frac{1}{2}, \frac{1}{4} + \frac{1}{2}) = \frac{3}{2}$$

declive da **recta laranja** em $(0, \frac{1}{4})$

que encontra o ponto $(\frac{1}{2}, \frac{7}{4})$.

- $K_4 = f(t_n + h, y_n + h K_3)$

$$= f(\frac{1}{2}, \frac{1}{4} + \frac{3}{2}) = \frac{7}{2}$$

declive da **recta preta** em $(0, \frac{1}{4})$

que encontra o ponto $(1, \frac{15}{4})$.

- Calculando a **média pesada** dos quatro declives,

$$\begin{aligned} & (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) / 6 = \\ & (1/2 + 2 + 2 \cdot 3/2 + 7/2) / 6 = 9/6 = 3/2 \end{aligned}$$

- e substituindo na **relação**,

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + h (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) / 6 \\ &= 1/4 + 3/2 = 7/4 = 1.75 \end{aligned}$$

- Como o valor exacto é $e^2/4 = 1.84726$ e considerando que foi efectuado apenas **um só passo** de amplitude $h=1$, concluímos que a aproximação obtida é bastante boa.
- Prova-se que o **RK4** é $O(h^5)$.

- Através do exemplo anterior, podemos ainda verificar que o mesmo resultado $y(1) = 1.75$ pode ser interpretado como a **média pesada** dos sucessivos **valores intermédios de y** calculados,

$$y(1/2) = 3/4$$

$$y(1/2) = 5/4$$

$$y(1/2) = 7/4$$

$$y(1) = 15/4$$

$$(3/4 + 2 \cdot 5/4 + 2 \cdot 7/4 + 15/4) / 6 = 1.75$$

⇒ **Algoritmo RK4 para calcular $y(b)$ com n passos**

{ Entrada: $f(t, y)$, a , b , $y_0 = y(a)$, n }

$h = b - a / n$

$t = a$

$y = y_0$

para i de 1 até n fazer

$k_1 = f(t, y)$

$k_2 = f(t + 0.5 h, y + 0.5 h k_1)$

$k_3 = f(t + 0.5 h, y + 0.5 h k_2)$

$k_4 = f(t + h, y + h k_3)$

$y = y + h (k_1 + 2 k_2 + 2 k_3 + k_4) / 6$

$t = t + h$

fimpara

{ Saída : $y = y(b)$ }

* Forma Geral dos Métodos de Runge-Kutta

- Vimos o caso do método de Runge-Kutta de **4 passos**, que tem 4 etapas (ou estágios) e é **explícito**. Contudo, os métodos desta classe podem ter um número diferente de etapas e ser explícitos, implícitos ou adaptativos.

- Um método de Runge-Kutta tem a forma,

$$u_{n+1} = u_n + h\mathcal{F}(t_n, u_n, h; f), \quad n \geq 0$$

onde a **função incremento** é definida por,

$$\mathcal{F}(t_n, u_n, h; f) = \sum_{i=1}^s b_i K_i$$

e com,

$$K_i = f\left(t_n + c_i h, u_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j\right)$$

$$i = 1, 2, \dots, s$$

onde S indica o **número de etapas** do método específico.

- Cada método** de Runge-Kutta é completamente caracterizado pelos valores dos **coeficientes** $\{a_{ij}\}$, $\{b_i\}$ e $\{c_i\}$.

- Esses **coeficientes** são geralmente apresentados numa tabela chamada **Quadro de Butcher**.

c_1	a_{11}	a_{12}	$\cdots$	a_{1s}
c_2	a_{21}	a_{22}	$\cdots$	a_{2s}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	a_{ss}
	b_1	b_2	$\cdots$	b_s

- Vamos considerar apenas os métodos onde,

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij} , \quad i = 1, 2, \dots, s$$

tal como no caso do exemplo anterior,

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

- Quando os coeficientes a_{ij} são **nulos** para $j \geq i$, cada K_i pode ser calculado em função dos $K_1, \dots, K_{i-1}$ anteriores e o método é **explícito**.

Caso contrário, o método é **implícito** e o cálculo dos K_i exige a resolução de um sistema não-linear.

Também existem esquemas **adaptativos**, do tipo predictor-corrector.

➔ **Métodos de Runge-Kutta de duas etapas ($s = 2$)**

- Consideremos um método de Runge-Kutta com $s = 2$, **explícito** e seja y_n uma solução exacta de partida.

Assim,

$$u_{n+1} = y_n + h (b_1 K_1 + b_2 K_2)$$

onde,

$$K_1 = f(t_n, y_n)$$

$$K_2 = f(t_n + hc_2, y_n + ha_{21}K_1)$$

- Como $a_{22} = 0$ e $c_2 = a_{21} + a_{22}$ temos $a_{21} = c_2$.
- Desenvolvendo K_2 em série de Taylor,

$$\begin{aligned} K_2 &= f(t_n, y_n) + hc_2 \frac{\partial f}{\partial t}(t_n, y_n) \\ &\quad + hc_2 K_1 \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n) + O(h^2) \end{aligned}$$

- Então,

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= y_n + hb_1 f(t_n, y_n) + hb_2 f(t_n, y_n) + \\ &\quad + h^2 b_2 c_2 \left[\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, y_n) + f(t_n, y_n) \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n) \right] \\ &\quad + O(h^3) \end{aligned}$$

$$= y_n + (b_1 + b_2) h f(t_n, y_n) + h^2 b_2 c_2 \left[\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, y_n) + f(t_n, y_n) \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n) \right]$$

- Por outro lado,

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h y'_n + \frac{h^2}{2} y''_n + O(h^3) \\ &= y_n + h f(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, y_n) + f(t_n, y_n) \frac{\partial f}{\partial y}(t_n, y_n) \right] \end{aligned}$$

- Onde podemos inferir que,

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_2 c_2 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

- Temos assim uma infinidade de soluções b_1 , b_2 , c_2 e portanto uma **infinidade de métodos de Runge-Kutta de 2 etapas**.

c_2	a_{21}
$b_1 \quad b_2$	

- Os mais utilizados são:

⇒ **O método de Euler Modificado**

$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$
	0	1

⇒ **O método do Ponto Médio**

1		1
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

➡ **Métodos de Runge-Kutta de três etapas ($s = 3$)**

- De forma análoga se pode estabelecer,

$$K_1 = f(t_n, u_n)$$

$$K_2 = f(t_n + c_2 h, u_n + h a_{21} K_1)$$

$$K_3 = f(t_n + c_3 h, u_n + h a_{31} K_1 + h a_{32} K_2)$$

$$u_{n+1} = u_n + h (b_1 K_1 + b_2 K_2 + b_3 K_3)$$

- em função de valores estabelecidos para os coeficientes,

c_2	a_{21}	
c_3	a_{31}	a_{32}
	b_1	$b_2 \quad b_3$

➡ **Métodos de Runge-Kutta de quatro etapas ($s = 4$)**

- Do mesmo modo,

$$K_1 = f(t_n, u_n)$$

$$K_2 = f(t_n + c_2 h, u_n + h a_{21} K_1)$$

$$K_3 = f(t_n + c_3 h, u_n + h a_{31} K_1 + h a_{32} K_2)$$

$$K_4 = f(t_n + c_4 h, u_n + h a_{41} K_1 + h a_{42} K_2 + h a_{43} K_3)$$

$$u_{n+1} = u_n + h (b_1 K_1 + b_2 K_2 + b_3 K_3 + b_4 K_4)$$

- com,

c_2	a_{21}			
c_3	a_{31}	a_{32}		
c_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}	
	b_1	b_2	b_3	b_4

- sendo **RK4** o mais utilizado, por isso chamado **O Método de Runge-Kutta**,

$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{1}{6}$