

João Alexandre Thomas

**Sobre Métodos Numéricos para Problemas
de Valor Inicial não - Stiff: O Controle
do erro e uma Avaliação de Desempenho**



1910000860



**SOBRE MÉTODOS NUMÉRICOS PARA PROBLEMAS
DE VALOR INICIAL NÃO-STIFF: O CONTROLE DO
ERRO E UMA AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO**

JOÃO ALEXANDRE THOMAZ

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP-040

unesp 
UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
CÂMPUS DE SÃO JOSÉ DO RIO PRETO

**SOBRE MÉTODOS NUMÉRICOS PARA
PROBLEMAS DE VALOR INICIAL
NÃO-STIFF: O CONTROLE DO
ERRO E UMA AVALIAÇÃO
DE DESEMPENHO**

JOÃO ALEXANDRE THOMAZ

Orientador: Prof. Dr. Sebastião Pereira Martins



Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências, Letras e Ciências
Exatas da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho",
câmpus de São José do Rio Preto, para a obtenção
do título de mestre em Matemática Aplicada.

São José do Rio Preto - SP, fevereiro de 1999



À minha família,
à minha noiva,
por todo o apoio,
dedico.

Agradecimentos

De forma especial, ao professor Sebastião Pereira Martins pela orientação, paciência e dedicação, possibilitando-me a oportunidade de realizar este trabalho.

Aos funcionários, amigos, colegas do curso de graduação e pós-graduação e a todos os professores do DCCE, que de alguma forma contribuíram para a minha formação.

Aos meus pais e irmãos, que acreditaram sempre na conclusão deste trabalho, incentivando e apoiando minhas decisões.

À minha noiva, amiga e colega do curso de mestrado, Vanessa Facina, que por estar sempre ao meu lado, digo que conquistamos juntos mais uma etapa de nossa vida pessoal e profissional.

À FAPESP pelo auxílio financeiro, indispensável para a dedicação exclusiva ao trabalho e à CAPES pela contribuição dada ao programa de mestrado.

A Deus, por tudo.

Resumo

Neste trabalho, apresentaremos algumas classes de métodos numéricos, voltados para a resolução de problemas de valor inicial não-stiff, dentre os quais estão os métodos de Runge-Kutta, algumas variantes dos mesmos e o método GBS com extrapolação polinomial e racional.

Para cada classe desses métodos, desenvolveremos um breve estudo dos principais conceitos teóricos e de estratégias para controle do erro de truncamento local. Finalmente, apresentaremos resultados numéricos de um estudo comparativo de desempenho de métodos dessas classes, por nós realizado.

Abstract

In this paper, we will present some classes of numerical methods, turned to the resolution of non-stiff initial value problems, such as: Runge-Kutta methods, some variants of the same ones and the GBS method with polynomial and rational extrapolation.

For each class of those methods, we will develop a brief study of the main theoretical concepts and of strategies for control of the local truncation error. Finally, we will present numerical results of a comparative study on the performance of methods of those classes, carried out by us.

ÍNDICE

Introdução **01**

1 Métodos de Runge-Kutta **03**

- 1.1 Introdução03
- 1.2 A classe dos métodos04
- 1.3 Conceitos qualitativos05
- 1.4 Condições de ordem06
- 1.5 Alguns métodos de Runge-Kutta explícitos11
- 1.6 O controle do erro de truncamento12

2 Algumas variantes dos métodos de Runge-Kutta **16**

- 2.1 Introdução16
- 2.2 Preliminares17
- 2.3 A média geométrica das derivadas (Método MG)17
- 2.4 Estratégia para o controle do erro em problemas do tipo $y' = Ay$,
através do método MG22
- 2.5 A média harmônica das derivadas (Método MH)24
- 2.6 A média contra-harmônica das derivadas (Método MCH)27
- 2.7 Estratégia para o controle do erro de truncamento local através do
método MCH30

3	Métodos de extrapolação para a resolução de pvi 's	33
3.1	Introdução	33
3.2	Preliminares	34
3.3	A extrapolação	35
3.4	O método GBS	41
4	Integração a passo fixo: resultados numéricos	44
4.1	Introdução	44
4.2	Os métodos	45
4.3	Resultados numéricos	46
4.4	Considerações	50
5	Integração a passo variável: resultados numéricos	54
5.1	Introdução	54
5.2	Integração a passo variável	55
5.3	Alguns problemas para teste	56
6	Resolução de problemas com saída densa	68
6.1	Introdução	68
6.2	O problema com saída densa	69
6.3	Considerações	71
6.4	O método de Horn	72
6.5	Exemplo	76
	Considerações finais	80
	Referências bibliográficas	84



INTRODUÇÃO

As equações diferenciais ordinárias constituem-se num importante modelo matemático para a descrição de muitos problemas do mundo real, em especial aqueles que descrevem quantitativamente fenômenos físicos, químicos ou biológicos.

A associação à equação diferencial de uma condição inicial define o que na literatura denomina-se “problema de valor inicial” ou simplesmente pvi.

Uma vez demonstrada a existência e unicidade da solução do pvi, mas constatada a dificuldade matemática em determiná-la, torna-se relevante a integração numérica, através de métodos que forneçam uma aproximação discretizada para a solução exata em seu intervalo de existência.

Nas últimas décadas, principalmente devido a facilidade de acesso aos microcomputadores, os métodos de Runge-Kutta tem se caracterizado como uma ferramenta importante e muito utilizada para a resolução numérica de problemas de valor inicial, tanto para problemas não-stiff como para os stiff.

Neste trabalho vamos considerar a resolução numérica de problemas não-stiff.

Para integração numérica desses problemas os métodos de Runge-Kutta explícitos são utilizados com êxito, em especial aqueles que permitem estimar de forma eficiente o erro de truncamento local, o que nos permite variar de forma otimizada o tamanho do passo de integração.

Apresentaremos também algumas técnicas mais recentes que permitem integrar numericamente pvi's não-stiff, conhecidas como variantes dos métodos de Runge-Kutta, pois consideram a substituição da média aritmética das derivadas por outros tipos de médias.

Uma outra opção interessante para a integração numérica consiste em utilizar métodos de discretização que possuem uma expansão assintótica em potências pares de h (tamanho do passo de integração), constituindo os chamados métodos de extrapolação. Bulirsch e Stoer [03] mostraram a utilização das interpolações polinomial e racional, associadas à utilização da estratégia de Gragg [15], gerando o denominado método GBS.

Investigaremos também a aplicação de métodos numéricos em problemas que apresentam características especiais, por exemplo, com saída densa da solução, entre outros.

Os principais objetivos desta dissertação são, apresentar os conceitos estudados, os resultados obtidos e nossas conclusões de forma organizada, numa mesma linguagem e notação, a fim de tornarmos mais simples o entendimento dos assuntos expostos, para que esta possa ser considerada como uma fonte de consulta organizada, clara e objetiva por outros estudantes interessados no tema.

Para isto, este trabalho foi organizado em capítulos, sendo que no capítulo 1, apresentamos os principais conceitos qualitativos e resultados, relacionados com a classe dos métodos de Runge-Kutta.

No capítulo 2, procuramos desenvolver os passos necessários para a obtenção das variantes dos métodos de Runge-Kutta e suas possíveis aplicações.

Apresentamos, no capítulo 3, a técnica de extrapolação associada a métodos lineares de passo múltiplo, conforme proposto por Bulirsch e Stoer, bem como a estratégia de Gragg, gerando o algoritmo numérico conhecido como método GBS.

Finalmente, procuramos desenvolver nos capítulos 4,5 e 6 uma avaliação computacional comparativa entre os métodos estudados ao longo do trabalho, quando consideram-se integração a passo fixo, variável e também a resolução de problemas com saída densa. Também apresentamos no capítulo 6, o método de Horn [18], que é uma ferramenta disponível e bastante indicada para a resolução de problemas com saída densa.



CAPÍTULO 1

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

1.1 Introdução

Os métodos de Runge-Kutta constituem-se hoje, principalmente em função do considerável avanço tecnológico dos microcomputadores, numa classe importante e eficiente de métodos numéricos na busca de aproximações para a solução exata de problemas de valor inicial (pvi).

Neste capítulo, introduziremos essa classe de métodos para os quais definiremos alguns conceitos básicos. Como estamos interessados na resolução de problemas não-stiff vamos considerar a classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos e apresentar suas condições de ordem até a ordem 5. Como ilustração apresentaremos alguns métodos frequentemente encontrados na literatura.

Para finalizar apresentaremos algumas técnicas para o controle do erro de truncamento local e os métodos de Runge-Kutta embutidos.

1.2 A classe dos métodos

Para a resolução numérica de um problema de valor inicial (pvi) do tipo

{ y' = f(x, y)
y(x_0) = y_0 , (1.1)

onde f:[a,b]xR^n -> R^n , tal que por hipótese assumimos garantida a existência e unicidade da solução y(x), podemos considerar métodos numéricos como os que a seguir definimos.

Apenas para simplificar as notações, mas sem perda de generalidade para os resultados teóricos que serão apresentados, no que segue vamos assumir que f:[a,b]xR -> R.

Definição 1.1 – Denominamos método de Runge-Kutta com s estágios ao algoritmo numérico para a obtenção de aproximações para a solução exata do pvi definido por:

y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i (1.2a)

k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), i = 1(1)s (1.2b)

onde os coeficientes a_{ij}, c_i, b_i são valores constantes que caracterizam o método.

Vamos considerar como hipótese válida a condição:

c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, i = 1(1)s. (1.3)

Para representar os coeficientes de um método de Runge-Kutta podemos utilizar a seguinte representação proposta por Butcher:

Table with 5 columns: c_i, a_{ij}, a_{12}, ..., a_{1s}, a_{21}, a_{22}, ..., a_{2s}, ..., a_{s1}, a_{s2}, ..., a_{ss}, b_1, b_2, ..., b_s. (1.4)

ou seja,

$$\left. \begin{array}{c} c \\ \hline b^T \end{array} \right| A, \text{ onde } c = (c_1 \ c_2 \ \dots \ c_s)^T, \ A = (a_{ij})_{s \times s} \text{ e } b^T = (b_1 \ b_2 \ \dots \ b_s).$$

Considerando-se a nulidade ou não de elementos da matriz $A = (a_{ij})_{s \times s}$, podemos dividir a classe dos métodos de Runge-Kutta em:

- explícitos, se $a_{ij} = 0$ para todo $i \leq j$, isto é, a matriz A é estritamente triangular inferior;
- implícitos, se $a_{ij} \neq 0$ para pelo menos algum $i \leq j$.

Uma particular sub-classe dos implícitos, é quando $a_{ij} = 0$ para todo $i < j$ mas pelo menos algum elemento da diagonal da matriz A é não nulo, isto é, existe pelo menos um coeficiente $a_{ii} \neq 0$. Os métodos dessa sub-classe são conhecidos como semi-implícitos.

Para cada matriz A , vetor b e vetor c temos um particular método de Runge-Kutta, assim cada escolha desses elementos nos leva a um aproximante para a solução exata do problema de valor inicial. Logo, podemos comparar esses aproximantes quanto à precisão com que representam a solução exata.

Cabe aqui registrar que como estamos interessados na resolução de pvi's não stiff, a partir deste momento vamos considerar sempre a classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos.

1.3 Conceitos qualitativos

Definição 1.2 – Denominamos **erro de truncamento local** de um método de Runge-Kutta com s estágios, num ponto x_{n+1} , ao valor T_{n+1} determinado por:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \left[y(x_n) + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \right] \quad (1.5)$$

onde as derivadas k_i também são obtidas utilizando-se a solução exata $y(x_n)$ em lugar de y_n .

Se ao utilizarmos um método de Runge-Kutta considerarmos a hipótese local $y_n = y(x_n)$ e anotarmos por $\tilde{y}_{n+1}$ a aproximação obtida, podemos constatar que $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1}$.

Expandindo-se $y(x_{n+1})$ e $\tilde{y}_{n+1}$ em série de Taylor na vizinhança do ponto x_n , podemos expressar T_{n+1} em potências de h , ou seja

$$T_{n+1} = U_1 h + U_2 h^2 + U_3 h^3 + \dots + U_{p+1} h^{p+1} + \dots \quad (1.6)$$

onde os U_i 's são expressões que envolvem os coeficientes do método multiplicadas por derivadas parciais da função $f(x, y)$.

Definição 1.3 – Dizemos que o método de Runge-Kutta tem **ordem de consistência** p se sob a hipótese local $y_n = y(x_n)$ obtivermos que $T_{n+1} = O(h^{p+1})$.

A primeira parcela de T_{n+1} , isto é, a que acompanha h^{p+1} , é denominada parte principal do erro de truncamento local.

Obviamente, para que o método tenha ordem p , devemos ter em T_{n+1} a nulidade, em cada U_i , das expressões envolvendo os coeficientes do método que acompanham as potências de h até h^p . Ou seja, teremos um sistema de equações onde cada solução nos fornece um método de Runge-Kutta com ordem p .

As equações desse sistema são denominadas **condições de ordem**.

1.4 Condições de ordem

Como ilustração, desse conceito vamos construir as condições de ordem para um método de Runge-Kutta com $s = 2$ estágios e ordem $p = 2$.

Temos que:

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} h k_1) = f(x_n + c_2 h, y_n + c_2 h k_1)$$

Considerando a hipótese local $y_n = y(x_n)$, temos que $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1}$ será dado por:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - [y(x_n) + h(b_1 k_1 + b_2 k_2)]$$

onde k_1 e k_2 também são obtidas utilizando-se a solução exata $y(x_n)$ em lugar de y_n .

Expandindo $y(x_{n+1})$ e $\tilde{y}_{n+1}$ em série de Taylor na vizinhança do ponto x_n , podemos expressar T_{n+1} em potências de h . Vejamos:

$$\square \quad y(x_{n+1}) = y(x_n) + h y^{(1)}(x_n) + \frac{h^2}{2!} y^{(2)}(x_n) + O(h^3) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2} [f_x + ff_y] + O(h^3);$$

$$\square \quad k_1 = f,$$

$$k_2 = f + h c_2 [f_x + k_1 f_y] + \frac{1}{2} h^2 c_2^2 [f_{xx} + 2k_1 f_{xy} + k_1^2 f_{yy}] + O(h^3),$$

assim

$$\tilde{y}_{n+1} = y(x_n) + h(b_1 + b_2)f + h^2 b_2 c_2 (f_x + ff_y) + O(h^3).$$

Dai

$$T_{n+1} = [1 - (b_1 + b_2)]fh + \left[\frac{1}{2} - b_2 c_2 \right] (f_x + ff_y)h^2 + O(h^3)$$

Consequentemente um método de Runge-Kutta com $s = 2$ estágios terá ordem $p = 2$ se:

$$b_1 + b_2 = 1$$

$$b_2 c_2 = \frac{1}{2}.$$

Desse exemplo, podemos concluir que a obtenção de métodos com uma determinada ordem depende do número de estágios considerado. Obviamente, pensando em minimizar o esforço computacional, devemos considerar o número mínimo de estágios.

Conforme pode ser visto em Lambert [20] e Butcher [04], para $p \leq 4$ é possível construirmos métodos de Runge-Kutta explícitos com $s = p$ estágios.

Para $p \geq 5$ essa relação não é mais possível. Um resultado que relaciona o número mínimo de estágios para que se atinja uma certa ordem é dada pela tabela:

Ordem (p)	Número de estágios (s)
5	6
6	7
7	9
8	11
9	$12 \leq s \leq 17$
10	$13 \leq s \leq 17$

A seguir relacionaremos as condições de ordem para métodos de Runge-Kutta explícitos com ordem $p \leq 5$, considerando-se o número mínimo de estágios necessários para atingir a ordem desejada.

Para que se tenha garantia de ordem $p = 1$ basta considerarmos $s = 1$ estágio. Nesse caso a matriz de Butcher será:

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & b_1 \end{array}$$

e uma única condição de ordem:

$$b_1 = 1.$$

Para que se alcance ordem $p = 2$ devemos considerar pelo menos $s = 2$ estágios, portanto a matriz de Butcher, será:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ c_2 & a_{21} & 0 \\ \hline & b_1 & b_2 \end{array} \quad a_{21} = c_2$$

e as condições de ordem:

$$b_1 + b_2 = 1,$$
$$b_2 c_2 = \frac{1}{2}.$$

Para que se atinja ordem $p = 3$ o número mínimo de estágios deverá ser $s = 3$, consequentemente a matriz de Butcher será:

0		0	0	0
c_2		a_{21}	0	0
c_3		a_{31}	a_{32}	0
		b_1	b_2	b_3

$a_{21} = c_2$
 $a_{31} + a_{32} = c_3$

e as condições de ordem:

$b_1 + b_2 + b_3 = 1,$

$b_2c_2 + b_3c_3 = \frac{1}{2},$

$b_2c_2^2 + b_3c_3^2 = \frac{1}{3},$

$b_3c_2a_{32} = \frac{1}{6}.$

Para que se alcance ordem $p = 4$ devemos considerar pelo menos $s = 4$ estágios, portanto a matriz de Butcher, será:

0		0	0	0	0
c_2		a_{21}	0	0	0
c_3		a_{31}	a_{32}	0	0
c_4		a_{41}	a_{42}	a_{43}	0
		b_1	b_2	b_3	b_4

$a_{21} = c_2$
 $a_{31} + a_{32} = c_3$
 $a_{41} + a_{42} + a_{43} = c_4$

e as condições de ordem:

$\sum_i b_i = 1,$

$\sum_i b_i c_i^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1(1)3,$

$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6},$

$\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8},$

$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12},$

$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}.$

Finalmente, para atingir ordem $p = 5$ devemos considerar $s = 6$ estágios.

Nesse caso a matriz de Butcher será

0	0	0	0	0	0	0
c_2	a_{21}	0	0	0	0	0
c_3	a_{31}	a_{32}	0	0	0	0
c_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}	0	0	0
c_5	a_{51}	a_{52}	a_{53}	a_{54}	0	0
c_6	a_{61}	a_{62}	a_{63}	a_{64}	a_{65}	0
	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	b_6

$$a_{21} = c_2$$

$$a_{31} + a_{32} = c_3$$

$$a_{41} + a_{42} + a_{43} = c_4$$

$$a_{51} + a_{52} + a_{53} + a_{54} = c_5$$

$$a_{61} + a_{62} + a_{63} + a_{64} + a_{65} = c_6$$

e as condições de ordem:

$$\sum_i b_i = 1,$$

$$\sum_i b_i c_i^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1(1)4,$$

$$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6},$$

$$\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8},$$

$$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12},$$

$$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24},$$

$$\sum_{i,j} b_i c_i^2 a_{ij} c_j = \frac{1}{10},$$

$$\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{15},$$

$$\sum_{i,j,k} b_i c_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{30},$$

$$\sum_i b_i (\sum_j a_{ij} c_j)^2 = \frac{1}{20},$$

$$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^3 = \frac{1}{20},$$

$$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} c_j a_{jk} c_k = \frac{1}{40},$$

$$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k^2 = \frac{1}{60},$$

$$\sum_{i,j,k,m} b_i a_{ij} a_{jk} a_{km} c_m = \frac{1}{120}.$$

1.5 Alguns métodos de Runge-Kutta explícitos

A seguir apresentaremos a representação de Butcher de alguns métodos de Runge-Kutta explícitos, frequentemente encontrados na literatura:

- ❑ Método de Euler:

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

- ❑ Método de Euler Melhorado (ordem 2):

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

- ❑ Método de Euler Modificado (ordem 2):

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

- ❑ Método de Heun (ordem 3):

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

- ❑ Método de Runge-Kutta Clássico (ordem 4):

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

1.6 O controle do erro de truncamento

Na resolução numérica de um problema de valor inicial (pvi) do tipo

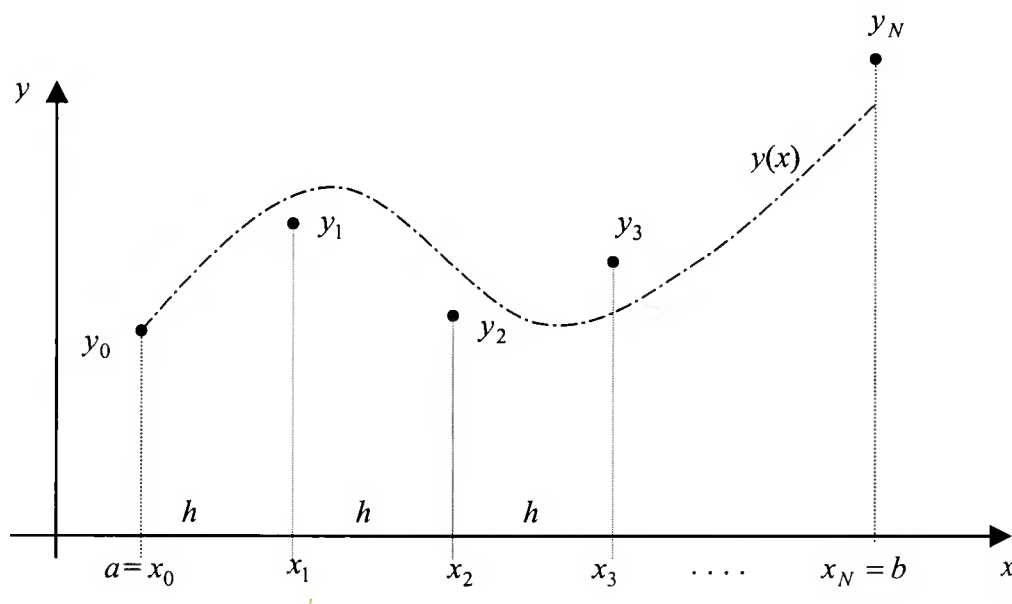
$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

num certo intervalo $[a, b]$ podemos considerar duas situações. Trabalhar com o tamanho do passo de integração fixo, ou então, considerar o tamanho do passo variável.

Quando o passo de integração é fixo, o intervalo $[a, b]$ é discretizado em pontos

$$x_n = x_0 + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N, \quad \text{com } h = \frac{b-a}{N}, \quad x_0 = a \text{ e } x_N = b.$$

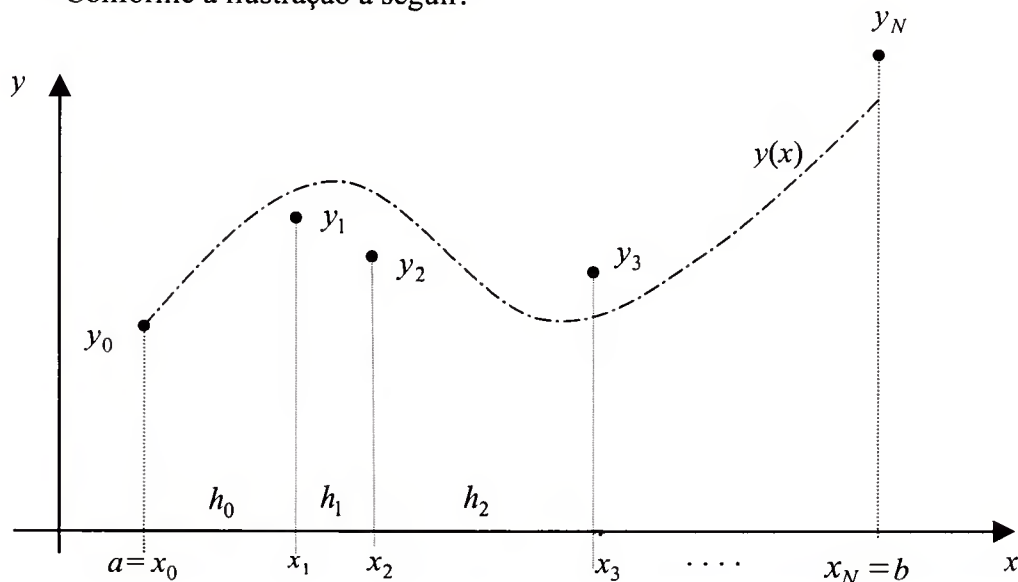
Daí, através de um método numérico adequado, neste caso os métodos de Runge-Kutta, avançamos de a para b , com um passo de integração de tamanho h , gerando em cada ponto x_n uma aproximação y_n para a solução exata $y(x)$, conforme mostra a ilustração a seguir.



No entanto, se o tamanho do passo de integração for variável, o intervalo $[a, b]$ vai sendo discretizado à medida que o passo de integração avança, através da aplicação do método numérico, podendo considerar a cada passo um tamanho h_n diferente, o que possibilita trabalhar com um “passo de tamanho ótimo” a cada integração.

Isto é, para $x_0 = a$ e dado um passo inicial de tamanho h_0 , temos que $x_{n+1} = x_n + h_n$ com $h_n = \alpha_i h_n^{(i)}$, para $n = 1, 2, \dots, N$, onde $h_n^{(1)} = h_{n-1}$ e $h_n^{(i)} = \alpha_{i-1} h_n^{(i-1)}$ para $i = 2, 3, \dots, m(n)$. O parâmetro α_m e o passo de tamanho $h_n^{(m)}$ são valores para os quais a precisão é alcançada.

Conforme a ilustração a seguir:



Os valores α_n 's, serão sempre positivos e maiores ou menores do que 1, dependendo da estimativa do erro de truncamento em cada ponto.

Assim, precisamos dispor de uma ferramenta eficiente para obter a estimativa do erro a cada passo. Para o controle do erro de truncamento local da classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos, alguns caminhos tem sido investigados nas últimas décadas.

Uma técnica bastante antiga e que pode ser considerada para qualquer método numérico é a da extrapolação de Richardson, que consiste em gerarmos duas aproximações para $y(x)$ em um mesmo ponto x_{n+1} , utilizando um mesmo método de ordem p , mas com passo h e $2h$ respectivamente. A diferença dessas duas aproximações dividida por $(2^{p+1} - 1)$ é uma boa aproximação para a parte principal do erro de truncamento local e portanto pode ser usada com sucesso para se estimar o erro e consequentemente monitorar o tamanho do passo de integração, permitindo assim uma tomada de decisão quanto ao seu crescimento ou não para a próxima integração. A grande desvantagem dessa técnica ao utilizarmos um método de Runge-Kutta, está no considerável aumento do esforço computacional, pois a cada passo de integração utilizamos duas vezes o mesmo método.

Outra técnica bastante eficiente para o controle do erro de truncamento local é aquela que considera dois métodos de Runge-Kutta, um com s_0 estágios e ordem p e o outro com s_1 estágios e ordem $p+1$.

Assim, o erro de truncamento local de cada um desses métodos será respectivamente:

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ T_{n+1}^* &= \varphi^*(x_n, y(x_n))h^{p+2} + O(h^{p+3}) \end{aligned}$$

Portanto:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^* - y_{n+1} &= T_{n+1} - T_{n+1}^* = \\ &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) - \varphi^*(x_n, y(x_n))h^{p+2} + O(h^{p+3}) = \\ &= \varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2}) \end{aligned}$$

Consequentemente podemos considerar $\|y_{n+1} - y_{n+1}^*\|$ como uma estimativa para a parte principal $\varphi(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ do erro de truncamento local da aproximação gerada através do método de ordem p . Ou seja:

$$T_{n+1} \cong \|y_{n+1} - y_{n+1}^*\| \tag{1.7}$$

Além da eficiência, essa idéia permite minimizar bastante o esforço computacional se as derivadas calculadas para o método de ordem menor puderem ser utilizadas para o método de ordem maior. Isto é, o par de métodos considerado for do tipo embutido.

Um par de métodos de Runge-Kutta explícitos embutidos pode ser representado através da matriz de Butcher da seguinte maneira:

0						
c_2		a_{21}				
c_3		a_{31}	a_{32}			
$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$			
c_s		a_{s1}	a_{s2}	a_{s3}	$\cdots$	$a_{s,s-1}$
		b_1	b_2	b_3	$\cdots$	b_{s-1}
		b_1^*	b_2^*	b_3^*	$\cdots$	b_{s-1}^*

$$\tag{1.8}$$

	b_s	b_s^*
--	-------	---------

ou seja,

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \\ & (b^*)^T \end{array}$$

onde:

- c, A e b^T definem o método de ordem p ;
- c, A e $(b^*)^T$ definem o método de ordem $p+1$.

Fehlberg [11] e [12] propôs um par de métodos embutidos, com $s = 6$ estágios e ordens $p = 4$ e $p + 1 = 5$ respectivamente, conhecido como par RKF(4,5), que tem como coeficientes:

0						
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	
	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$-\frac{1}{5}$	0
	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$

(1.9)

Outros pares de métodos de Runge-Kutta embutidos bastante conhecidos, são por exemplo os de Dormand e Prince [05] e [22], England [06] e os de Sharp [29].

CAPÍTULO 2

ALGUMAS VARIANTES DOS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

2.1 Introdução

O objetivo deste capítulo é mostrar como alguns autores, Evans [08], Sanugi e Evans [24] e Evans e Yaakub [09], exploraram a partir de um método básico de Runge-Kutta, diferentes combinações de suas derivadas, gerando novos métodos.

Também vamos construir as condições de ordem até a ordem 4 para cada uma das classes desses métodos apresentados. Além disso, mostraremos algumas estratégias para o controle do erro de truncamento local, que utilizam essas variantes dos métodos de Runge-Kutta como ferramenta.

2.2 Preliminares

Na classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos com ordem p e s estágios, encontramos métodos que permitem reescrever a aproximação $y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i$, na forma:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{\alpha} \left(\frac{k_1 + k_2}{2} + \frac{k_2 + k_3}{2} + \dots + \frac{k_{s-1} + k_s}{2} \right), \quad (2.1)$$

isto é, podemos combinar duas a duas as derivadas, considerando a média aritmética das mesmas, onde α é um valor constante adequado.

D. J. Evans [08], B. B. Sanugi e D. J. Evans [24], e D. J. Evans e A. R. Yaakub [09] investigaram a possibilidade da substituição nos métodos de Runge-Kutta da média aritmética (MA) das derivadas $f(x, y)$ por outras médias das mesmas derivadas, tais como, a geométrica (MG), a harmônica (MH) e a contra-harmônica (MCH), onde, como sabemos:

- $MA = \frac{A + B}{2};$
- $MG = \sqrt{AB};$
- $MH = \frac{(MG)^2}{AM} = \frac{2AB}{A + B};$
- $MCH = \frac{2(AM)^2 - (MG)^2}{AM} = \frac{A^2 + B^2}{A + B}.$

2.3 A média geométrica das derivadas (Método MG)

A busca das condições de ordem para os métodos que vamos apresentar neste capítulo é algo bastante trabalhoso sob o ponto de vista matemático. Afim de minimizar esse esforço vamos considerar o pvi escrito em sua forma autônoma, ou seja, em lugar de (1.1) vamos escrevê-lo como:

$$\begin{cases} y' = f(y(x)) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Isto não tornará a aplicação das condições de ordem algo restritivo, pois sempre é possível reescrevermos um pvi dado em sua forma geral $y' = f(x, y)$ em sua formulação autônoma correspondente.

Consideremos o método de Runge-Kutta explícito de ordem 4 e com 4 estágios, definido por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (2.3a)$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_n) \\ k_2 &= f(y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 &= f(y_n + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 &= f(y_n + hk_3) \end{aligned} \quad (2.3b)$$

Observe que a expressão (2.3a) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \left(\frac{k_1 + k_2}{2} + \frac{k_2 + k_3}{2} + \frac{k_3 + k_4}{2} \right) \quad (2.4)$$

Substituindo as médias aritméticas das derivadas, por suas respectivas médias geométricas, ou seja,

$$\frac{k_{i-1} + k_i}{2} \rightarrow \sqrt{k_{i-1} k_i}$$

obtemos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} (\sqrt{k_1 k_2} + \sqrt{k_2 k_3} + \sqrt{k_3 k_4}) \quad (2.5)$$

Analisando a ordem de consistência da aproximação gerada por (2.5), conforme Evans [08], pode ser constatado que para os k_i 's definidos em (2.3b) o novo

método apresenta apenas ordem 2, o que nos leva a concluir que na representação (2.5) as derivadas k_i 's não são determinadas em pontos convenientes, pois não conseguimos alcançar a mesma ordem 4 do método inicial.

Investigando essa questão Evans procurou encontrar os pontos onde os k_i 's, $i = 1(1)4$, dados por

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_n) \\ k_2 &= f(y_n + ha_{21}k_1) \\ k_3 &= f(y_n + h(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)) \\ k_4 &= f(y_n + h(a_{41}k_1 + a_{42}k_2 + a_{43}k_3)) \end{aligned} \tag{2.6}$$

pudessem nos levar a um método da forma (2.5) que tivesse ordem 4. Utilizando o software MATHEMATICA desenvolvemos os passos necessários para encontrar os novos coeficientes do método, proposto por Evans.

Conforme visto nas seções 1.3 e 1.4, para determinar tais coeficientes primeiramente encontramos a expressão do erro de truncamento local e em seguida as condições de ordem. No caso do método da média geométrica temos:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} = y(x_{n+1}) - \left[y(x_n) + \frac{h}{3} (\sqrt{k_1 k_2} + \sqrt{k_2 k_3} + \sqrt{k_3 k_4}) \right]$$

onde as derivadas k_1 , k_2 , k_3 e k_4 também são obtidas utilizando-se a solução exata $y(x_n)$ em lugar de y_n .

Podemos escrever a expressão T_{n+1} em potências de h , e assim estabelecer as condições para que os coeficientes de tais potências sejam nulos até h^4 , pois queremos que o método tenha ordem 4. Efetuando o desenvolvimento em série de Taylor de $y(x_{n+1})$ numa vizinhança do ponto x_n , temos que:

$$\begin{aligned}
 y(x_{n+1}) &= y(x_n) + hy^{(1)}(x_n) + \frac{h^2}{2!} y^{(2)}(x_n) + \frac{h^3}{3!} y^{(3)}(x_n) + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_n) + O(h^5) \Rightarrow \\
 \Rightarrow y(x_{n+1}) &= y + hf + \frac{1}{2} h^2 ff_y + \frac{1}{6} h^3 (ff_y^2 + f^2 f_{yy}) + \frac{1}{24} h^4 (ff_y^3 + 4f^2 f_y f_{yy} + \\
 &\quad + f^3 f_{yyy}) + O(h^5)
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Além disso, considerando $s_1 = a_{31} + a_{32}$ e $s_2 = a_{41} + a_{42} + a_{43}$ temos os seguintes desenvolvimentos para k_1, k_2, k_3 e k_4 :

$$k_1 = f \tag{2.8a}$$

$$k_2 = f + a_{21} h f f_y + \frac{1}{2} a_{21}^2 h^2 f^2 f_{yy} + \frac{1}{6} a_{21}^3 h^3 f^3 f_{yyy} + O(h^4) \tag{2.8b}$$

$$\begin{aligned}
 k_3 = f + h s_1 f f_y + h^2 \left(a_{21} a_{32} f f_y^2 + \frac{1}{2} s_1^2 f^2 f_{yy} \right) + h^3 \left(\frac{1}{2} a_{21} a_{32} (a_{21} + 2s_1) f^2 f_y f_{yy} + \right. \\
 \left. + \frac{1}{6} s_1^3 f^3 f_{yyy} \right) + O(h^4)
 \end{aligned} \tag{2.8c}$$

$$\begin{aligned}
 k_4 = f + h s_2 f f_y + h^2 \left((a_{21} a_{42} + a_{43} s_1) f f_y^2 + \frac{1}{2} s_2^2 f^2 f_{yy} \right) + h^3 \left(a_{21} a_{32} a_{43} f f_y^3 + \frac{1}{2} (a_{21}^2 a_{42} + \right. \\
 \left. + a_{43} s_1^2 + 2a_{21} a_{42} s_2 + 2a_{43} s_1 s_2) f^2 f_y f_{yy} + \frac{1}{6} s_2^3 f^3 f_{yyy} \right) + O(h^4)
 \end{aligned} \tag{2.8d}$$

Logo, as expansões em série de Taylor das raízes quadradas de $k_1 k_2$, $k_2 k_3$ e $k_3 k_4$ na vizinhança do ponto x_n , são:

$$\begin{aligned}
 \sqrt{k_1 k_2} = f + \frac{1}{2} a_{21} h f f_y + h^2 \left(-\frac{1}{8} a_{21}^2 f f_y^2 + \frac{1}{4} a_{21}^2 f^2 f_{yy} \right) + h^3 \left(\frac{1}{16} a_{21}^3 f f_y^3 - \frac{1}{8} a_{21}^3 f^2 f_y f_{yy} + \right. \\
 \left. + \frac{1}{12} a_{21}^3 f^3 f_{yyy} \right) + O(h^4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sqrt{k_2 k_3} = f + \frac{1}{2} h (a_{21} + s_1) f f_y + h^2 \left(\frac{1}{8} (-a_{21}^2 - s_1^2 + 2a_{21} (2a_{32} + s_1)) f f_y^2 + \frac{1}{4} (a_{21}^2 + \right. \\
 \left. + s_1^2) f^2 f_{yy} \right) + h^3 \left(\frac{1}{16} (a_{21} - s_1) (a_{21}^2 + 4a_{21} a_{32} - s_1^2) f f_y^3 + \frac{1}{8} (-a_{21}^3 + 2a_{21}^2 a_{32} + \right. \\
 \left. + a_{21}^2 s_1 + 4a_{21} a_{32} s_1 + a_{21} s_1^2 - s_1^3) f^2 f_y f_{yy} + \frac{1}{12} (a_{21}^3 + s_1^3) f^3 f_{yyy} \right) + O(h^4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{k_3 k_4} = & f + \frac{1}{2} h(s_1 + s_2) ff_y + h^2 \left(\frac{1}{8} (4a_{21}(a_{32} + a_{42}) + 4a_{43}s_1 - s_1^2 + 2s_1s_2 - s_2^2) ff_y^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{4} (s_1^2 + s_2^2) f^2 f_{yy} \right) + h^3 \left(\frac{1}{16} (4a_{21}(2a_{32}a_{43} - a_{32}s_1 + a_{42}s_1 + a_{32}s_2 - a_{42}s_2) + \right. \\ & + (s_1 - s_2)(4a_{43}s_1 + s_1^2 - s_2^2)) ff_y^3 + \frac{1}{8} (2a_{21}^2 a_{32} + 2a_{21}^2 a_{42} + 4a_{21}a_{32}s_1 + 2a_{43}s_1^2 - \\ & - s_1^3 + 4a_{21}a_{42}s_2 + 4a_{43}s_1s_2 + s_1^2s_2 + s_1s_2^2 - s_2^3) f^2 f_y f_{yy} + \\ & \left. + \frac{1}{12} (s_1^3 + s_2^3) f^3 f_{yyy} \right) + O(h^4) \end{aligned}$$

portanto,

$$\begin{aligned} T_{n+1} = & h^2 (-3 + 2a_{21} + 2s_1 + s_2) ff_y + h^3 \left[(-4 - 2a_{21}^2 + 8a_{21}a_{32} + 4a_{21}a_{42} + 2a_{21}s_1 + 4a_{43}s_1 - \right. \\ & - 2s_1^2 + 2s_1s_2 - s_2^2) ff_y^2 + (-2 + 2a_{21}^2 + 2s_1^2 + s_2^2) f^2 f_{yy} \left. \right] + h^4 \left[(-2 + 2a_{21}^3 + 4a_{21}^2 a_{32} + \right. \\ & + 8a_{21}a_{32}a_{43} - a_{21}^2 s_1 - 8a_{21}a_{32}s_1 + 4a_{21}a_{42}s_1 - a_{21}s_1^2 + 4a_{43}s_1^2 + 2s_1^3 + 4a_{21}a_{32}s_2 - \\ & - 4a_{21}a_{42}s_2 - 4a_{43}s_1s_2 - s_1^2s_2 - s_1s_2^2 + s_2^3) ff_y^3 + (-4 - 2a_{21}^3 + 4a_{21}^2 a_{32} + 2a_{21}^2 a_{42} + \\ & + a_{21}^2 s_1 + 8a_{21}a_{32}s_1 + a_{21}s_1^2 + 2a_{43}s_1^2 - 2s_1^3 + 4a_{21}a_{42}s_2 + 4a_{43}s_1s_2 + s_1^2s_2 + s_1s_2^2 - \\ & - s_2^3) f^2 f_y f_{yy} + (-3 + 4a_{21}^3 + 4s_1^3 + 2s_2^3) f^3 f_{yyy} \left. \right] + O(h^5) \end{aligned}$$

Consequentemente, as condições para que o método tenha ordem 4 são:

$$h^2 ff_y: \quad -3 + 2a_{21} + 2s_1 + s_2 = 0$$

$$h^3 ff_y^2: \quad -4 - 2a_{21}^2 + 8a_{21}a_{32} + 4a_{21}a_{42} + 2a_{21}s_1 + 4a_{43}s_1 - 2s_1^2 + 2s_1s_2 - s_2^2 = 0$$

$$h^3 f^2 f_{yy}: \quad -2 + 2a_{21}^2 + 2s_1^2 + s_2^2 = 0$$

$$\begin{aligned} h^4 ff_y^3: \quad & -2 + 2a_{21}^3 + 4a_{21}^2 a_{32} + 8a_{21}a_{32}a_{43} - a_{21}^2 s_1 - 8a_{21}a_{32}s_1 + 4a_{21}a_{42}s_1 - a_{21}s_1^2 + \\ & + 4a_{43}s_1^2 + 2s_1^3 + 4a_{21}a_{32}s_2 - 4a_{21}a_{42}s_2 - 4a_{43}s_1s_2 - s_1^2s_2 - s_1s_2^2 + s_2^3 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h^4 f^2 f_y f_{yy}: \quad & -4 - 2a_{21}^3 + 4a_{21}^2 a_{32} + 2a_{21}^2 a_{42} + a_{21}^2 s_1 + 8a_{21}a_{32}s_1 + a_{21}s_1^2 + 2a_{43}s_1^2 - \\ & - 2s_1^3 + 4a_{21}a_{42}s_2 + 4a_{43}s_1s_2 + s_1^2s_2 + s_1s_2^2 - s_2^3 = 0 \end{aligned}$$

$$h^4 f^3 f_{yyy}: \quad -3 + 4a_{21}^3 + 4s_1^3 + 2s_2^3 = 0$$

Para os valores $s_1 = \frac{1}{2}$ e $s_2 = 1$, obtemos os seguintes valores para os coeficientes do método:

$$a_{21} = \frac{1}{2}$$

$$a_{41} = -\frac{1}{8}$$

$$a_{31} = -\frac{1}{16}$$

$$a_{42} = \frac{5}{24}$$

$$a_{32} = \frac{9}{16}$$

$$a_{43} = \frac{11}{12}$$

ou seja,

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} (\sqrt{k_1 k_2} + \sqrt{k_2 k_3} + \sqrt{k_3 k_4})$$

onde

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f(y_n + \frac{h}{2} k_1)$$

$$k_3 = f(y_n + \frac{h}{16} (-k_1 + 9k_2))$$

$$k_4 = f(y_n + \frac{h}{24} (-3k_1 + 5k_2 + 22k_3))$$

Isto é, chegamos ao método proposto por Evans [08] que tem ordem 4 e 4 estágios. Observe que para outras escolhas de s_1 e s_2 podemos gerar outros métodos dessa classe, todos com ordem 4 e 4 estágios.

2.4 Estratégia para controle do erro em problemas do tipo $y' = Ay$, através do método MG

Para problemas do tipo $y' = Ay$, considerando as condições de ordem dos métodos de Runge-Kutta simultaneamente com as condições do método da média geométrica, Sanugi e Evans [25] construíram o seguinte par de métodos com ordem 4:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{1}{6} k_1 + \frac{17}{42} k_2 + \frac{11}{42} k_3 + \frac{1}{6} k_4 \right) \quad (2.9a)$$

$$y_{n+1}^* = y_n \pm \frac{h}{3} (\sqrt{k_1 k_2} + \sqrt{k_2 k_3} + \sqrt{k_3 k_4}) \quad (2.9b)$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_n) \\ k_2 &= f\left(y_n + \frac{1}{2} h k_1\right) \end{aligned} \quad (2.9c)$$

$$k_3 = f\left(y_n + h\left(-\frac{1}{12} k_1 + \frac{7}{12} k_2\right)\right)$$

$$k_4 = f\left(y_n + h\left(-\frac{1}{12} k_1 + \frac{19}{84} k_2 + \frac{6}{7} k_3\right)\right)$$

As expressões do erro de truncamento local das aproximações y_{n+1} e y_{n+1}^* , são dadas respectivamente por:

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{1}{120} h^5 f_y^4 + O(h^6)$$

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^* = \frac{2707}{138240} h^5 f_y^4 + O(h^6)$$

Sendo assim:

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y_{n+1}^* &\cong \frac{311}{27648} h^5 f_y^4 \Rightarrow \\ \Rightarrow h^5 f_y^4 &\cong \frac{27648}{311} (y_{n+1} - y_{n+1}^*) \end{aligned}$$

Logo, podemos considerar como estimativa para o erro de truncamento local de y_{n+1} o valor:

$$Est = \frac{1152}{1555} (y_{n+1} - y_{n+1}^*) \quad (2.10)$$

$$\text{pois } \frac{1}{120} h^5 f_y^4 \cong \frac{1}{120} \cdot \frac{27648}{311} (y_{n+1} - y_{n+1}^*) = \frac{1152}{1555} (y_{n+1} - y_{n+1}^*).$$

Portanto, ao utilizarmos (2.9a) e (2.9b) para obtermos uma aproximação para a solução de problemas da forma $y' = Ay$, podemos considerar como estimativa para o erro de truncamento local, a expressão dada por (2.10), sem aumento do esforço computacional. Isto nos mostra uma utilidade desses métodos.

2.5 A média harmônica das derivadas (Método MH)

Vamos agora considerar a construção de métodos tipo Runge-Kutta explícitos com 4 estágios, baseados na média harmônica das derivadas. Isto é, gerar aproximações através de:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \left[\frac{2k_1k_2}{k_1 + k_2} + \frac{2k_2k_3}{k_2 + k_3} + \frac{2k_3k_4}{k_3 + k_4} \right] \quad (2.11a)$$

onde:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_n) \\ k_2 &= f(y_n + ha_{21}k_1) \\ k_3 &= f(y_n + h(a_{31}k_1 + a_{32}k_2)) \\ k_4 &= f(y_n + h(a_{41}k_1 + a_{42}k_2 + a_{43}k_3)) \end{aligned} \quad (2.11b)$$

Observe que podemos escrever a expressão (2.11a) como:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{A}{B}$$

onde:

$$A = \frac{2h}{3} [k_1k_2(k_2 + k_3)(k_3 + k_4) + k_2k_3(k_1 + k_2)(k_3 + k_4) + k_3k_4(k_1 + k_2)(k_2 + k_3)]$$

$$B = (k_1 + k_2)(k_2 + k_3)(k_3 + k_4)$$

Afim de determinar os coeficientes para que o método da média harmônica tenha ordem $p = 4$, devemos encontrar a expressão do erro de truncamento local e estabelecer as condições para que se atinja tal ordem de consistência. Temos que:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} = y(x_{n+1}) - \left[y(x_n) + \frac{A}{B} \right] \quad (2.12a)$$

consequentemente,

$$BT_{n+1} = B y(x_{n+1}) - B y(x_n) - A. \quad (2.12b)$$

Considerando $s_1 = a_{31} + a_{32}$ e $s_2 = a_{41} + a_{42} + a_{43}$, a expansão em série de Taylor dos k_i 's, $i = 1(1)4$ são as dadas por (2.8a), (2.8b), (2.8c) e (2.8d), respectivamente.

Daí obtemos:

$$\begin{aligned} A = & 8hf^4 + \frac{16}{3}h^2(2a_{21} + 2s_1 + s_2)f^4f_y + h^3\left(\frac{2}{3}(5a_{21}^2 + s_1(8a_{43} + 5s_1 + 9s_2) + a_{21}(16a_{32} + \right. \\ & \left. + 8a_{42} + 19s_1 + 10s_2))f^4f_y^2 + \frac{8}{3}(2a_{21}^2 + 2s_1^2 + s_2^2)f^5f_{yy}\right) + h^4\left(\frac{2}{3}(s_1^2(9a_{43} + 2s_2) + \right. \\ & \left. + a_{21}^2(19a_{32} + 10a_{42} + 5s_1 + 3s_2) + a_{21}(8a_{32}a_{43} + 10a_{32}s_1 + 9a_{42}s_1 + 10a_{43}s_1 + 5s_1^2 + \right. \\ & \left. + 9a_{32}s_2 + 9s_1s_2))f^4f_y^3 + \frac{1}{3}(10a_{21}^3 + 16a_{21}^2a_{32} + 8a_{21}^2a_{42} + 19a_{21}^2s_1 + 32a_{21}a_{32}s_1 + \right. \\ & \left. + 19a_{21}s_1^2 + 8a_{43}s_1^2 + 10s_1^3 + 10a_{21}^2s_2 + 16a_{21}a_{42}s_2 + 16a_{43}s_1s_2 + 9s_1^2s_2 + 10a_{21}s_2^2 + \right. \\ & \left. + 9s_1s_2^2)f^5f_yf_{yy} + \frac{8}{9}(2a_{21}^3 + 2s_1^3 + s_2^3)f^6f_{yyy}\right) + O(h^5) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} B = & 8f^3 + 4h(2a_{21} + 2s_1 + s_2)f^3f_y + 2h^2\left[(a_{21}^2 + s_1(2a_{43} + s_1 + s_2) + a_{21}(4a_{32} + 2a_{42} + 3s_1 + \right. \\ & \left. + 2s_2))f^3f_y^2 + (2a_{21}^2 + 2s_1^2 + s_2^2)f^4f_{yy}\right] + \frac{1}{3}h^3\left[3(2a_{43}s_1^2 + a_{21}^2(6a_{32} + 4a_{42} + s_1 + s_2) + \right. \\ & \left. + a_{21}(4a_{32}a_{43} + 4a_{32}s_1 + 2a_{42}s_1 + 4a_{43}s_1 + s_1^2 + 2a_{32}s_2 + s_1s_2))f^3f_y^3 + 3(2a_{21}^3 + a_{21}^2(4a_{32} + \right. \\ & \left. + 2a_{42} + 3s_1 + 2s_2) + s_1(2a_{43}s_1 + 2s_1^2 + 4a_{43}s_2 + s_1s_2 + s_2^2) + a_{21}(8a_{32}s_1 + 3s_1^2 + 4a_{42}s_2 + \right. \\ & \left. + 2s_2^2))f^4f_yf_{yy} + 2(2a_{21}^3 + 2s_1^3 + s_2^3)f^5f_{yyy}\right] + \frac{1}{6}h^4\left[6a_{21}(a_{21}^2(a_{32} + a_{42}) + a_{43}s_1(4a_{32} + \right. \\ & \left. + s_1) + a_{21}(2a_{32}^2 + 2a_{32}a_{42} + 4a_{32}a_{43} + 2a_{32}s_1 + a_{42}s_1 + a_{43}s_1 + a_{32}s_2))f^3f_y^4 + \right. \\ & \left. + 3(4a_{43}s_1^2(s_1 + s_2) + 2a_{21}^3(6a_{32} + 4a_{42} + s_1 + s_2) + a_{21}^2(16a_{32}s_1 + 2a_{42}s_1 + 4a_{43}s_1 + 2s_1^2 + \right. \\ & \left. + 2a_{32}s_2 + 8a_{42}s_2 + s_1s_2 + s_2^2) + a_{21}(12a_{32}s_1^2 + 2a_{42}s_1^2 + 4a_{43}s_1^2 + 2s_1^3 + 4a_{32}s_1s_2 + \right. \\ & \left. + 4a_{42}s_1s_2 + 8a_{43}s_1s_2 + s_1^2s_2 + 2a_{32}s_2^2 + s_1s_2^2))f^4f_y^2f_{yy} + 3(a_{21}^4 + s_1^2(s_1^2 + s_2^2) + a_{21}^2(3s_1^2 + \right. \\ & \left. + 2s_2^2))f^5f_{yy}^2 + 2(2a_{21}^4 + 3a_{31}^3s_1 + 3a_{21}^3s_1^3 + 2s_1^4 + 2a_{21}^3s_2 + s_1^3s_2 + 2a_{21}s_2^3 + s_1s_2^3)f^5f_yf_{yyy}\right] + \\ & + O(h^5) \end{aligned}$$

Finalmente, substituindo as expansões de A , B e (2.7) em (2.12b), e comparando os coeficientes dos termos similares até potências de h^4 , encontramos as condições para que o método da média harmônica tenha ordem $p = 4$:

$$h^2 f^4 f_y: 3 - 2a_{21} - 2s_1 - s_2 = 0$$

$$h^3 f^4 f_y^2: 2 + 6a_{21} - 2a_{21}^2 - 4a_{21}a_{32} - 2a_{21}a_{42} + 6s_1 - 10a_{21}s_1 - 2a_{43}s_1 - 2s_1^2 + 3s_2 - 4a_{21}s_2 - 6s_1s_2 = 0$$

$$h^3 f^5 f_{yy}: 2 - 2a_{21}^2 - 2s_1^2 - s_2^2 = 0$$

$$h^4 f^4 f_y^3: 1 + 4a_{21} + 3a_{21}^2 + 12a_{21}a_{32} - 20a_{21}^2a_{32} + 6a_{21}a_{42} - 8a_{21}^2a_{42} - 4a_{21}a_{32}a_{43} + 4s_1 + 9a_{21}s_1 - 7a_{21}^2s_1 - 8a_{21}a_{32}s_1 - 12a_{21}a_{42}s_1 + 6a_{43}s_1 - 8a_{21}a_{43}s_1 + 3s_1^2 - 7a_{21}s_1^2 - 12a_{43}s_1^2 + 2s_2 + 6a_{21}s_2 - 3a_{21}^2s_2 - 12a_{21}a_{32}s_2 + 3s_1s_2 - 15a_{21}s_1s_2 - 4s_1^2s_2 = 0$$

$$h^4 f^5 f_y f_{yy}: 4 + 4a_{21} + 6a_{21}^2 - 4a_{21}^3 - 4a_{21}^2a_{32} - 2a_{21}^2a_{42} + 4s_1 - 10a_{21}^2s_1 - 8a_{21}a_{32}s_1 + 6s_1^2 - 10a_{21}s_1^2 - 2a_{43}s_1^2 - 4s_1^3 + 2s_2 - 4a_{21}^2s_2 - 4a_{21}a_{42}s_2 - 4a_{43}s_1s_2 - 6s_1^2s_2 + 3s_2^2 - 4a_{21}s_2^2 - 6s_1s_2^2 = 0$$

$$h^4 f^6 f_{yyy}: 3 - 4a_{21}^3 - 4s_1^3 - 2s_2^3 = 0$$

Resolvendo-se o sistema constituído por essas condições de ordem encontramos um método explícito com ordem $p = 4$ e 4 estágios tendo como coeficientes os valores:

$$a_{21} = \frac{1}{2}$$

$$a_{41} = -\frac{1}{4}$$

$$a_{31} = -\frac{1}{8}$$

$$a_{42} = \frac{7}{20}$$

$$a_{32} = \frac{5}{8}$$

$$a_{43} = \frac{9}{10}$$

Portanto

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \left[\frac{2k_1k_2}{k_1 + k_2} + \frac{2k_2k_3}{k_2 + k_3} + \frac{2k_3k_4}{k_3 + k_4} \right]$$

onde:

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f\left(y_n + \frac{1}{2}hk_1\right)$$

$$k_3 = f\left(y_n - \frac{1}{8}hk_1 + \frac{5}{8}hk_2\right)$$

$$k_4 = f\left(y_n - \frac{1}{4}hk_1 + \frac{7}{20}hk_2 + \frac{9}{10}hk_3\right)$$

2.6 A média contra-harmônica das derivadas (Método MCH)

Evans e Yaakub [09] construíram um método que considera a média contra-harmônica das derivadas, tomadas duas a duas, isto é:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{k_i^2 + k_{i+1}^2}{k_i + k_{i+1}} \right) \quad (2.13a)$$

com:

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f(y_n + c_2hk_1) \quad (2.13b)$$

$$k_3 = f(y_n + a_{31}hk_1 + a_{32}hk_2)$$

$$k_4 = f(y_n + a_{41}hk_1 + a_{42}hk_2 + a_{43}hk_3)$$

onde os coeficientes c_i e a_{ij} , para $i = 1(1)4$ e $j = 1(1)(i-1)$, devem ser determinados de forma a permitir que o método tenha ordem de consistência $p = 4$.

Analogamente ao método da média harmônica, podemos escrever a expressão de (2.13a) como:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{A}{B}$$

onde:

$$A = \frac{h}{3}[(k_1^2 + k_2^2)(k_2 + k_3)(k_3 + k_4) + (k_2^2 + k_3^2)(k_1 + k_2)(k_3 + k_4) + (k_3^2 + k_4^2)(k_1 + k_2)(k_2 + k_3)]$$

$$B = (k_1 + k_2)(k_2 + k_3)(k_3 + k_4).$$

Para o método da média contra-harmônica, temos que:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} = y(x_{n+1}) - \left[y(x_n) + \frac{A}{B} \right]$$

consequentemente

$$BT_{n+1} = B y(x_{n+1}) - B y(x_n) - A$$

Considerando $s_1 = a_{31} + a_{32}$ e $s_2 = a_{41} + a_{42} + a_{43}$, a expansão em série de Taylor dos k_i 's, $i = 1(1)4$ são dadas por (2.8a), (2.8b), (2.8c) e (2.8d), respectivamente. Daí obtemos:

$$\begin{aligned} A = & 8hf^4 + \frac{16}{3}h^2(2a_{21} + 2s_1 + s_2)f^4f_y + h^3\left(\frac{2}{3}(9a_{21}^2 + 8a_{43}s_1 + 9s_1^2 + 5s_1s_2 + 2s_2^2 + a_{21}(16a_{32} + \right. \\ & \left. + 8a_{42} + 15s_1 + 10s_2))f^4f_y^2 + \frac{8}{3}(2a_{21}^2 + 2s_1^2 + s_2^2)f^5f_{yy}\right) + h^4\left(\frac{2}{3}(2a_{21}^3 + a_{21}^2(15a_{32} + 10a_{42} + \right. \\ & \left. + 6s_1 + 5s_2) + s_1(5a_{43}s_1 + 2s_1^2 + 4a_{43}s_2 + s_1s_2 + s_2^2) + a_{21}(8a_{32}a_{43} + 18a_{32}s_1 + 5a_{42}s_1 + \right. \\ & \left. + 10a_{43}s_1 + 6s_1^2 + 5a_{32}s_2 + 4a_{42}s_2 + 3s_1s_2 + 2s_2^2))f^4f_y^3 + \frac{1}{3}(18a_{21}^3 + 16a_{21}^2a_{32} + 8a_{21}^2a_{42} + \right. \\ & \left. + 15a_{21}^2s_1 + 32a_{21}a_{32}s_1 + 15a_{21}s_1^2 + 8a_{43}s_1^2 + 18s_1^3 + 10a_{21}^2s_2 + 16a_{21}a_{42}s_2 + 16a_{43}s_1s_2 + \right. \\ & \left. + 5s_1^2s_2 + 10a_{21}s_2^2 + 5s_1s_2^2 + 4s_2^3)f^5f_yf_{yy} + \frac{8}{9}(2a_{21}^3 + 2s_1^3 + s_2^3)f^6f_{yyy} + O(h^5) \right) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 B = & 8f^3 + 4h(2a_{21} + 2s_1 + s_2)f^3 f_y + 2h^2 \left[(a_{21}^2 + s_1(2a_{43} + s_1 + s_2) + a_{21}(4a_{32} + 2a_{42} + 3s_1 + \right. \\
 & \left. + 2s_2))f^3 f_y^2 + (2a_{21}^2 + 2s_1^2 + s_2^2)f^4 f_{yy} \right] + \frac{1}{3}h^3 \left[3(2a_{43}s_1^2 + a_{21}^2(6a_{32} + 4a_{42} + s_1 + s_2) + \right. \\
 & \left. + a_{21}(4a_{32}a_{43} + 4a_{32}s_1 + 2a_{42}s_1 + 4a_{43}s_1 + s_1^2 + 2a_{32}s_2 + s_1s_2))f^3 f_y^3 + 3(2a_{21}^3 + a_{21}^2(4a_{32} + \right. \\
 & \left. + 2a_{42} + 3s_1 + 2s_2) + s_1(2a_{43}s_1 + 2s_1^2 + 4a_{43}s_2 + s_1s_2 + s_2^2) + a_{21}(8a_{32}s_1 + 3s_1^2 + 4a_{42}s_2 + \right. \\
 & \left. + 2s_2^2))f^4 f_y f_{yy} + 2(2a_{21}^3 + 2s_1^3 + s_2^3)f^5 f_{yyy} \right] + \frac{1}{6}h^4 \left[6a_{21}(a_{21}^2(a_{32} + a_{42}) + a_{43}s_1(4a_{32} + \right. \\
 & \left. + s_1) + a_{21}(2a_{32}^2 + 2a_{32}a_{42} + 4a_{32}a_{43} + 2a_{32}s_1 + a_{42}s_1 + a_{43}s_1 + a_{32}s_2))f^3 f_y^4 + \right. \\
 & \left. + 3(4a_{43}s_1^2(s_1 + s_2) + 2a_{21}^3(6a_{32} + 4a_{42} + s_1 + s_2) + a_{21}^2(16a_{32}s_1 + 2a_{42}s_1 + 4a_{43}s_1 + 2s_1^2 + \right. \\
 & \left. + 2a_{32}s_2 + 8a_{42}s_2 + s_1s_2 + s_2^2) + a_{21}(12a_{32}s_1^2 + 2a_{42}s_1^2 + 4a_{43}s_1^2 + 2s_1^3 + 4a_{32}s_1s_2 + \right. \\
 & \left. + 4a_{42}s_1s_2 + 8a_{43}s_1s_2 + s_1^2s_2 + 2a_{32}s_2^2 + s_1s_2^2))f^4 f_y^2 f_{yy} + 3(a_{21}^4 + s_1^2(s_1^2 + s_2^2) + a_{21}^2(3s_1^2 + \right. \\
 & \left. + 2s_2^2))f^5 f_y^2 + 2(2a_{21}^4 + 3a_{31}s_1 + 3a_{21}s_1^3 + 2s_1^4 + 2a_{21}^3s_2 + s_1^3s_2 + 2a_{21}s_2^3 + s_1s_2^3)f^5 f_y f_{yyy} \right] + \\
 & + O(h^5)
 \end{aligned}$$

Utilizando-se processo análogo ao considerado para o método da média harmônica, obtemos as seguintes condições para que o método da média contra-harmônica tenha ordem $p = 4$:

$$h^2 f^4 f_y: \quad 3 - 2a_{21} - 2s_1 - s_2 = 0$$

$$\begin{aligned}
 h^3 f^4 f_y^2: \quad & 2 + 6a_{21} - 6a_{21}^2 - 4a_{21}a_{32} - 2a_{21}a_{42} + 6s_1 - 6a_{21}s_1 - 2a_{43}s_1 - 6s_1^2 + 3s_2 - \\
 & - 4a_{21}s_2 - 2s_1s_2 - 2s_2^2 = 0
 \end{aligned}$$

$$h^3 f^5 f_{yy}: \quad 2 - 2a_{21}^2 - 2s_1^2 - s_2^2 = 0$$

$$\begin{aligned}
 h^4 f^4 f_y^3: \quad & 1 + 4a_{21} + 3a_{21}^2 - 4a_{21}^3 + 12a_{21}a_{32} - 12a_{21}^2a_{32} + 6a_{21}a_{42} - 8a_{21}^2a_{42} - \\
 & - 4a_{21}a_{32}a_{43} + 4s_1 + 9a_{21}s_1 - 9a_{21}^2s_1 - 24a_{21}a_{32}s_1 - 4a_{21}a_{42}s_1 + 6a_{43}s_1 - \\
 & - 8a_{21}a_{43}s_1 + 3s_1^2 - 9a_{21}s_1^2 - 4a_{43}s_1^2 - 4s_1^3 + 2s_2 + 6a_{21}s_2 - 7a_{21}^2s_2 - \\
 & - 4a_{21}a_{32}s_2 - 8a_{21}a_{42}s_2 + 3s_1s_2 - 3a_{21}s_1s_2 - 8a_{43}s_1s_2 - 2s_1^2s_2 - 4a_{21}s_2^2 - \\
 & - 2s_1s_2^2 = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 h^4 f^5 f_y f_{yy}: \quad & 4 + 4a_{21} + 6a_{21}^2 - 12a_{21}^3 - 4a_{21}^2a_{32} - 2a_{21}^2a_{42} + 4s_1 - 6a_{21}^2s_1 - 8a_{21}a_{32}s_1 + \\
 & + 6s_1^2 - 6a_{21}s_1^2 - 2a_{43}s_1^2 - 12s_1^3 + 2s_2 - 4a_{21}^2s_2 - 4a_{21}a_{42}s_2 - 4a_{43}s_1s_2 - \\
 & - 2s_1^2s_2 + 3s_2^2 - 4a_{21}s_2^2 - 2s_1s_2^2 - 4s_2^3 = 0
 \end{aligned}$$

$$h^4 f^6 f_{yyy}: 3 - 4a_{21}^3 - 4s_1^3 - 2s_2^3 = 0$$

Resolvendo esse sistema, encontramos o seguinte método:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{k_i^2 + k_{i+1}^2}{k_i + k_{i+1}}$$

onde:

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f(y_n + \frac{h}{2} k_1)$$

$$k_3 = f(y_n + \frac{h}{8} k_1 + \frac{3h}{8} k_2)$$

$$k_4 = f(y_n + \frac{h}{4} k_1 - \frac{3h}{4} k_2 + \frac{3h}{2} k_3)$$

2.7 Estratégia para controle do erro de truncamento local através do método MCH

Uma combinação da fórmula de Runge-Kutta clássica de ordem 4 com a fórmula da média contra-harmônica (método MCH) também de ordem 4, que vamos anotar por método RK(4,4), pode ser considerada para o controle do erro de truncamento local da fórmula clássica.

Sejam:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \left[\sum_{i=1}^3 \left(\frac{k_i + k_{i+1}}{2} \right) \right]$$

$$y_{n+1}^* = y_n + \frac{h}{3} \left[\sum_{i=1}^3 \left(\frac{k_i^{*2} + k_{i+1}^{*2}}{k_i^* + k_{i+1}^*} \right) \right]$$

onde:

$$k_1 = f(y_n) = k_1^*$$

$$k_2 = f\left(y_n + \frac{1}{2}hk_1\right) = k_2^*$$

$$k_3 = f\left(y_n + \frac{1}{2}hk_2\right)$$

$$k_3^* = f\left(y_n + \frac{1}{8}hk_1^* + \frac{3}{8}hk_2^*\right)$$

$$k_4 = f(y_n + hk_3)$$

$$k_4^* = f\left(y_n + \frac{1}{4}hk_1^* - \frac{3}{4}hk_2^* + \frac{3}{2}hk_3^*\right)$$

A parte principal do erro de truncamento local para cada um desses métodos é respectivamente:

$$y_{n+1} - y(x_{n+1}) = \frac{h^5}{2880}[-24f^4f_y^4 + f^4f_{yyyy} + 2f^3f_yf_{yyy} - 6f^3f_y^2 + 36f^2f_y^2f_{yy}]$$

e

$$y_{n+1}^* - y(x_{n+1}) = \frac{h^5}{23040}[-378f^4f_y^4 - 8f^4f_{yyyy} + 4f^3f_yf_{yyy} - 648f^3f_y^2 - 303f^2f_y^2f_{yy}]$$

Fazendo a diferença entre as duas expressões do erro obtemos:

$$y_{n+1} - y_{n+1}^* = \frac{h^5}{23040}[186f^4f_y^4 + 16f^4f_{yyyy} + 12f^3f_yf_{yyy} + 600f^3f_y^2 + 591f^2f_y^2f_{yy}]$$

Considerando limitantes sugeridos por Lotkin [1951], se assumirmos que:

$$\left. \begin{aligned} |f^4 f_y^4| &< \frac{Q^4 P^4}{Q^3} \\ |f^4 f_{yyyy}| &< \frac{Q^4 P^4}{Q^3} \\ |f^3 f_y f_{yyy}| &< Q^3 P \frac{P^3}{Q^2} \\ |f^3 f_{yy}^2| &< Q^3 \left(\frac{P^2}{Q} \right)^2 \\ |f^2 f_y^2 f_{yy}| &< Q^2 P^2 \frac{P^2}{Q} \end{aligned} \right\} < P^4 Q$$

onde P e Q são constantes positivas, vamos obter:

$$\begin{aligned} \square \quad |y_{n+1} - y(x_{n+1})| &\leq \frac{9}{2880} P^4 Q h^5; \\ \square \quad |y_{n+1}^* - y(x_{n+1})| &\leq \frac{1333}{23040} P^4 Q h^5; \\ \square \quad |y_{n+1} - y_{n+1}^*| &\leq \frac{281}{4608} P^4 Q h^5 \Rightarrow P^4 Q h^5 \geq \frac{4608}{281} |y_{n+1} - y_{n+1}^*|. \end{aligned}$$

Logo, podemos considerar como estimativa para o erro de truncamento local do método de Runge-Kutta clássico o valor:

$$Est = \frac{72}{1405} |y_{n+1} - y_{n+1}^*|$$

pois

$$\begin{aligned} |y_{n+1} - y(x_{n+1})| &\leq \frac{9}{2880} P^4 Q h^5 \Rightarrow |y_{n+1} - y(x_{n+1})| \leq \frac{9}{2880} \frac{4608}{281} |y_{n+1} - y_{n+1}^*| \Rightarrow \\ \Rightarrow |y_{n+1} - y(x_{n+1})| &\leq \frac{72}{1405} |y_{n+1} - y_{n+1}^*|. \end{aligned}$$

Observe que a dificuldade de utilização dessa estratégia está na limitação das derivadas parciais do problema de valor inicial.

APÍTULO 3

MÉTODOS DE EXTRAPOLAÇÃO PARA A RESOLUÇÃO DE PVI'S

3.1 Introdução

Uma outra opção interessante para a integração numérica de problemas de valor inicial, consiste em utilizar métodos de discretização que possuem uma expansão assintótica em potências pares de h (tamanho do passo de integração), constituindo os chamados métodos de extrapolação.

Bulirsch e Stoer [03] mostraram como utilizar as interpolações polinomial e racional, associadas à utilização da estratégia de Gragg [15], gerando o denominado método GBS, o qual apresentaremos neste capítulo.

3.2 Preliminares

Usando a notação reduzida $f_{n+j} := f(x_{n+j}, y_{n+j})$ para $j = 0(1)k$, definimos a classe dos métodos lineares de passo múltiplo (MLPM). Em sua formulação geral, esses métodos tem como algoritmo para obtenção da solução aproximada de um pvi:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} \quad (3.1)$$

onde α_j e β_j são constantes que devem satisfazer as seguintes condições:

- $\alpha_k = 1$
- $|\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0$

Isto é, conhecidas as aproximações y_{n+j} e f_{n+j} para $j = 0(1)(k-1)$ podemos encontrar a aproximação y_{n+k} . O método (3.1) é dito explícito se $\beta_k = 0$ e implícito se $\beta_k \neq 0$. Alertamos para a situação em que $\beta_k \neq 0$, que apresenta um complicador a ser contornado para a obtenção de y_{n+k} .

Alguns exemplos clássicos de MLPM

- 1) Método de Euler: $y_{n+1} - y_n = hf_n$
- 2) Método do Trapézio: $y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$
- 3) Método do ponto médio: $y_{n+1} - y_{n-1} = 2hf_n$

Para essa classe de métodos dois polinômios tem um papel importante, são os denominados 1° e 2° polinômios característicos de (3.1), definidos respectivamente por:

$$\rho(r) := \sum_{j=0}^k \alpha_j r^j \quad (3.2a)$$

$$\sigma(r) := \sum_{j=0}^k \beta_j r^j \quad (3.2b)$$

onde $r \in \mathbb{C}$ é uma variável auxiliar.

3.3 A extrapolação

Extrapolar é uma maneira eficiente em análise numérica de se tentar acelerar a convergência de aproximações geradas através de métodos de discretização.

Para o problema de valor inicial definido em (1.1), sejam y_n , $n = 0, 1, 2, \dots, N$, as aproximações para a solução exata $y(x)$ nos pontos $x_n = x_0 + nh$.

A aplicação da extrapolação para a resolução de tais problemas, será possível quando utilizarmos métodos numéricos tais que a solução aproximada $y_n = y(\bar{x}; h)$ admita para algum ponto fixado $\bar{x} = x_0 + Nh$ uma expansão assintótica da forma:

$$y(\bar{x}) + \beta_1 h^2 + \beta_2 h^4 + \beta_3 h^6 + \dots, \quad (3.3)$$

onde os coeficientes β_i não dependem de h .

Embora nem sempre se tem a garantia de convergência da série de potência adiantamos que, expansões assintóticas são capazes de produzir para valores pequenos de h resultados que são com frequência suficientemente precisos para propósitos práticos.

Gragg [15], mostrou que $y(\bar{x}; h)$ terá uma expansão da forma (3.3) se o método linear de passo múltiplo utilizado for simétrico, ou seja, seus polinômios característicos verificam a relação:

$$\rho(r) + r^K \rho(r^{-1}) = \sigma(r) - r^K \sigma(r^{-1})$$

Vamos considerar o método do ponto médio

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n), \quad x_n = x_0 + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.4)$$

e mostrar que o mesmo admite a expansão (3.3).

Temos que o método (3.4) é simétrico pois:

$$\rho(r) + r^K \rho(r^{-1}) = r^2 - 1 + r^2 \left(\frac{1}{r^2} - 1 \right) = r^2 - 1 + 1 - r^2 = 0$$

e

$$\sigma(r) - r^K \sigma(r^{-1}) = 2r - r^2 \left(\frac{2}{r} \right) = 2r - 2r = 0.$$

Agora, consideremos a aplicação da regra do ponto médio ao pvi

$$y' = -y$$

$$y(0) = 1$$

cuja solução exata é $y(x) = e^{-x}$.

Como necessitamos de dois valores iniciais, y_0 e y_1 tomemos $y_0 = y(0) = 1$ e $y_1 = 1 - h$, obtida através do método de Euler, $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$.

Para $R_h = \{x_n = x_0 + nh \mid n = 0, 1, 2, \dots\} = \{x_n = nh \mid n = 0, 1, 2, \dots\}$, temos

$$y(x; h) := y_n = y_{x/h} \text{ se } x = x_n = nh.$$

Observando que $f(x_n, y_n) = -y_n$, de acordo com (3.4), y_n irá satisfazer à seguinte equação de diferenças:

$$y_{n+1} + 2hy_n - y_{n-1} = 0, \quad n = 1, 2, \dots$$

Resolvendo a equação, podemos encontrar y_n explicitamente, que será dada por:

$$y(x; h) := y_{x/h} = c_1(h)[\lambda_1(h)]^{x/h} + c_2(h)[\lambda_2(h)]^{x/h}, \text{ para } x \in R_h, h \neq 0$$

onde:

$$\lambda_1 = \sqrt{1+h^2} \left(1 - \frac{h}{\sqrt{1+h^2}} \right), \quad \lambda_2 = -\sqrt{1+h^2} \left(1 + \frac{h}{\sqrt{1+h^2}} \right)$$

e

$$c_1 = \frac{1 + \sqrt{1+h^2}}{2\sqrt{1+h^2}}, \quad c_2 = \frac{h^2}{2} \frac{1}{2\sqrt{1+h^2} + 1 + h^2}.$$

Temos que:

$$\varphi_1(h) := c_1(h)[\lambda_1(h)]^{x/h}$$

é uma função analítica para $|h| < 1$. Além disso, $\varphi_1(h) = \varphi_1(-h)$ pois $c_1(-h) = c_1(h)$ e

$$\lambda_1(-h) = \frac{1}{\lambda_1(h)}.$$

Por outro lado, o termo

$$c_2(h)[\lambda_2(h)]^{x/h} = (-1)^{x/h} \varphi_2(h),$$

com

$$\varphi_2(h) = c_2(h)[\lambda_1(-h)]^{x/h} = c_2(h)[\lambda_1(h)]^{-x/h},$$

é uma função analítica para $|h| < 1$, e $\varphi_2(h) = \varphi_2(-h)$.

As funções φ_1 e φ_2 , para $|h| < 1$, podem ser expandidas em séries de potência convergentes da forma:

$$\varphi_1(h) = u_0(x) + u_1(x)h^2 + u_2(x)h^4 + \dots,$$

$$\varphi_2(h) = v_0(x) + v_1(x)h^2 + v_2(x)h^4 + \dots,$$

onde $u_n(x)$ e $v_n(x)$ são funções analíticas adequadas.

O primeiro termo de cada uma dessas séries podem ser facilmente encontrados e são dados por:

$$u_0(x) = e^{-x} \quad \text{e} \quad v_0(x) = 0.$$

Consequentemente, $y(x; h)$ terá uma expansão da forma:

$$y(x; h) = y(x) + \sum_{k=1}^{\infty} h^{2k} [u_k(x) + (-1)^{x/h} v_k(x)],$$

para todo $h = \frac{x}{n}$, $n = 1, 2, \dots$

É importante observar que devido ao termo oscilante $(-1)^{x/h}$, que depende de h , não temos para $y(x; h)$ uma expansão assintótica da forma (3.3).

Entretanto, restringindo a escolha de h de tal maneira que x/h seja sempre par, ou sempre ímpar obtemos duas expansões assintóticas, como desejávamos:

$$y(x; h) = y(x) + \sum_{k=1}^{\infty} h^{2k} [u_k(x) + v_k(x)], \text{ para todo } h = \frac{x}{2n}, n = 1, 2, \dots$$

$$y(x; h) = y(x) + \sum_{k=1}^{\infty} h^{2k} [u_k(x) - v_k(x)], \text{ para todo } h = \frac{x}{2n-1}, n = 1, 2, \dots$$

De maneira geral vale o seguinte resultado, devido a Gragg [15]:

Teorema 1

Seja $f \in F_{2M+2}(a, b)$, onde $F_{2M+2}(a, b)$ denota o conjunto das funções para as quais todas as derivadas parciais, incluindo a de ordem $2M+2$, existem em $S = \{(x, y) / a \leq x \leq b, y \in \mathbb{R}^n; a, b : \text{finitos}\}$, são contínuas e limitadas. Seja $y(x)$ a solução exata do problema de valor inicial

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

$$y(x_0) = y_0, \quad x_0 \in [a, b].$$

Para $x \in R_h = \{x_0 + nh \mid n = 0, 1, 2, \dots\}$, seja $y(x; h)$ definida por:

$$y(x_0; h) := y_0,$$

$$y(x_0 + h; h) := y_0 + hf(x_0, y_0), \quad (3.5)$$

$$y(x + h; h) := y(x - h; h) + 2hf(x, y(x; h)).$$

Então $y(x; h)$ terá uma expansão da forma:

$$y(x; h) = y(x) + \sum_{k=1}^M h^{2k} [u_k(x) + (-1)^{(x-x_0)/h} v_k(x)] + h^{2M+2} E_{2M+2}(x; h), \quad (3.6)$$



válida para todo $x \in [a, b]$ e todo $h = (x - x_0)/n$, $n = 1, 2, \dots$. As funções $u_k(x)$ e $v_k(x)$ são independentes de h e para x fixado o termo do resto $E_{2M+2}(x; h)$ é limitado para todo $h = (x - x_0)/n$, $n = 1, 2, \dots$. (A demonstração, pode ser encontrada em Hairer e Lubich [16]).

Sob as hipóteses deste teorema, o erro $e(x; h) := y(x; h) - y(x)$ da primeira aproximação é dado por:

$$e(x; h) = h^2 \left[u_1(x) + (-1)^{(x-x_0)/h} v_1(x) \right]$$

Devido ao termo $(-1)^{(x-x_0)/h}$, este mostra um comportamento oscilante, isto é:

$$e(x \pm h; h) = h^2 \left[u_1(x) - (-1)^{(x-x_0)/h} v_1(x) \right].$$

No entanto, segundo Gragg, o termo oscilante principal $(-1)^{(x-x_0)/h} v_1(x)$ pode ser removido considerando-se um artifício, como veremos a seguir. Seja:

$$S(x; h) := \frac{1}{2} [y(x; h) + y(x - h; h) + hf(x, y(x; h))] \quad (3.7)$$

onde $y(x; h)$ é definido por (3.6).

De acordo com (3.5), $y(x + h; h) = y(x - h; h) + 2hf(x, y(x; h))$, logo, $y(x - h; h) = y(x + h; h) - 2hf(x, y(x; h))$.

Consequentemente:

$$\begin{aligned} S(x; h) &= \frac{1}{2} [y(x; h) + y(x + h; h) - 2hf(x, y(x; h)) + hf(x, y(x; h))] = \\ &= \frac{1}{2} [y(x; h) + y(x + h; h) - hf(x, y(x; h))]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Somando-se as expressões de (3.7) e (3.8), temos que:

$$S(x; h) = \frac{1}{2} \left[y(x; h) + \frac{1}{2} y(x - h; h) + \frac{1}{2} y(x + h; h) \right]. \quad (3.9)$$

Considerando em (3.9) a expansão de $y(x; h)$ definida em (3.6) obtemos:



$$S(x; h) = \frac{1}{2} \left\{ y(x) + \frac{1}{2} [y(x+h) + y(x-h)] + \sum_{k=1}^M h^{2k} \left[u_k(x) + \frac{1}{2} [u_k(x+h) + u_k(x-h)] + \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^{(x-x_0)/h} \left[v_k(x) - \frac{1}{2} [v_k(x+h) + v_k(x-h)] \right] \right] \right\} + O(h^{2M+2}) \quad (3.10)$$

Expandindo-se em série de Taylor, as funções $y(x \pm h)$, u_k e v_k , numa vizinhança de x , em potência de h , obtemos:

$$y(x \pm h) = y(x) \pm hy'(x) + \frac{h^2}{2!} y''(x) \pm \frac{h^3}{3!} y'''(x) + \dots,$$

$$u_k(x \pm h) = u_k(x) \pm hu'_k(x) + \frac{h^2}{2!} u''_k(x) \pm \frac{h^3}{3!} u'''_k(x) + \dots,$$

$$v_k(x \pm h) = v_k(x) \pm hv'_k(x) + \frac{h^2}{2!} v''_k(x) \pm \frac{h^3}{3!} v'''_k(x) + \dots$$

Portanto:

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + 2\frac{h^2}{2!} y''(x) + 2\frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x) + \dots \quad (3.11a)$$

$$u_k(x+h) + u_k(x-h) = 2u_k(x) + 2\frac{h^2}{2!} u''_k(x) + 2\frac{h^4}{4!} u_k^{(4)}(x) + \dots \quad (3.11b)$$

$$v_k(x+h) + v_k(x-h) = 2v_k(x) + 2\frac{h^2}{2!} v''_k(x) + 2\frac{h^4}{4!} v_k^{(4)}(x) + \dots \quad (3.11c)$$

Então, substituindo-se (3.11a), (3.11b) e (3.11c) em (3.10) obtemos:

$$S(x; h) = \frac{1}{2} \left\{ y(x) + \frac{1}{2} \left[2y(x) + 2\frac{h^2}{2!} y''(x) + 2\frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x) + \dots \right] + \right. \\ \left. + \sum_{k=1}^M h^{2k} \left[u_k(x) + \frac{1}{2} \left[2u_k(x) + 2\frac{h^2}{2!} u''_k(x) + 2\frac{h^4}{4!} u_k^{(4)}(x) + \dots \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^{(x-x_0)/h} \left[v_k(x) - \frac{1}{2} \left[2v_k(x) + 2\frac{h^2}{2!} v''_k(x) + 2\frac{h^4}{4!} v_k^{(4)}(x) + \dots \right] \right] \right] \right\} + \\ + O(h^{2M+2})$$

Finalmente, encontramos para $S(x; h)$ uma expansão da forma:

$$S(x;h) = y(x) + h^2 \left[u_1(x) + \frac{1}{4} y''(x) \right] + \sum_{k=2}^M h^{2k} \left[\tilde{u}_k(x) + (-1)^{(x-x_0)/h} \tilde{v}_k(x) \right] + O(h^{2M+2}) \quad (3.12)$$

na qual o termo principal do erro não contém um fator oscilante.

3.4 O método GBS

Uma forma eficiente de se associar a extrapolação à solução numérica de um PVI é considerar a função de Gragg $S(x;h)$ dada em (3.7), conhecido como método de Gragg-Bulirsch-Stoer, ou simplesmente GBS.

Considerando o problema de valor inicial definido em (1.1), com solução exata $y(x)$ e as aproximações y_n para os pontos $x_n = x_0 + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$, num ponto fixado $\bar{x} := x_0 + Nh$, calculamos o valor da função $S(\bar{x};h)$ da seguinte maneira. Tomamos $y_0 = y(x_0)$, $y_1 := y_0 + hf(x_0, y_0)$, e então, para $n = 1, 2, \dots, N-1$ calculamos:

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

$$S(\bar{x};h) := \frac{1}{2} [y_N + y_{N-1} + hf(x_N, y_N)].$$

Em seguida, para uma sequência de números naturais $F = \{n_0, n_1, n_2, \dots, n_m\}$, onde $n_0, n_1, n_2, \dots, n_m$ são estritamente crescentes e inteiros positivos, e tomando H o passo inicial, construímos a sequência de h_i 's:

$$h_0 = \frac{H}{n_0}, h_1 = \frac{H}{n_1}, h_2 = \frac{H}{n_2}, h_3 = \frac{H}{n_3}, \dots, h_m = \frac{H}{n_m},$$

e calculamos os valores

$$T_{i0} := S(\bar{x}; h_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, m.$$

Considerando o polinômio de interpolação em h^2

$$\tilde{T}_{mm}(h) := a_0 + a_1 h^2 + \dots + a_m h^{2m}$$

com $\tilde{T}_{mm}(h_i) = S(\bar{x}; h_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, m$, tomamos o valor “extrapolado” $\tilde{T}_{mm}(0)$ como a aproximação para a solução exata no ponto $\bar{x}$, pois $\tilde{T}_{mm}(0) = S(\bar{x}; 0) = y(\bar{x})$.

Utilizando um algoritmo para interpolação polinomial, denominado algoritmo de Neville, podemos calcular $\tilde{T}_{mm}(0)$ da maneira a seguir.

Para os índices i, k com $1 \leq k \leq i \leq m$, seja

$$\tilde{T}_{ik}(h) := a_0 + a_1 h^2 + \dots + a_k h^{2k}$$

o polinômio de grau máximo k em h^2 com

$$\tilde{T}_{ik}(h_j) = S(\bar{x}; h_j) \text{ para } j = i, i-1, \dots, i-k$$

e seja

$$T_{ik} := \tilde{T}_{ik}(0).$$

A fórmula de recursão de Neville para $x_i = h_i^2$ é dada por:

$$T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{\left| \frac{h_{i-k}}{h_i} \right|^2 - 1} \quad (3.13)$$

Podemos organizar os valores encontrados numa tabela triangular, como a seguir, onde cada elemento depende de seus dois vizinhos à esquerda.

$$\begin{array}{ccccccc}
 S(\bar{x}; h_0) := T_{00} & & & & & & \\
 & T_{11} & & & & & \\
 S(\bar{x}; h_1) := T_{10} & & T_{22} & & & & \\
 & T_{21} & & T_{33} & & & \\
 S(\bar{x}; h_2) := T_{20} & & T_{32} & \vdots & \dots & T_{mm} & \\
 & T_{31} & \vdots & T_{m3} & & & \\
 S(\bar{x}; h_3) := T_{30} & \vdots & T_{m2} & & & & \\
 & \vdots & & & & & \\
 & T_{m1} & & & & & \\
 S(\bar{x}; h_m) := T_{m0} & & & & & &
 \end{array} \quad (3.14)$$

Ao invés de considerarmos a interpolação polinomial, podemos utilizar a interpolação racional. Nesse caso $T_{ik} := \tilde{T}_{ik}(0)$ será o valor do polinômio racional de interpolação em h^2 , definido por:

$$\tilde{T}_{ik}(h) = \frac{p_0 + p_1 h^2 + \dots + p_\mu h^{2\mu}}{q_0 + q_1 h^2 + \dots + q_\nu h^{2\nu}}$$

onde $\mu + \nu = k$, $\mu = \nu$ ou $\mu = \nu - 1$, com $\tilde{T}_{ik}(h_j) = S(\bar{x}; h_j)$ para $j = i, i-1, \dots, i-k$.

Analogamente à interpolação polinomial, quando consideramos a interpolação racional para $x_i = h_i^2$, a fórmula de recursão de Neville é definida por:

$$T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{\left| \frac{h_{i-k}}{h_i} \right|^2 \left[1 - \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-2}} \right] - 1}, \quad (3.15)$$

$$T_{i,-1} := 0.$$

Neste caso, também podemos organizar os valores encontrados na tabela (3.14).

Tanto na técnica de extrapolação que utiliza a interpolação polinomial quanto na que usa interpolação racional, cada coluna de (3.14) irá convergir para $y(\bar{x})$, ou seja

$$\lim_{i \rightarrow \infty} T_{ik} = y(\bar{x}), \text{ para } k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.16)$$

Em ambos os casos, devido ao termo oscilatório $(-1)^{(x-x_0)/h}$ em (3.12), a sequência F utilizada para gerar os h_i 's deve conter somente números pares ou ímpares. Em capítulos seguintes vamos considerar a sequência proposta por Stoer e Bulirsch [32], que é dada por:

$$F = \{2, 4, 6, 8, 12, 16, \dots\},$$

ou seja,

$$n_0 = 2, n_1 = 4, n_2 = 6 \text{ e } n_i := 2n_{i-2}, \text{ para } i = 3, 4, 5, 6, \dots$$

APÍTULO 4

INTEGRAÇÃO A PASSO FIXO: RESULTADOS NUMÉRICOS

4.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados numéricos considerando integração a passo fixo através dos métodos de Runge-Kutta e das variantes dos métodos de Runge-Kutta (métodos de Evans), tomando métodos com ordem 4 e 4 estágios, tendo como objetivo principal avaliar o desempenho computacional desses métodos.

4.2 Os métodos

Visando avaliar o desempenho computacional dos métodos de Evans, em relação aos métodos de Runge-Kutta, consideramos um particular método de cada uma dessas classes com ordem 4 e 4 estágios. São eles:

□ Método de Runge-Kutta Clássico (RK)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

onde

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_3 = f(y_n + \frac{1}{2}hk_2)$$

$$k_2 = f(y_n + \frac{1}{2}hk_1)$$

$$k_4 = f(y_n + hk_3)$$

□ Método da média geométrica (MG)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3}[(k_1k_2)^{1/2} + (k_2k_3)^{1/2} + (k_3k_4)^{1/2}]$$

onde

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f(y_n + \frac{h}{2}k_1)$$

$$k_3 = f(y_n + \frac{h}{16}(-k_1 + 9k_2))$$

$$k_4 = f(y_n + \frac{h}{24}(-3k_1 + 5k_2 + 22k_3))$$

□ Método da média harmônica (MH)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{2h}{3} \left[\frac{k_1k_2}{k_1 + k_2} + \frac{k_2k_3}{k_2 + k_3} + \frac{k_3k_4}{k_3 + k_4} \right]$$



onde

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f\left(y_n + \frac{1}{2}hk_1\right)$$

$$k_3 = f\left(y_n - \frac{1}{8}hk_1 + \frac{5}{8}hk_2\right)$$

$$k_4 = f\left(y_n - \frac{1}{4}hk_1 + \frac{7}{20}hk_2 + \frac{9}{10}hk_3\right)$$

□ Método da média contra-harmônica (MCH)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{k_i^2 + k_{i+1}^2}{k_i + k_{i+1}}$$

onde

$$k_1 = f(y_n)$$

$$k_2 = f\left(y_n + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(y_n + \frac{h}{8}k_1 + \frac{3h}{8}k_2\right)$$

$$k_4 = f\left(y_n + \frac{h}{4}k_1 - \frac{3h}{4}k_2 + \frac{3h}{2}k_3\right)$$

4.3 Resultados numéricos

Considerando os métodos RK, MG, MH e MCH mencionados no parágrafo anterior e trabalhando com integração a passo fixo, vários problemas de valor inicial escritos em sua formulação autônoma foram por nós resolvidos numericamente.

Inicialmente, selecionamos para a apresentação neste trabalho alguns problemas escalares, com suas respectivas soluções exatas, que refletem ao nosso ver o comportamento desses métodos. As tabelas a seguir apresentam o tamanho do passo considerado, o número total de passos de integração realizados e o valor do erro absoluto de cada aproximação. Esses resultados nos permitem avaliar qualitativamente cada um dos métodos, como geradores de uma aproximação para a solução exata do pvi.



4.1. $y' = y, \quad y(0) = 1$

$y(x) = e^x$

Tamanho do passo: 0.1
Número total de passos: 20

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	1.873E-007	4.218E-007	6.880E-007	3.362E-007
0.4	4.575E-007	1.030E-006	1.680E-006	8.214E-007
0.6	8.382E-007	1.887E-006	3.079E-006	1.504E-006
0.8	1.365E-006	3.074E-006	5.014E-006	2.450E-006
1.0	2.084E-006	4.693E-006	7.655E-006	3.741E-006
1.2	3.054E-006	6.879E-006	1.122E-005	5.484E-006
1.4	4.353E-006	9.803E-006	1.598E-005	7.815E-006
1.6	6.076E-006	1.368E-005	2.231E-005	1.090E-005
1.8	8.349E-006	1.880E-005	3.066E-005	1.498E-005
2.0	1.133E-005	2.551E-005	4.162E-005	2.034E-005

Tamanho do passo: 0.01
Número total de passos: 200

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	2.018E-011	4.666E-011	7.667E-011	3.937E-011
0.4	4.931E-011	1.139E-010	1.873E-010	9.618E-011
0.6	9.034E-011	2.088E-010	3.431E-010	1.762E-010
0.8	1.471E-010	3.401E-010	5.588E-010	2.869E-010
1.0	2.246E-010	5.192E-010	8.532E-010	4.381E-010
1.2	3.292E-010	7.610E-010	1.250E-009	6.421E-010
1.4	4.691E-010	1.084E-009	1.782E-009	9.150E-010
1.6	6.549E-010	1.513E-009	2.487E-009	1.277E-009
1.8	8.999E-010	2.080E-009	3.418E-009	1.755E-009
2.0	1.221E-009	2.823E-009	4.638E-009	2.381E-009

4.2. $y' = 10 - \frac{5y}{100}, \quad y(0) = 20$

$y(x) = e^{-x/20}(-200 + 200e^{x/20})$

Tamanho do passo: 0.5
Número total de passos: 20

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
1.0	2.845E-008	6.646E-008	1.095E-007	5.736E-008
2.0	5.413E-008	1.264E-007	2.083E-007	1.091E-007
3.0	7.724E-008	1.804E-007	2.972E-007	1.557E-007
4.0	9.796E-008	2.288E-007	3.770E-007	1.974E-007

5.0	1.164E-007	2.720E-007	4.483E-007	2.348E-007
6.0	1.329E-007	3.105E-007	5.117E-007	2.680E-007
7.0	1.475E-007	3.446E-007	5.679E-007	2.974E-007
8.0	1.604E-007	3.746E-007	6.173E-007	3.233E-007
9.0	1.716E-007	4.009E-007	6.606E-007	3.460E-007
10.0	1.814E-007	4.237E-007	6.982E-007	3.657E-007

Tamanho do passo: 0.05
Número de passos: 200

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
1.0	2.783E-012	6.469E-012	1.064E-011	5.520E-012
2.0	5.316E-012	1.232E-011	2.027E-011	1.048E-011
3.0	7.566E-012	1.757E-011	2.891E-011	1.497E-011
4.0	9.609E-012	2.230E-011	3.668E-011	1.897E-011
5.0	1.142E-011	2.651E-011	4.361E-011	2.256E-011
6.0	1.303E-011	3.025E-011	4.978E-011	2.576E-011
7.0	1.447E-011	3.359E-011	5.526E-011	2.858E-011
8.0	1.573E-011	3.651E-011	6.006E-011	3.107E-011
9.0	1.683E-011	3.907E-011	6.427E-011	3.325E-011
10.0	1.780E-011	4.131E-011	6.795E-011	3.513E-011

4.3. $y' = \frac{-y^3}{2}, \quad y(0) = 1$

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{1+x}}$$

Tamanho do passo: 0.1
Número de passos: 100

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
1.0	1.118E-008	4.157E-007	8.825E-007	8.267E-007
2.0	6.942E-009	2.477E-007	5.256E-007	4.916E-007
3.0	4.657E-009	1.642E-007	3.484E-007	3.257E-007
4.0	3.372E-009	1.183E-007	2.510E-007	2.347E-007
5.0	2.579E-009	9.030E-008	1.916E-007	1.791E-007
6.0	2.052E-009	7.177E-008	1.522E-007	1.423E-007
7.0	1.682E-009	5.880E-008	1.247E-007	1.166E-007
8.0	1.411E-009	4.930E-008	1.046E-007	9.775E-008
9.0	1.205E-009	4.211E-008	8.932E-008	8.348E-008
10.0	1.045E-009	3.651E-008	7.744E-008	7.238E-008

Tamanho do passo: 0.01
Número de passos: 1000

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
1.0	1.936E-012	3.705E-011	7.776E-011	7.049E-011
2.0	1.162E-012	2.218E-011	4.655E-011	4.219E-011
3.0	7.718E-013	1.473E-011	3.090E-011	2.801E-011
4.0	5.566E-013	1.062E-011	2.228E-011	2.019E-011
5.0	4.249E-013	8.105E-012	1.701E-011	1.541E-011
6.0	3.378E-013	6.443E-012	1.352E-011	1.225E-011
7.0	2.768E-013	5.278E-012	1.108E-011	1.004E-011
8.0	2.321E-013	4.426E-012	9.288E-012	8.418E-012
9.0	1.982E-013	3.780E-012	7.933E-012	7.190E-012
10.0	1.719E-013	3.278E-012	6.878E-012	6.233E-012

4.4. $y' = \frac{y}{4}\left(\frac{y}{20}-1\right), \quad y(0) = 1$

$$y(x) = \frac{20}{1+19e^{x/4}}$$

Tamanho do passo: 1.0
Número total de passos: 5

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
1.0	5.951E-006	1.348E-005	2.187E-005	1.190E-005
2.0	9.690E-006	2.220E-005	3.616E-005	1.993E-005
3.0	1.174E-005	2.718E-005	4.440E-005	2.473E-005
4.0	1.257E-005	2.935E-005	4.808E-005	2.702E-005
5.0	1.255E-005	2.953E-005	4.849E-005	2.746E-005

Tamanho do passo: 0.1
Número total de passos: 50

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.5	2.763E-010	5.874E-010	9.373E-010	4.364E-010
1.0	4.999E-010	1.068E-009	1.708E-009	8.018E-010
1.5	6.767E-010	1.453E-009	2.329E-009	1.101E-009
2.0	8.126E-010	1.754E-009	2.815E-009	1.339E-009
2.5	9.132E-010	1.980E-009	3.182E-009	1.524E-009
3.0	9.836E-010	2.141E-009	3.447E-009	1.659E-009
3.5	1.028E-009	2.248E-009	3.623E-009	1.753E-009
4.0	1.051E-009	2.307E-009	3.723E-009	1.810E-009
4.5	1.057E-009	2.328E-009	3.761E-009	1.836E-009
5.0	1.049E-009	2.317E-009	3.747E-009	1.837E-009

4.5. $y' = -\sqrt{1-y^2}$, $y(0.1) = \cos(0.1)$

$y(x) = \cos(x)$

Tamanho do passo: 0.1
Número de passos: 10

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	6.141E-005	8.097E-005	1.014E-004	1.736E-005
0.3	1.054E-004	1.393E-004	1.749E-004	2.863E-005
0.4	1.439E-004	1.905E-004	2.393E-004	3.864E-005
0.5	1.795E-004	2.377E-004	2.985E-004	4.799E-005
0.6	2.127E-004	2.816E-004	3.537E-004	5.677E-005
0.7	2.433E-004	3.222E-004	4.046E-004	6.494E-005
0.8	2.714E-004	3.593E-004	4.513E-004	7.242E-005
0.9	2.966E-004	3.927E-004	4.932E-004	7.915E-005
1.0	3.188E-004	4.221E-004	5.301E-004	8.507E-005

Tamanho do passo: 0.01
Número de passos: 100

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	1.387E-008	1.929E-008	2.500E-008	4.368E-010
0.3	2.273E-008	3.162E-008	4.096E-008	7.143E-010
0.4	3.062E-008	4.258E-008	5.514E-008	9.765E-010
0.5	3.798E-008	5.280E-008	6.837E-008	1.227E-009
0.6	4.487E-008	6.237E-008	8.075E-008	1.463E-009
0.7	5.127E-008	7.126E-008	9.226E-008	1.682E-009
0.8	5.713E-008	7.941E-008	1.028E-007	1.882E-009
0.9	6.242E-008	8.675E-008	1.123E-007	2.062E-009
1.0	6.707E-008	9.321E-008	1.207E-007	2.219E-009

4.4 Considerações

O comportamento apresentado pelos problemas de valor inicial escalares autônomos da seção 4.3 é equivalente ao constado nos demais problemas testes escalares por nós considerados, que são os utilizados pela maioria dos pesquisadores e encontrados na literatura.

Quanto à precisão atingida, conforme pode ser observado nas tabelas anteriores, existe plena equivalência entre os métodos de Evans e os métodos de Runge-Kutta. Pois, ao trabalharmos com um mesmo tamanho de passo ambos alcançaram a



mesma ordem de precisão. Em relação ao esforço computacional, isto é, o número de avaliações da função $f(y(x))$, é o mesmo para os métodos de Evans e de Runge-Kutta, pois todos são de ordem 4 e tem 4 estágios. Ou seja, a cada passo de integração são realizadas 4 avaliações da função. No entanto, a integração numérica através dos métodos de Evans envolve no cálculo de y_{n+1} mais operações aritméticas do que o método de Runge-Kutta.

Além disso, quando trabalhamos com o método MG, devido às raízes quadradas envolvidas, os produtos $k_i k_{i+1}$, para $i = 1, 2, 3$ devem ser sempre maiores do que zero, e para os métodos MH e MCH devemos ter que $k_i + k_{i+1} \neq 0$, para $i = 1, 2, 3$, pois são fatores que aparecem no denominador.

Quando consideramos a resolução de problemas de valor inicial não escalares, os métodos MG, MH e MCH mostraram-se equivalentes, mas quando comparados com o método de Runge-Kutta constatamos que o método RK mostrou-se mais eficiente, pois para um mesmo tamanho de passo ele fornece uma aproximação com uma maior ordem de precisão. Para ilustrar, consideremos a integração dos pvi's a seguir:

4.6.
$$\begin{cases} y_1' = 1 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = 2(1 - y_1) \operatorname{sen}((1 - y_1)^2) & y_2(0) = 1 \end{cases}$$
$$y_1(x) = 1 + x$$
$$y_2(x) = \cos(x^2)$$

Tamanho do passo: 0.01
Número total de passos: 100

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	3.884E-013	7.496E-007	1.495E-006	1.495E-006
0.4	6.183E-012	2.984E-006	5.963E-006	5.963E-006
0.6	3.054E-011	6.573E-006	1.314E-005	1.314E-005
0.8	9.019E-011	1.103E-005	2.207E-005	2.207E-005
1.0	1.894E-010	1.530E-005	3.060E-005	3.060E-005

4.7.
$$\begin{cases} y_1' = y_1 - y_2 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = 5y_1 - 3y_2 & y_2(0) = 2 \end{cases}$$
$$y_1(x) = \cos(x)e^{-x}$$
$$y_2(x) = (2\cos(x) + \operatorname{sen}(x))e^{-x}$$

Tamanho do passo: 0.01
Número total de passos: 200

x	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.4	1.865E-010	3.009E-006	6.011E-006	6.041E-006
0.8	3.428E-010	2.370E-006	4.736E-006	4.760E-006
1.2	3.835E-010	1.389E-006	2.776E-006	2.790E-006
1.6	3.234E-010	7.371E-007	1.472E-006	1.480E-006
2.0	2.119E-010	5.233E-007	1.045E-006	1.051E-006

4.8.
$$\begin{cases} y_1' = e^{-y_1} & y_1(0) = 0 \\ y_2' = e^{y_1-1} & y_2(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = \ln(1+x)$$

$$y_2(x) = e^x$$

Tamanho do passo: 0.01
Número total de passos: 100

X	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	5.577E-011	8.869E-007	1.772E-006	1.777E-006
0.4	1.005E-010	1.889E-006	3.777E-006	3.785E-006
0.6	1.393E-010	3.042E-006	6.081E-006	6.093E-006
0.8	1.751E-010	4.382E-006	8.761E-006	8.777E-006
1.0	2.096E-010	5.955E-006	1.190E-005	1.192E-005

4.9.
$$\begin{cases} y_1' = y_1 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = y_2 - y_3 & y_2(0) = 1 \\ y_3' = y_2 + y_3 & y_3(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = e^x$$

$$y_2(x) = e^x(\cos(x) - \text{sen}(x))$$

$$y_3(x) = e^x(\cos(x) + \text{sen}(x))$$

Tamanho do passo: 0.01
Número total de passos: 100

X	Erro absoluto			
	RK	MG	MH	MCH
0.2	1.585E-010	3.812E-005	5.621E-005	5.603E-005
0.4	1.506E-010	4.872E-005	7.441E-005	7.415E-005
0.6	5.999E-010	5.800E-005	9.076E-005	9.042E-005
0.8	8.375E-010	6.563E-005	1.052E-004	1.047E-004
1.0	1.504E-009	7.062E-005	1.164E-004	1.159E-004

Estes resultados nos permitem concluir que os métodos de Evans não são competitivos com o método de Runge-Kutta considerado, quando pretendemos integrar sistemas de equações diferenciais ordinárias.

Os métodos de Evans são úteis quando utilizados para a resolução de problemas do tipo $y' = Ay$, pois permitem estimar o erro de truncamento local com um pequeno esforço computacional, o que não acontece com os métodos de Runge-Kutta, quando considerados isoladamente.



APÍTULO 5

INTEGRAÇÃO A PASSO VARIÁVEL: RESULTADOS NUMÉRICOS

5.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos algumas técnicas para o controle do tamanho do passo de integração e alguns resultados numéricos, obtidos quando integramos problemas de valor inicial através do par RKF(4,5) e do método GBS com integração a passo variável.

5.2 Integração a passo variável

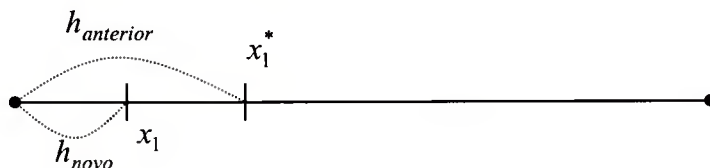
Quando trabalhamos com integração a passo variável, necessitamos de ferramentas eficientes para estimar o erro de truncamento local a cada passo.

No caso dos métodos de Runge-Kutta, vimos na seção 1.6, que uma maneira eficiente de se estimar o erro é considerar pares de métodos embutidos, em particular o par de métodos RKF(4,5).

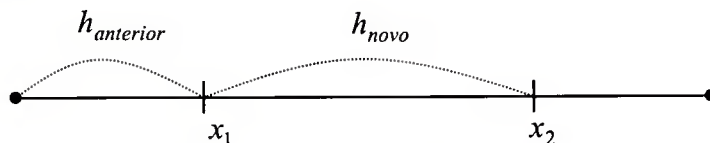
De acordo com esta estimativa, o tamanho do passo de integração pode ser aumentado ou diminuído a fim de se alcançar a precisão exigida para a aproximação no ponto desejado. Para isso algumas estratégias para o controle do tamanho do passo podem ser consideradas, dentre as quais destacamos duas.

Uma técnica bastante conhecida é a seguinte:

- Se $\| \text{estimativa do erro} \| \geq (\text{precisão desejada})$ o passo deve ser rejeitado e um novo tamanho de h deve ser considerado onde, $h_{\text{novo}} = 0.5 \times h_{\text{anterior}}$. Isto é, devemos substituir a aproximação calculada no ponto $x_1^* = x_0 + h_{\text{anterior}}$, por uma nova aproximação no ponto $x_1 = x_0 + h_{\text{novo}}$. Vejamos a ilustração.



- Se $\| \text{estimativa do erro} \| < (\text{precisão desejada})$ o passo deve ser aceito, e o tamanho do próximo passo será $h_{\text{novo}} = 2 \times h_{\text{anterior}}$. Isto é, considera-se válida a aproximação no ponto $x_1 = x_0 + h_{\text{anterior}}$, e calcula-se a aproximação no ponto $x_2 = x_1 + h_{\text{novo}}$, conforme mostra a ilustração.



A desvantagem desta técnica é que o passo aumenta ou diminui sempre considerando os valores constantes 2 ou 0.5, respectivamente, o que pode acarretar redução desnecessária do tamanho do passo, ou então aumento que pode causar rejeição no passo seguinte.

Uma outra técnica mais elaborada, utilizada por Shampine [27] e [28] considera o aumento ou a diminuição do tamanho do passo proporcionalmente ao valor da estimativa do erro. Esta técnica mostrou-se mais eficiente, e portanto foi por nós considerada para o par de métodos RKF(4,5)

No caso do método GBS uma maneira natural de controlar a precisão é comparar dois valores sucessivos, obtidos através da extrapolação. A diferença entre eles resultará em uma boa estimativa para o erro. Para controlar o tamanho do passo de integração pode-se utilizar a seguinte técnica, proposta por Bulirsch e Stoer [03].

Seja m o número de linhas de (3.14) necessárias para atingir uma determinada precisão, e h_0 o tamanho do passo inicial. Supondo que para o passo inicial o valor m é aproximadamente 6, temos a seguinte regra para os próximos passos:

- Se $m \geq 7$, o próximo passo deve ser diminuído de acordo com a seguinte regra:

$$h_0 \leftarrow 0.9 \cdot (0.6)^{m-7} \cdot h_0$$

- Se $m < 7$, podemos aumentar o passo seguinte:

$$h_0 \leftarrow 1.5 \cdot h_0$$

5.3 Alguns problemas para teste

Considerando o desempenho apresentado pelos métodos de Evans, quando trabalhamos com integração a passo fixo, conforme resultados apresentados no capítulo anterior, os mesmos não serão aqui considerados. Assim, apresentamos uma avaliação de desempenho computacional do método de Runge-Kutta de ordem 4 que compõe o par RKF(4,5) e do método GBS com extrapolação polinomial ou racional. Para isso consideramos vários problemas de valor inicial, cuja solução exata é conhecida, em especial os encontrados na literatura pertinente.

Dentre esses problemas, relacionaremos alguns, a seguir, que traduzem o desempenho dos métodos avaliados.

5.1. $y' = \frac{-y^3}{2}, \quad y(0) = 1$



$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{1+x}}$$

5.2. $y' = (4x-1)(8x^2 - 2x + 8) - 2xy$, $y(0) = 2$

$$y(x) = e^{-x^2} + 16\left(x - \frac{1}{4}\right)^2$$

5.3. $y' = x(1-y) + (1-x)e^{-x}$, $y(0) = 1$

$$y(x) = e^{-(x^2/2)} - e^{-x} + 1$$

5.4. $y' = y \cos(x)$, $y(0) = 1$

$$y(x) = e^{\sin(x)}$$

5.5. $y' = 2x(y + yx^2)$, $y(2) = 3$

$$y(x) = \sqrt{9 + 2 \ln\left(\frac{1+x^2}{5}\right)}$$

5.6. $y' = -y$, $y(0) = 1$

$$y(x) = e^{-x}$$

5.7. $y' = -2xy$, $y(0) = 1$

$$y(x) = e^{-x^2}$$

5.8. $y' = \sin(x) - y$, $y(0) = 0.5$

$$y(x) = \frac{1}{2}(\sin(x) - \cos(x)) + e^{-x}$$

5.9.
$$\begin{cases} y_1' = -2y_1 + y_2 + 2\sin(x) \\ y_2' = y_1 - 2y_2 + 2(\cos(x) - \sin(x)) \end{cases} \quad \begin{matrix} y_1(0) = 2 \\ y_2(0) = 3 \end{matrix}$$

$$y_1(x) = 2e^{-x} + \sin(x)$$

$$y_2(x) = 2e^{-x} + \cos(x)$$

$$5.10. \quad \begin{cases} y_1' = y_1 - y_2 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = 5y_1 - 3y_2 & y_2(0) = 2 \end{cases}$$

$$y_1(x) = \cos(x)e^{-x}$$

$$y_2(x) = (2\cos(x) + \sin(x))e^{-x}$$

$$5.11. \quad \begin{cases} y_1' = 4y_1 + 5y_2 + 4e^x \cos(x) & y_1(0) = 0 \\ y_2' = -2y_1 - 2y_2 & y_2(0) = 0 \end{cases}$$

$$y_1(x) = 2(x\cos(x) + \sin(x))e^{-x}$$

$$y_2(x) = -4x\sin(x)e^{-x}$$

$$5.12. \quad \begin{cases} y_1' = y_2 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = -y_1 - 2y_2 & y_2(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = (1 + 2x)e^{-x}$$

$$y_2(x) = (1 - 2x)e^{-x}$$

$$5.13. \quad \begin{cases} y_1' = 3y_1 - 4y_2 + e^x & y_1(0) = 1 \\ y_2' = y_1 - y_2 + e^x & y_2(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = (1 - x - x^2)e^x$$

$$y_2(x) = (1 - 0.5x^2)e^x$$

$$5.14. \quad \begin{cases} y_1' = y_2 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = -100y_1 + 99\sin(x) & y_2(0) = 11 \end{cases}$$

$$y_1(x) = \cos(10x) + \sin(10x) + \sin(x)$$

$$y_2(x) = \cos(x) + 10\cos(10x) - 10\sin(10x)$$

$$5.15. \quad \begin{cases} y_1' = e^{-y_1} & y_1(0) = 0 \\ y_2' = e^{(e^{y_1} - 1)} & y_2(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = \ln(1 + x)$$

$$y_2(x) = e^x$$

$$5.16. \quad \begin{cases} y_1' = y_2 & y_1(0) = 0 \\ y_2' = x - y_1 & y_2(0) = 2 \end{cases}$$

$$y_1(x) = x + \operatorname{sen}(x)$$

$$y_2(x) = 1 + \cos(x)$$

$$5.17. \quad \begin{cases} y_1' = y_2 & y_1(1) = 0 \\ y_2' = \frac{\ln(x) - xy_2 - y_1}{x^2} & y_2(1) = 2 \end{cases}$$

$$y_1(x) = \ln(x) + \operatorname{sen}(\ln(x))$$

$$y_2(x) = \frac{1}{x}(1 + \cos(\ln(x)))$$

$$5.18. \quad \begin{cases} y_1' = y_2 & y_1(0) = 0 \\ y_2' = \frac{-2 - y_1}{4} & y_2(0) = 0.5 \end{cases}$$

$$y_1(x) = -2 + 2\cos(x/2) + \operatorname{sen}(x/2)$$

$$y_2(x) = -\operatorname{sen}(x/2) + (1/2)\cos(x/2)$$

$$5.19. \quad \begin{cases} y_1' = y_1 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = y_2 - y_3 & y_2(0) = 1 \\ y_3' = y_2 + y_3 & y_3(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = e^x$$

$$y_2(x) = e^x(\cos(x) - \operatorname{sen}(x))$$

$$y_3(x) = e^x(\cos(x) + \operatorname{sen}(x))$$

$$5.20. \quad \begin{cases} y_1' = 2y_1 + y_3 + e^{2x} & y_1(0) = 1 \\ y_2' = 2y_2 & y_2(0) = 1 \\ y_3' = y_2 + 3y_3 + e^{2x} & y_3(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = 3e^{3x} - 2e^{2x} - xe^{2x}$$

$$y_2(x) = e^{2x}$$

$$y_3(x) = 3e^{3x} - 2e^{2x}$$

$$5.21. \begin{cases} y_1' = y_1 - y_2 - y_3 + e^{3x} & y_1(0) = 0 \\ y_2' = y_1 + 3y_2 + y_3 - e^{3x} & y_2(0) = 0 \\ y_3' = -3y_1 + y_2 - y_3 - e^{3x} & y_3(0) = 0 \end{cases}$$

$$y_1(x) = xe^{3x}$$

$$y_2(x) = -xe^{3x}$$

$$y_3(x) = -xe^{3x}$$

$$5.22. \begin{cases} y_1' = 3y_1 + y_2 - y_3 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = y_1 + 3y_2 - y_3 & y_2(0) = -2 \\ y_3' = 3y_1 + 3y_2 - y_3 & y_3(0) = -1 \end{cases}$$

$$y_1(x) = e^{2x}$$

$$y_2(x) = -2e^{2x}$$

$$y_3(x) = -e^{2x}$$

$$5.23. \begin{cases} y_1' = 3y_1 + y_2 - 2y_3 & y_1(1) = 1 \\ y_2' = -y_1 + 2y_2 + y_3 & y_2(1) = 4 \\ y_3' = 4y_1 + y_2 - 3y_3 & y_3(1) = -7 \end{cases}$$

$$y_1(x) = 9e^{x-1} + (4/3)(-7e^{-x+1} + e^{2x-2})$$

$$y_2(x) = (4/3)(2e^{-x+1} + e^{2x-2})$$

$$y_3(x) = 9e^{x-1} + (4/3)(-13e^{-x+1} + e^{2x-2})$$

$$5.24. \begin{cases} y_1' = y_1 + 2y_2 - 3y_3 & y_1(1) = 1 \\ y_2' = y_1 + y_2 + 2y_3 & y_2(0) = 0 \\ y_3' = y_1 - y_2 + 4y_3 & y_3(0) = 0 \end{cases}$$

$$y_1(x) = (1-x)e^{2x}$$

$$y_2(x) = xe^{2x}$$

$$y_3(x) = xe^{2x}$$

Como subsídio para avaliação, visando facilitar a formulação de conclusões, apresentamos a seguir, os respectivos gráficos de cada uma das componentes da solução exata desses 24 problemas:

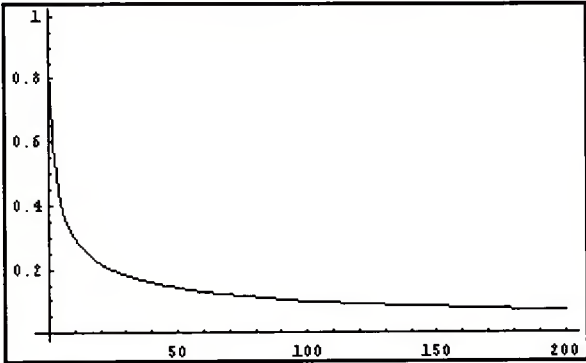


Gráfico - pvi 5.1

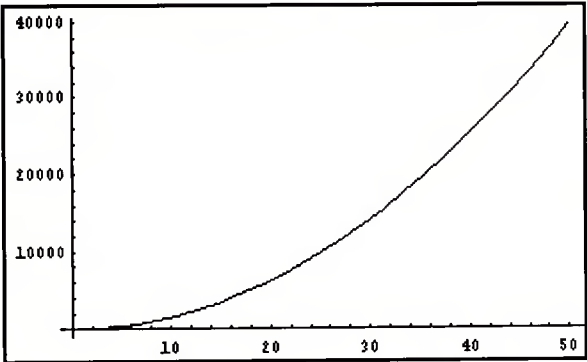


Gráfico - pvi 5.2

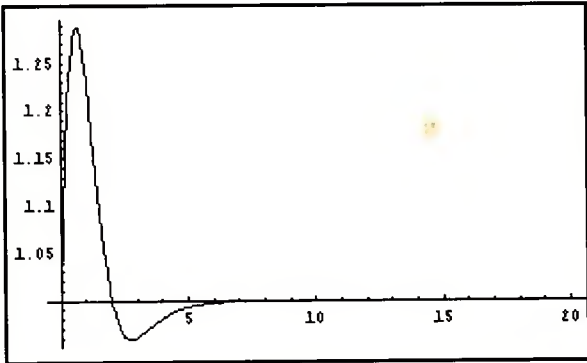


Gráfico - pvi 5.3

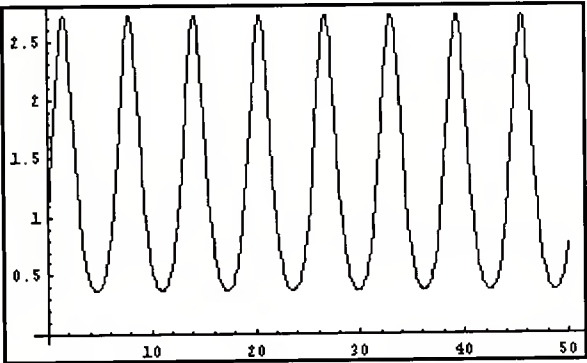


Gráfico - pvi 5.4

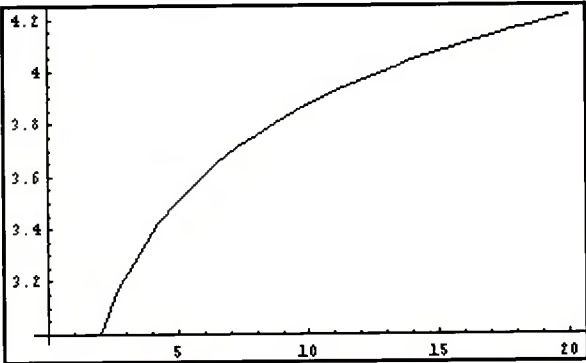


Gráfico - pvi 5.5

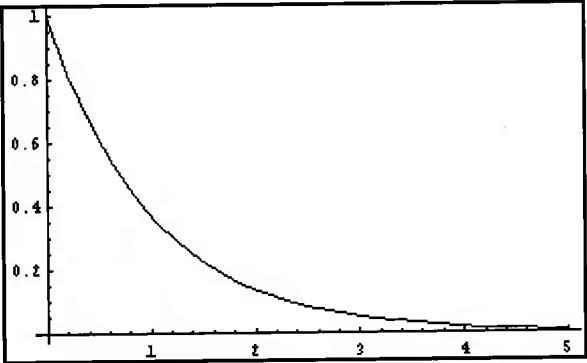


Gráfico - pvi 5.6

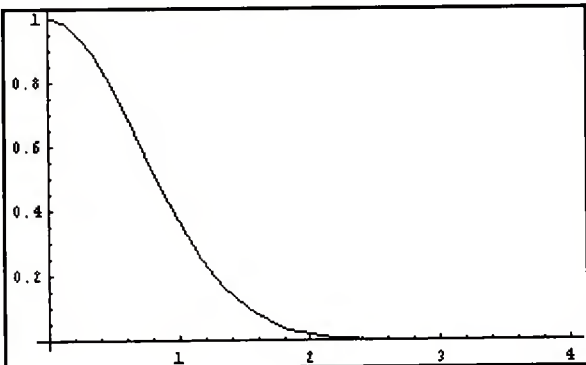


Gráfico - pvi 5.7

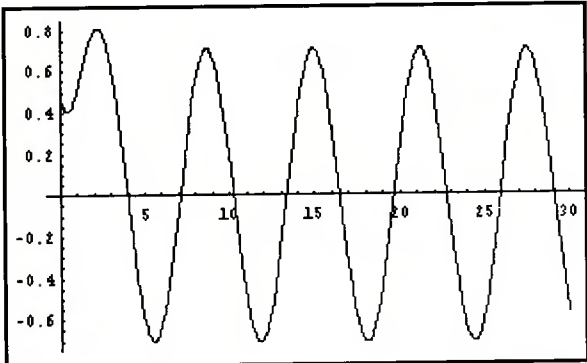
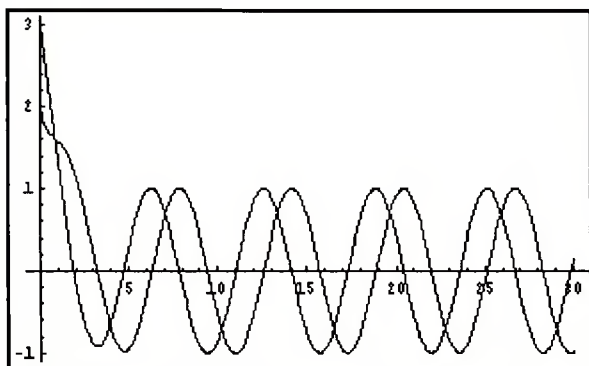
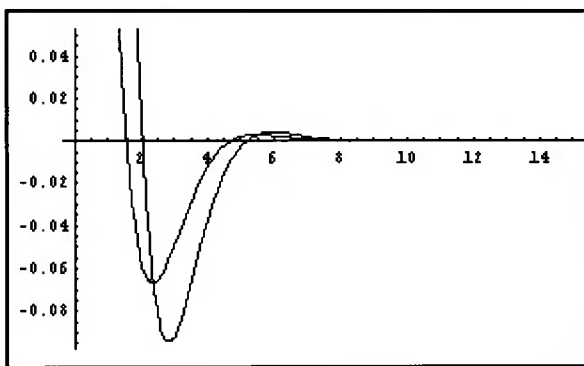


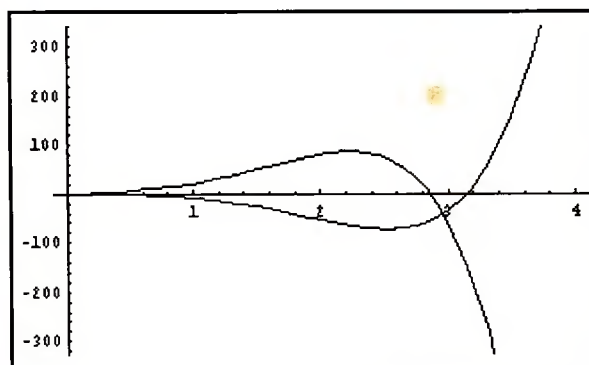
Gráfico - pvi 5.8



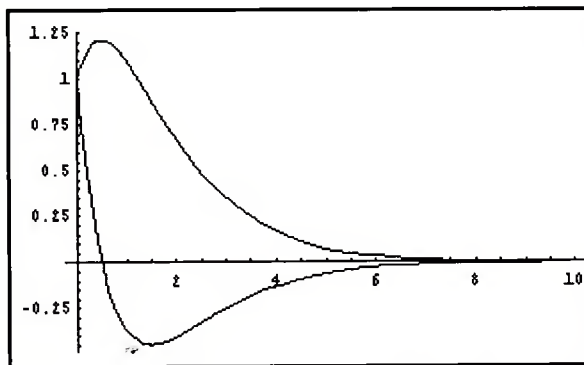
Gráficos - pvi 5.9



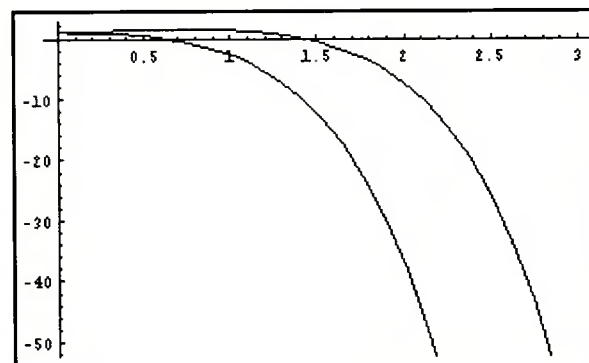
Gráficos - pvi 5.10



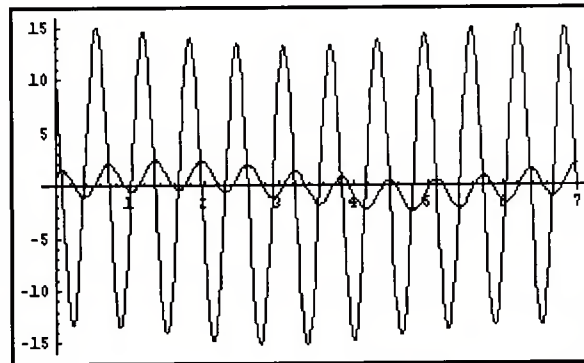
Gráficos - pvi 5.11



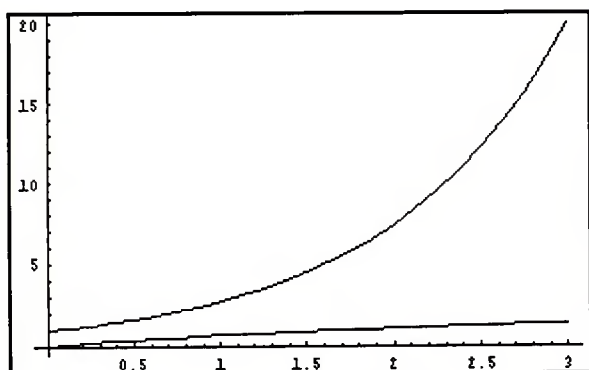
Gráficos - pvi 5.12



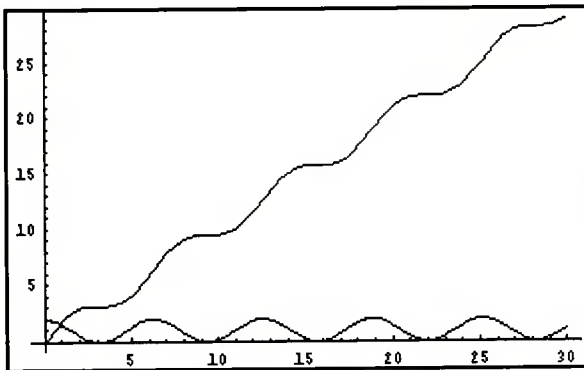
Gráficos - pvi 5.13



Gráficos - pvi 5.14



Gráficos - pvi 5.15



Gráficos - pvi 5.16

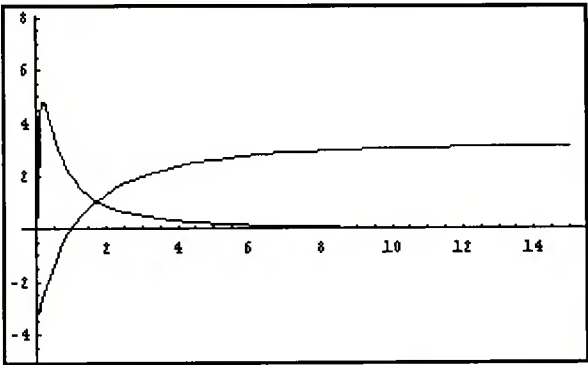


Gráfico - pvi 5.17

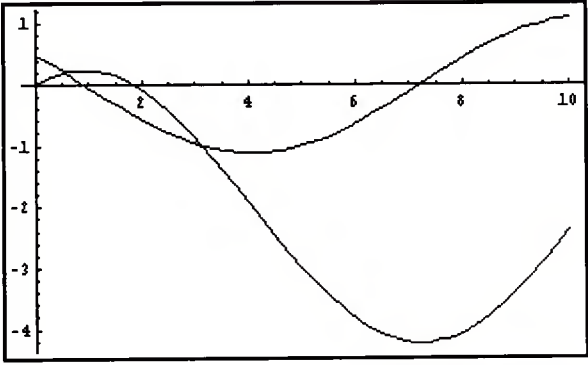


Gráfico - pvi 5.18

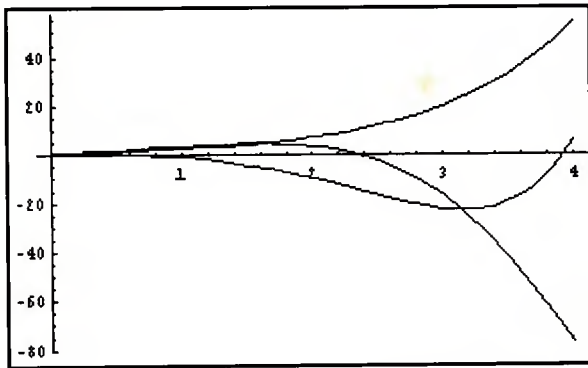


Gráfico - pvi 5.19

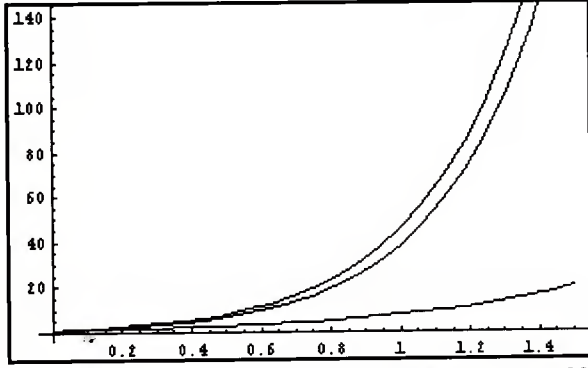


Gráfico - pvi 5.20

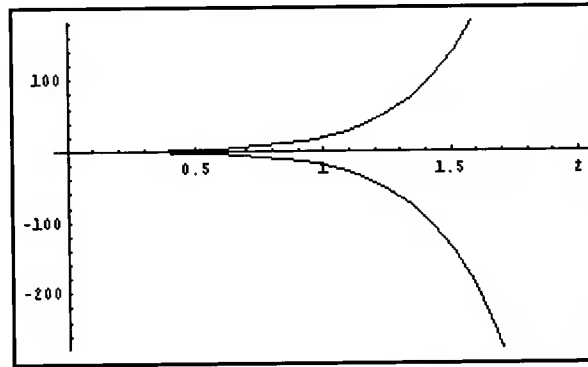


Gráfico - pvi 5.21

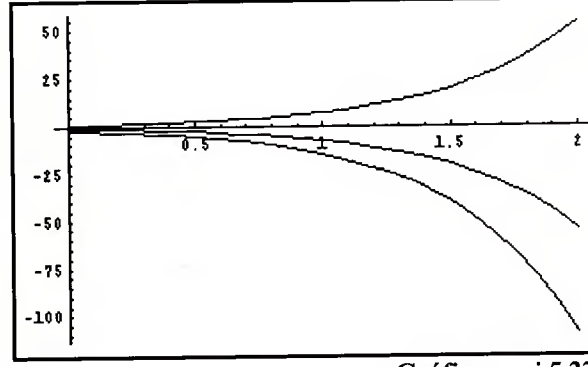


Gráfico - pvi 5.22

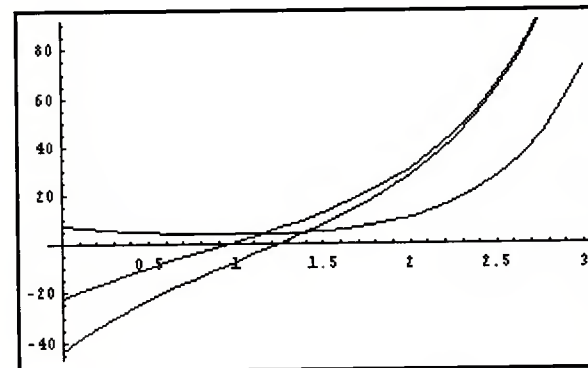


Gráfico - pvi 5.23

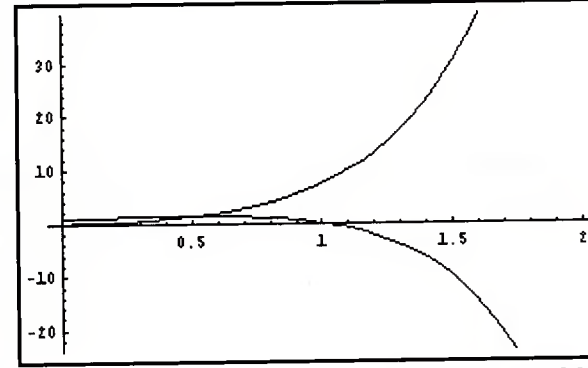


Gráfico - pvi 5.24

As tabelas a seguir apresentam a norma do erro absoluto e o número de avaliações da função $f(x,y)$ para a resolução de cada um dos pvi's dados, considerando-se os métodos RKF(4,5), GBS com extrapolação polinomial (GBS-pol) e GBS com extrapolação racional (GBS-rac), integrando-se a passo variável. O objetivo principal dos resultados que seguem, é mostrar de forma comparativa o desempenho desses métodos, em especial quanto ao número de avaliações da função, quando se exige uma determinada precisão, em um ponto final x_f .

PVI 5.1

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	200.0	2.9902224E-009	522
GBS – pol.	200.0	6.0588739E-009	335
GBS – rac.	200.0	2.1752091E-009	305

PVI 5.2

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	50.0	3.7644945E-009	109884
GBS – pol.	50.0	1.0801706E-009	71408
GBS – rac.	50.0	7.1104829E-009	43318

PVI 5.3

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	20.0	5.2984465E-010	1422
GBS – pol.	20.0	8.5342781E-010	3354
GBS – rac.	20.0	2.3046455E-010	2902

PVI 5.4

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	50.0	1.4890533E-007	4818
GBS – pol.	50.0	1.8059288E-008	2727
GBS – rac.	50.0	2.4951893E-008	2657

PVI 5.5

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	20.0	8.7768604E-009	204
GBS – pol.	20.0	5.5911914E-009	100
GBS – rac.	20.0	7.6243204E-009	100

PVI 5.6

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	5.0	5.0328661E-009	372
GBS – pol.	5.0	2.2780037E-009	170
GBS – rac.	5.0	1.6046328E-009	146

PVI 5.7

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	10.0	4.7523945E-010	780
GBS – pol.	10.0	6.4924574E-010	1536
GBS – rac.	10.0	2.3680906E-010	1474

PVI 5.8

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	50.0	7.5738995E-009	4698
GBS – pol.	50.0	3.0574695E-009	1783
GBS – rac.	50.0	1.6068922E-009	1520

PVI 5.9

Método	xf	Erro absoluto ^r	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	30.0	6.8564102E-009	10800
GBS – pol.	30.0	1.6933313E-010	6452
GBS – rac.	30.0	2.2096315E-010	4840

PVI 5.10

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	100.0	1.5618964E-009	2304
GBS – pol.	100.0	5.0320354E-010	4294
GBS – rac.	100.0	1.3323220E-010	3898

PVI 5.11

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	3.0	1.8593516E-007	2004
GBS – pol.	3.0	7.1223006E-008	546
GBS – rac.	3.0	6.6397257E-009	430

PVI 5.12

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	100.0	5.6818349E-011	2064
GBS – pol.	100.0	7.9597332E-010	3100
GBS – rac.	100.0	6.4198952E-010	2972



PVI 5.13

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	3.0	7.5136241E-007	1932
GBS – pol.	3.0	1.1748084E-008	896
GBS – rac.	3.0	7.8591181E-008	374

PVI 5.14

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	15.0	5.5449179E-007	50400
GBS – pol.	15.0	5.2002507E-008	30506
GBS – rac.	15.0	1.3375611E-009	11912

PVI 5.15

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	3.0	3.6520637E-008	780
GBS – pol.	3.0	1.0745872E-008	540
GBS – rac.	3.0	1.5941667E-008	290

PVI 5.16

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	30.0	3.5941134E-007	6540
GBS – pol.	30.0	3.5436827E-008	2806
GBS – rac.	30.0	1.2505943E-008	1940

PVI 5.17

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	100.0	2.3205952E-009	1188
GBS – pol.	100.0	2.2201807E-009	1480
GBS – rac.	100.0	1.5591971E-009	944

PVI 5.18

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	10.0	8.9548578E-008	1200
GBS – pol.	10.0	1.4900041E-008	1180
GBS – rac.	10.0	1.1824219E-008	642

PVI 5.19

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	3.0	3.8873087E-007	2034
GBS – pol.	3.0	7.0932625E-008	573
GBS – rac.	3.0	4.0180087E-007	474

PVI 5.20

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	1.5	8.6028982E-006	1872
GBS – pol.	1.5	1.0477493E-007	573
GBS – rac.	1.5	6.6565574E-008	474

PVI 5.21

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	2.0	5.4330728E-006	4356
GBS – pol.	2.0	1.0477493E-007	819
GBS – rac.	2.0	3.9041490E-008	573

PVI 5.22

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	2.0	8.0262475E-007	2358
GBS – pol.	2.0	1.4160686E-007	573
GBS – rac.	2.0	1.7866076E-007	348

PVI 5.23

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. da função
RKF(4,5)	2.0	7.2472826E-008	936
GBS – pol.	2.0	8.4491780E-010	336
GBS – rac.	2.0	1.0313172E-010	237

PVI 5.24

Método	xf	Erro absoluto	N.º de aval. Da função
RKF(4,5)	2	1.3127113E-007	2646
GBS – pol.	2	6.6324250E-007	573
GBS – rac.	2	7.1087253E-010	474

Esses resultados nos permitem afirmar que o método de Runge-Kutta do par RKF(4,5) e o método GBS (com extrapolação polinomial ou racional) fornecem aproximações com a precisão desejada. Assim, sob esse aspecto se equivalem.

Porém, se olharmos para o esforço computacional e aí avaliarmos o número de avaliações da função $f(x,y)$ necessárias para completar a integração, concluímos que o método GBS com extrapolação racional apresenta um desempenho bem melhor do que o mesmo método com extrapolação polinomial e do que o método do par RKF(4,5), para a maioria dos problemas.

Outros aspectos podem ser considerados e serão abordados no capítulo final.

APÍTULO 6

RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS COM SAÍDA DENSE

6.1 Introdução

Avaliaremos neste capítulo a utilização do par RKF(4,5) e do método GBS para a integração de problemas de valor inicial com saída densa. Ou seja, problemas onde se deseja obter uma aproximação para a solução exata em diversos pontos muito próximos entre si no intervalo de integração.

O método de Horn [18], é uma ferramenta disponível e bastante indicada para a resolução de problemas com saída densa. Mostraremos a vantagem de se trabalhar com esse método quando integramos esse tipo de problema, bem como resolveremos através dele o problema do movimento de dois corpos, mostrando aí sua eficiência.



6.2 O problema com saída densa

Conforme visto na seção 5.3, quando integramos o problema 5.6, para a obtenção de uma aproximação no ponto final $x_f = 5.0$, com 8 casas de precisão, obtivemos os seguintes resultados quanto ao número de avaliações da função:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	372
GBS – pol	170
GBS – rac	146

Suponhamos agora que para o mesmo pvi desejamos encontrar aproximações para a solução em vários pontos internos ao intervalo $I = [0,5]$, ou seja, vamos considerá-lo como um problema com saída densa.

Integrando através dos métodos RKF(4,5) e GBS com extrapolação polinomial (GBS-pol) e racional (GBS-rac), exigindo-se também 8 casas de precisão, considere a necessidade de calcularmos aproximações para solução em:

- 10 pontos: 0.5, 1.125, 2.075, 2.673, 3.0, 3.6, 3.9, 4.045, 4.7 e 5. Obtemos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	408
GBS – pol	244
GBS – rac	217

- 20 pontos: 0.5, 0.75, 1.425, 2, 2.7, 3.4, 3.75, 4.045, 4.2, 4.3, 4.4, 4.52, 4.6, 4.7, 4.75, 4.83, 4.9, 4.95, 4.975 e 5. Obtemos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	432
GBS – pol	311
GBS – rac	261

- 50 pontos, igualmente espaçados, temos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	498
GBS - pol	561
GBS - rac	561

□ 100 pontos, igualmente espaçados, obtemos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	600
GBS - pol	800
GBS - rac	800

Como se esperava, podemos observar nas tabelas anteriores, que a integração através do par RKF(4,5) e dos métodos GBS-pol e GBS-rac, tiveram um aumento no número de avaliações da função, proporcional ao crescimento do número de pontos em que foram calculadas as aproximações.

Isto ocorreu devido ao fato de que o tamanho do passo de integração sofre reduções para se ajustar a cada ponto em que a aproximação é exigida. Isto é, não é possível trabalhar em todo o intervalo com um “passo de tamanho ótimo”, fazendo com que o número total de passos realizados até que se atinja o ponto final seja maior, aumentando consequentemente o número de avaliações da função.

Podemos observar também que à medida que aumentamos o número de pontos em que se deseja a solução, o método de Runge-Kutta tende a exigir um número menor de avaliações da função, quando comparado ao método GBS. Por exemplo, quando passamos de 20 para 50 pontos, o método de Runge-Kutta mostrou-se mais competitivo, acentuando a diferença entre o número de avaliações da função exigida por cada método quando consideramos 100 pontos. Provavelmente, a forma de controle do erro de truncamento local e a maior flexibilidade no controle do tamanho do passo, estão diretamente ligados a este fato.

Ainda para a situação em que exigimos a obtenção de uma aproximação em 100 pontos igualmente espaçados no intervalo $I = [0,5]$, pudemos constatar que tanto o método de Runge-Kutta quanto os métodos GBS integraram o pvi como se estivessem trabalhando com tamanho do passo fixo. Isto é, a cada intervalo com amplitude $h = 0.05$, o método de Runge-Kutta realizou 6 avaliações da função totalizando portanto 600 avaliações de $f(x,y)$. Porém, no método GBS, para que fosse possível estimar o erro, foi necessário calcular pelo menos T_{00} e T_{10} , consequentemente a cada intervalo com amplitude $h = 0.05$ foram necessárias 8 avaliações da função, totalizando portanto 800 avaliações.



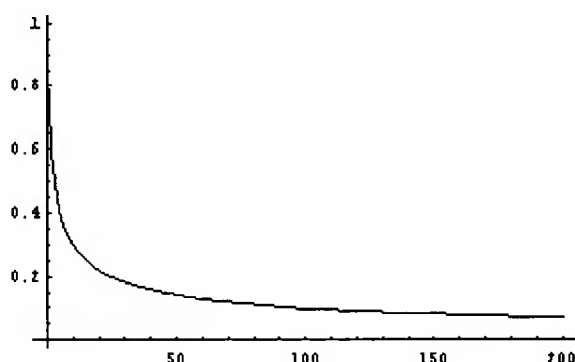
6.3 Considerações

Cabe aqui registrar, que os resultados apresentados para o pvi 5.6 não podem ser considerados como padrões para o comportamento do par RKF(4,5) e dos métodos GBS-pol e GBS-rac, quando se resolvem problemas com saída densa. O aumento do número de avaliações da função pode não estar relacionado somente com o número de pontos onde se deseja a solução. Outros fatores, tais como o comportamento diferenciado das componentes da solução exata em diferentes subintervalos do intervalo de integração podem acarretar uma maior rejeição de passos, provocando um aumento no número de avaliações da função.

Por exemplo, se integrarmos um pvi com saída densa em um subintervalo onde a curva da solução exata tem um comportamento “suave”, constatamos um maior crescimento no número total de passos realizados. Isto ocorre devido ao fato de que o método deixa de trabalhar com um “tamanho de passo ótimo” e passa a trabalhar com um tamanho do passo menor do que o permitido pelo método para obter a solução nos diversos pontos deste subintervalo.

Porém, se a maioria dos pontos em que se exige a obtenção de aproximações estiverem em subintervalos onde a curva da solução exata apresenta um comportamento tal que, independente de se trabalhar com saída densa ou não, são exigidos pelo método passos de tamanho pequeno, o aumento no número total de passos torna-se menor.

Para exemplificar esta situação, consideramos a integração do pvi 5.1 através do código RKF(4,5), cujo gráfico da solução exata é dado por:



Quando exigimos a aproximação para a solução exata, com 8 casas de precisão, em:

□ $x_f = 200$, obtemos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	522

□ 20 pontos {1.15, 1.345, 1.7, 2, 2.125, 2.4, 2.7, 3.9, 5, 5.6, 5.7, 6, 6.3, 6.4, 6.8, 7.3, 7.5, 8, 9, 200 }, onde a maioria destes estão no subintervalo [1.15,9.0], temos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	570

□ 20 pontos {150.7, 160, 161, 170, 170.3, 170.7, 170.94, 173, 173.7, 174, 177.3, 180.1, 180.3, 180.52, 181, 181.32, 181.6, 182.4, 185.3, 200}, onde a curva é mais suave, obtemos:

Método	N.º de aval. da função
RKF45	628

Cabe registrar, que os exemplos aqui apresentados como ilustração são para pvi's escalares e considerando um número pequeno de pontos onde se exigiu a aproximação. No entanto, à medida que trabalhamos com sistemas com um número maior de equações e exigimos aproximações em um número maior de pontos internos ao intervalo de integração, o custo computacional do par RKF(4,5) e do método GBS, pode se tornar muito elevado.

Nessas situações esses métodos não são os mais indicados para a resolução de problemas com saída densa, tornando conveniente a utilização de outras ferramentas numéricas. Por exemplo, o método de Horn [18] que é um método de Runge-Kutta com extensão contínua, que permite encontrar aproximações em vários pontos internos ao intervalo de integração com um esforço computacional mínimo.

6.4 O método de Horn

Trabalhando a partir do método de Fehlberg (RKF(4,5)), que é um par de fórmulas de Runge-Kutta embutidas e explícitas com ordens 4 e 5 respectivamente, Horn

[18] construiu um método que apresenta um fator de escala α , com $0 < \alpha \leq 1$, cujos coeficientes são representados através da seguinte matriz de Butcher:

0							
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$						
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$					
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$				
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$			
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$		
$\frac{1}{\alpha}$	$\frac{1}{6\alpha}$	0	0	0	$\frac{1}{6\alpha}$	$\frac{2}{3\alpha}$	
	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$-\frac{1}{5}$	0	0
	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$	0
	$\beta_1(\alpha)$	0	$\beta_3(\alpha)$	$\beta_4(\alpha)$	$\beta_5(\alpha)$	$\beta_6(\alpha)$	$\beta_7(\alpha)$

onde

$$\beta_1(\alpha) = 1 - \alpha \left(\frac{301}{120} + \alpha \left(-\frac{269}{108} + \alpha \frac{311}{360} \right) \right)$$
$$\beta_3(\alpha) = \alpha \left(\frac{7168}{1425} + \alpha \left(-\frac{4096}{513} + \alpha \frac{14848}{4275} \right) \right)$$
$$\beta_4(\alpha) = \alpha \left(-\frac{28561}{8630} + \alpha \left(\frac{19992}{22572} - \alpha \frac{371293}{75240} \right) \right)$$
$$\beta_5(\alpha) = \alpha \left(\frac{57}{50} + \alpha \left(-3 + \alpha \frac{42}{25} \right) \right)$$
$$\beta_6(\alpha) = \alpha \left(-\frac{96}{55} + \alpha \left(\frac{40}{11} - \alpha \frac{102}{55} \right) \right)$$
$$\beta_7(\alpha) = \alpha \left(\frac{3}{2} + \alpha \left(-4 + \alpha \frac{5}{2} \right) \right)$$

Ou seja,

c	A
$c_7(\alpha)$	$a_{7j}(\alpha)$
	b^T
	$(b^*)^T$
	$\beta^T(\alpha)$

para $j = 1(1)6$

onde:

- c , A , b^T e $(b^*)^T$ são os coeficientes do par RKF(4,5);
- $c_7(\alpha)$, $a_{7j}(\alpha)$ para $j=1(1)6$ e $\beta^T(\alpha)$ são os coeficientes encontrados por Horn, necessários para o cálculo da avaliação adicional da função, de modo que as aproximações geradas pelo seu método, atinjam a mesma ordem de precisão do par RKF(4,5).

A grande vantagem na utilização desse método para a resolução de problemas com saída densa está na possibilidade de, após obtermos as aproximações nos pontos gerados naturalmente pelo código, podermos determinar aproximações em pontos adicionais, exigidos pelo usuário, ao custo de apenas uma avaliação adicional da função por cada ponto onde a aproximação é desejada. Ou seja, independente do número de pontos em que se deseja a solução e da distância desses pontos entre si, é possível integrar o pvi considerando “passos de tamanho ótimo”. Vejamos como:

Suponhamos que desejamos gerar aproximações para a solução exata em diversos pontos $x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}, x_{\alpha 3}, \dots$, num certo intervalo $[a, b]$ tal que, $a < x_{\alpha 1} < x_{\alpha 2} < x_{\alpha 3} < \dots \leq b$.

Após um passo inicial, de tamanho h_0 obtém-se uma aproximação no ponto x_1 . Verifica-se então se a aproximação y_1 alcançou a precisão desejada. Na hipótese negativa devemos determinar um novo valor para h_0 e reiniciar o processo. Caso a precisão tenha sido alcançada verifica-se se $x_1 > x_{\alpha 1}$. Em caso afirmativo procede-se da seguinte maneira:

- Calcula-se α_1 :

$$x_{\alpha 1} = x_0 + \alpha_1 h_0 \Rightarrow x_{\alpha 1} = x_0 + \alpha_1 (x_1 - x_0) \Rightarrow \alpha_1 = \frac{x_{\alpha 1} - x_0}{x_1 - x_0}$$

- Calculam-se os pesos $b_i(\alpha_1)$, $i = 1(1)7$ e o valor k_7

- Calcula-se $y_{\alpha 1} = y_0 + \alpha_1 h_0 \sum_{i=1}^7 b_i(\alpha_1) k_i$

Portanto, geramos a aproximação no ponto $x_{\alpha 1}$, com apenas uma avaliação adicional da função, pois as derivadas k_i 's, $i = 1(1)6$ já haviam sido calculadas para se obter y_1 , restando apenas calcular k_7 .

Caso existam outros valores $x_{\alpha i}$'s no subintervalo $[x_0, x_1]$ repete-se o processo, caso contrário prossegue-se a integração a partir do ponto x_1 e aplica-se o processo descrito anteriormente para cada ponto $x_{\alpha i}$ em que se deseja obter uma aproximação.

Consequentemente, trabalhar com o método de Horn para problemas com saída densa, exige um esforço computacional equivalente ao par RKF(4,5) quando calculamos a solução em x_{n+1} partindo de x_n , adicionando-se uma avaliação da função para cada ponto interno ao intervalo $[x_n, x_{n+1}]$, onde se deseja obter uma aproximação para a solução.

Para o pvi 5.6, se exigirmos 8 casas de precisão, obtemos os seguintes resultados em relação ao número total de avaliações da derivada, quando exigimos a aproximação em:

- 10 pontos quaisquer no intervalo $I = [0, 5]$:

Método	N.º de aval. da função
Horn	381

- 20 pontos quaisquer no intervalo $I = [0, 5]$:

Método	N.º de aval. da função
Horn	391

- 50 pontos quaisquer no intervalo $I = [0, 5]$:

Método	N.º de aval. da função
Horn	421

- 100 pontos quaisquer no intervalo $I = [0, 5]$:

Método	N.º de aval. da função
Horn	471

Portanto, apenas para ilustrar a vantagem de se trabalhar com métodos com um fator escala para a resolução de problemas com saída densa, quando comparamos os

métodos RKF45, GBS-pol , GBS-rac e Horn para o pvi 5.6 exigindo aproximações em 100 pontos igualmente espaçados em $I=[0,5]$, com 8 casas de precisão, obtemos os seguintes resultados quanto ao número de avaliações da função:

Método	RKF45	GBS - pol	GBS - rac	Horn
N.º de aval. da função	600	800	800	471

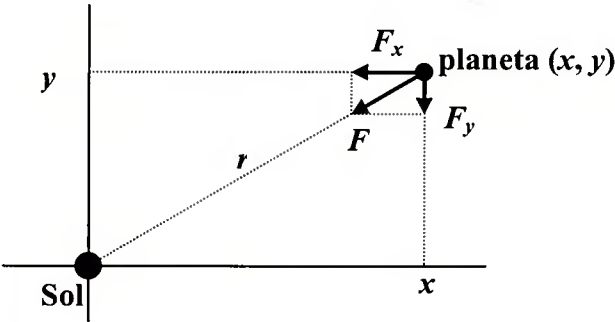
6.5 Exemplo

Como ilustração mostraremos uma aplicação prática das equações diferenciais ordinárias, considerando a modelagem matemática do problema físico que trata do movimento de dois corpos. Em particular o movimento de um planeta ao redor do Sol, encontrado em Kittel e outros [19].

Após a modelagem do problema, o integraremos numericamente através do método de Horn, pois como estamos interessados em ilustrar graficamente a trajetória do planeta, necessitamos de um método que torne possível encontrar aproximações para a solução exata em diversos pontos com um esforço computacional mínimo.

Além disso, aproveitaremos este exemplo para mostrar a eficiência do método de Horn.

Seja um planeta com massa (m) numa certa posição (x,y) do espaço, a uma distância radial (r) do Sol (massa M), conforme mostra a figura a seguir. Gostaríamos de encontrar, após um certo intervalo de tempo, em qual posição o planeta se encontra.



De acordo com a lei da gravidade, existe uma força F dirigida para o centro tal que:

$$|F| = \frac{GMm}{r^2}$$

onde G é a constante gravitacional.

Observando a figura, encontramos as seguintes relações:

$$\frac{F_x}{|F|} = -\frac{x}{r} \quad \text{e} \quad \frac{F_y}{|F|} = -\frac{y}{r}$$

assim temos que:

$$F_x = -\frac{GMm}{r^2} \frac{x}{r} \Rightarrow F_x = -\frac{GMm}{r^3} x$$

$$F_y = -\frac{GMm}{r^2} \frac{y}{r} \Rightarrow F_y = -\frac{GMm}{r^3} y$$

De acordo com a 2ª Lei de Newton ,

$$F_x = m \frac{dv_x}{dt} \quad \text{e} \quad F_y = m \frac{dv_y}{dt}$$

logo

$$m \frac{dv_x}{dt} = -\frac{GMm}{r^3} x$$

$$m \frac{dv_y}{dt} = -\frac{GMm}{r^3} y, \quad \text{onde } r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

Se supormos $GM = 1$, obtemos:

$$\frac{dv_x}{dt} = -\frac{x}{r^3} \quad \frac{dv_y}{dt} = -\frac{y}{r^3}$$

mas $v_x = \frac{dx}{dt} = x'$ e $v_y = \frac{dy}{dt} = y'$, assim

$$x'' = \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{x}{r^3}$$

$$y'' = \frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{y}{r^3}$$

Para resolver este sistema numericamente, vamos transformá-lo em um sistema de equações de primeira ordem. Para isso consideramos:

$$\begin{aligned} z_1 &= x & z_2 &= y \\ z_3 &= x' & z_4 &= y' \end{aligned} \quad (6.1)$$

obtendo:

$$z_1' = z_3$$

$$z_2' = z_4$$

$$z_3' = -\frac{z_1}{r^3}$$

$$z_4' = -\frac{z_2}{r^3}$$

Ainda, como, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, nas novas variáveis teremos $r = \sqrt{z_1^2 + z_2^2}$.

Portanto obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} z_1' = z_3 \\ z_2' = z_4 \\ z_3' = -\frac{z_1}{\left(\sqrt{z_1^2 + z_2^2}\right)^3} \\ z_4' = -\frac{z_2}{\left(\sqrt{z_1^2 + z_2^2}\right)^3} \end{cases} \quad (6.2)$$

Os pares ordenados $(z_1, z_2) = (x, y)$ descreverão uma órbita elíptica com excentricidade 0.6, com $z_1(0) = x(0) = 0.4$, $z_2(0) = y(0) = 0$, $z_3(0) = v_x(0) = 0$ e $z_4(0) = v_y(0) = 2.0$. A solução exata de (6.2) é dada por:

$$z_1(t) = x(t) = \cos(u) - 0.6$$

$$z_2(t) = y(t) = 0.8 \sin(u)$$

$$z_3(t) = v_x(t) = \frac{-\sin(u)}{1 - 0.6 \cos(u)}$$

$$z_4(t) = v_y(t) = \frac{0.8 \cos(u)}{1 - 0.6 \cos(u)}$$

onde o valor de u é obtido resolvendo-se a equação de Kepler $u - 0.6 \sin(u) = t$.

Integrando numericamente este sistema através do método de Horn, exigindo-se 6 casas de precisão, e considerando as aproximações para a solução em:

- 10 pontos: 0.6283, 1.2566, 1.8849,2.5132,3.1415, 3.7698, 4.3981, 5.0264, 5.6547 e 6.2830, obtemos as seguintes aproximações para as coordenadas x e y :

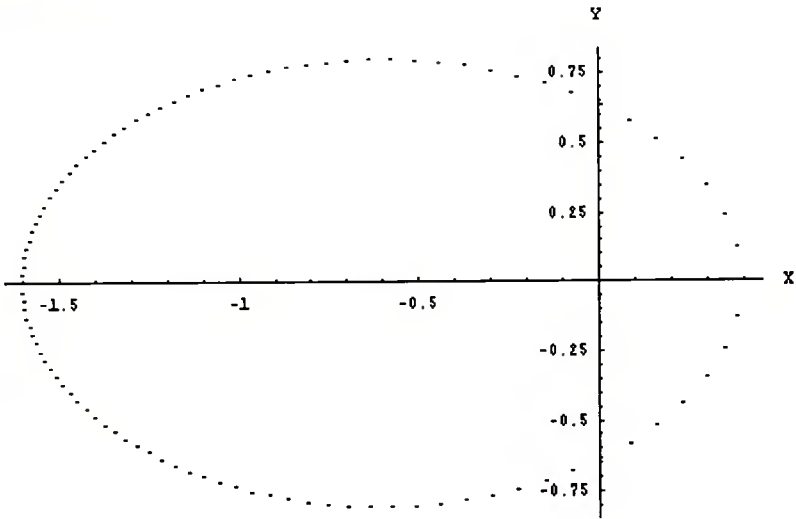
t	Aproximações		Erro Absoluto
	x	y	
0.6283	-0.222744753913	0.740887551908	1.842E-007
1.2566	-0.861791798466	0.772099775557	2.806E-007
1.8849	-1.283255293638	0.584144229987	5.055E-007
2.5132	-1.522374524301	0.309038722480	2.948E-007
3.1415	-1.600000565999	4.717801832E-5	5.676E-007
3.7698	-1.522421224333	-0.308949082945	9.152E-007
4.3981	-1.283352515733	-0.584071041569	8.626E-007
5.0264	-0.861946636499	-0.772065437152	5.087E-007
5.6547	-0.222966951666	-0.740960374193	6.417E-007
6.2830	0.399999878701	-0.000371127680	1.389E-007

Método	N.º total de passos	N.º de aval. da função
Horn	98	2361

- 50 pontos, igualmente espaçados no intervalo $[0,6.283]$. Obtemos:

Método	N.º total de passos	N.º de aval. da função
Horn	98	2401

Considerando as aproximações obtidas para $x(t)$ e $y(t)$ podemos representar graficamente a trajetória da órbita.



CONSIDERAÇÕES

FINAIS

A escolha do método adequado a ser considerado para a integração de um problema de valor inicial é uma tarefa nem sempre elementar e que para muitos problemas pode se tornar fundamental.

A precisão desejada pelo usuário, em geral elevada, pode restringir consideravelmente as opções entre as ferramentas numéricas disponíveis. Um outro fator importante, em especial quando se trabalha com problemas de grande porte, é o esforço computacional a ser dispendido, razão direta do número de avaliações da função $f(x, y)$, necessárias a cada passo de integração.

A possibilidade de se considerar métodos que permitam o controle do erro de truncamento local de forma eficiente, é hoje uma variável extremamente forte e fundamental na tomada de decisão, pois através desse controle podemos alterar o tamanho do passo durante o processo de integração, possibilitando assim alcançar a precisão desejada pelo usuário e otimizar o esforço computacional.

Todas essas questões tem estimulado pesquisadores a buscarem novos métodos e a desenvolverem estudos comparativos entre as classes de métodos.

Apresentamos nesta dissertação, e esperamos que de forma bastante clara, alguns métodos disponíveis para a integração numérica de problemas de valor inicial não-stiff, juntamente com resultados de um estudo computacional comparativo entre esses métodos. Esperamos ter realizado um trabalho que possa ser considerado como uma fonte de consulta por outros estudantes interessados neste tema.

Consideramos os métodos de Runge-Kutta apresentados no capítulo 1, uma das mais importantes classes de métodos, para a integração de um pvi. Sob o ponto de vista prático, as estratégias para o controle do erro de truncamento local, em especial a que utiliza pares de métodos embutidos, possibilitando a cada passo encontrar uma estimativa para o erro a um custo computacional adicional mínimo, desempenham um papel fundamental nessa classe de métodos. Consequentemente, a maneira mais eficiente de se

trabalhar com integração a passo variável na classe dos métodos de Runge-Kutta é considerar pares de fórmulas embutidas. Um código computacional que consideramos eficiente, é o denominado RKF(4,5), que trabalha com um par embutido de fórmulas de Runge-Kutta.

Consequência da eficiência dos métodos de Runge-Kutta e também da facilidade de acesso aos microcomputadores, encontramos nas últimas duas décadas novas investigações nessa classe de métodos.

Os métodos apresentados no capítulo 2, são resultados dessa busca. Eles consideram a substituição nos métodos de Runge-Kutta da média aritmética das derivadas por outros tipos de médias, tais como, a geométrica, a harmônica e a contra-harmônica. Para cada uma dessas variantes dos métodos de Runge-Kutta, desenvolvemos as condições de ordem até a ordem 4, obtendo a partir delas os métodos propostos nos trabalhos de Evans e outros. O par de métodos embutidos de ordem 4 e 4 estágios da seção 2.4, que considera o método da média geométrica como ferramenta para se estimar o erro de um método de Runge-Kutta, para problemas da forma $y' = Ay$, pode ser considerado como uma ferramenta auxiliar para se estimar o erro de truncamento local, a fim de trabalhar com integração a passo variável. É importante registrar que apesar desta técnica não apresentar nenhum custo adicional quanto ao número de avaliações da função, ela é aplicável apenas a este tipo de problema. Na seção 2.7, apresentamos uma outra estratégia para o controle do erro de truncamento local que considera um par de métodos, onde toma-se como ferramenta o método da média contra-harmônica para estimar o erro de um método de Runge-Kutta. A dificuldade de utilização dessa estratégia está na limitação das derivadas do problema de valor inicial.

O método GBS com extrapolação polinomial ou racional, também uma ferramenta clássica para a integração de um pvi, tem uma técnica totalmente diferente e natural de controlar a precisão, comparando dois valores sucessivos, obtidos através da extrapolação. A diferença entre eles resulta em uma boa estimativa para o erro. Esses métodos são indicados principalmente quando se exige precisão mais elevada.

Finalmente, é importante registrar a qualidade do par de fórmulas de Runge-Kutta embutidas, proposta por Horn [18], que se mostrou uma excelente ferramenta para integração para problemas com saída densa.

Analisando a avaliação computacional que realizamos dos métodos, iniciamos destacando a avaliação comparativa entre os métodos de Runge-Kutta e as variantes dos



métodos de Runge-Kutta (métodos de Evans), considerando métodos com ordem 4 e 4 estágios e integração a passo fixo. Conforme descrevemos na seção 4.4 podemos concluir que para problemas escalares autônomos eles se mostraram equivalentes quanto a ordem de precisão atingida e quanto ao número de avaliações da função $f(x, y)$. Quando consideramos a resolução de problemas de valor inicial não escalares as variantes dos métodos de Runge-Kutta mostraram-se menos eficientes do que o método de Runge-Kutta, atingindo uma menor ordem de precisão para um mesmo tamanho do passo de integração. Uma pesquisa interessante, como continuidade desta investigação, seria estudar as razões pelas quais ocorre esta perda de qualidade, quando se considera a resolução de sistemas através dos métodos propostos por Evans e outros.

Devido às limitações apresentadas pelas variantes dos métodos de Runge-Kutta não os consideramos como uma ferramenta competitiva para a integração a passo variável. Para este tipo de integração, consideramos o par de métodos embutidos de Fehlberg (RKF(4,5)) mais interessante, pois não apresenta restrições quanto à sua aplicação para a resolução de problemas não-stiff.

Assim, realizamos uma avaliação computacional comparativa entre o par RKF(4,5) e o método GBS com extrapolação polinomial e racional. Concluímos após a integração de vários problemas teste que ambos fornecem aproximações com a precisão desejada. Assim, sob esse aspecto se equivalem.

Quanto ao esforço computacional, se compararmos o número de avaliações da função $f(x, y)$, necessárias para completar a integração, observamos que o desempenho de cada um depende do comportamento da solução exata do pvi que estamos integrando. Para a maioria dos problemas, o método GBS com extrapolação racional apresentou um desempenho bem melhor do que o mesmo método com extrapolação polinomial e do que o método do par RKF(4,5). Para problemas em que a solução exata cresce rapidamente, como pode ser observado nos exemplos 5.2 e 5.11, a vantagem computacional de se trabalhar com o método GBS é ainda maior.

No entanto, para problemas que apresentam um comportamento diferenciado das componentes da solução exata em diferentes subintervalos do intervalo de integração, em particular, problemas onde no início da integração a curva da solução exata apresenta um comportamento tal que, são exigidos pelo método passos de tamanho pequeno e em seguida a curva passa a ter um comportamento “suave”, permitindo passos “bem maiores”, o método RKF(4,5) supera os métodos GBS com extrapolação polinomial e racional. Ao



nosso ver, isto ocorre devido à estrutura de controle do tamanho do passo utilizada pelo código RKF(4,5) que permite um aumento rápido mas controlado do tamanho do passo, após integrações onde passos de tamanho pequeno se fizeram necessários. Esta situação pode ser melhor observada através dos exemplos 5.3, 5.7 e 5.10.

Para problemas com saída densa, os resultados do capítulo 6, nos mostram que o par de métodos RKF(4,5) e o método GBS não são os mais indicados, pois, à medida que exigimos aproximações em um número maior de pontos próximos, internos ao intervalo de integração, o custo computacional desses métodos pode se tornar muito elevado. Nesse caso torna-se interessante o uso de ferramentas, como o método de Horn [18] que permite encontrar aproximações em vários pontos internos ao intervalo de integração com um esforço computacional mínimo. Podemos observar nas tabelas contendo o número de avaliações da função para o problema de dois corpos, que quando exigimos a aproximação para a solução exata em 10 pontos, o número total de avaliações da função foi 2361 e quando exigimos em 50 pontos o total foi 2401, tendo a integração se completado com um mesmo número de passos. A explicação para o ocorrido é clara. Em cada ponto, onde a aproximação é exigida, o método efetua apenas mais uma avaliação da função, calculando o valor de k_7 . Assim, quando aumentamos o número de pontos de 10 para 50, ou seja exigimos a aproximação em mais 40 pontos, como era previsto, foram realizadas mais 40 avaliações da função.

Concluindo, apontamos o par de métodos RKF(4,5) e o método GBS, em especial quando consideramos extrapolação racional, como ferramentas bastante eficientes e competitivas para a integração de problemas de valor inicial não-stiff.

Quando o problema é com saída densa temos no método de Horn uma ferramenta tão eficiente quanto o par RKF(4,5) e o método GBS, mas com a vantagem de realizar a integração com um menor esforço computacional.

Finalmente, registramos que esperávamos mais dos métodos de Evans, que são variantes dos métodos de Runge-Kutta. A integração de muitos problemas nos permite concluir que eles devem ser recomendados apenas como ferramenta auxiliar, para o controle do erro, quando integramos problemas do tipo $y' = Ay$.

Esperamos deixar com este trabalho uma pequena contribuição aos interessados no tema ou aos usuários de códigos para a resolução de problemas de valor inicial não-stiff.



REFERÊNCIAS

BIBLIOGRÁFICAS

- [01] BRAUN, M. - *Differential equations and their applications*. Springer-Verlag, 1992.
- [02] BURDEN, R. L. E FAIRES, J. D. - *Numerical analysis*. PWS-Kent Publishing Company, Boston, 1993.
- [03] BULIRSCH, R. E J. STOER - Numerical treatment of ordinary differential equations by extrapolation methods, *Numer. Math.*, 8, p.1-13, 1966.
- [04] BUTCHER, J. C.- *The numerical analysis of ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 1987.
- [05] DORMAND, J. R. E PRINCE, P. J. - A family of embedded Runge-Kutta formulae, *J. Comp and Appl. Math.*, 6, p. 19-26, 1980.
- [06] ENGLAND, R. - Error estimates for Runge-Kutta type solutions to systems of ordinary differential equations, *Computer Journal*, 12, p. 166-170, 1969.
- [07] ENRIGHT, W. H. E T. E. HULL - Test results on initial value methods for non-stiff ordinary differential equations. *SIAM Journal Numerical Analysis*, 13, p.944-961, 1976.
- [08] EVANS, D. J. - A new fourth order Runge-Kutta method for initial value problems with error control. *International Journal of Computer Mathematics*, vol. 39, p. 217-227, 1991.
- [09] EVANS, D.J. E A. R. YAAKUB - A new Runge-Kutta RK (4,4) method. *International Journal of Computer Mathematics*, vol 58, p. 169-188, 1995.

- [10] EVANS, D.J. E A. R. YAAKUB - A new fourth order Runge-Kutta formula based on the contra-harmonic (C_0M) mean. *International Journal of Computer Mathematics*, vol. 57, p. 249-256, 1995.
- [11] FEHLBERG, E. - Classical fifth, sixth, seventh and eight order Runge-Kutta formulas with stepsize control. *NASA TR R-287*, 1968.
- [12] FEHLBERG, E. - Low order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control and their application to some heat transfer problems. *NASA TR R-315*, 1969.
- [13] FORSYTHE, G. E., M. A. MALCOLM E C. B. MOLER - *Computer methods for mathematical computations*. Prentice-Hall, 1977.
- [14] GEAR, C. W. - *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. Prentice-Hall, 1971.
- [15] GRAGG, W. - On extrapolation algorithms for ordinary initial value problems, *SIAM Journal Numerical Analysis*, Série B, 2, p. 384-403, 1965.
- [16] HAIRER, E. E CH. LUBICH - On asymptotic expansions of the global error of fixed step-size methods. *Numer. Math.*, 45, 345-360, 1984.
- [17] HALL, G. E J. M. WATT - *Modern numerical methods for differential equations*. Oxford University Press, 1976.
- [18] HORN, M. K. - Forth and fifth-order, scaled Runge-Kutta algorithms for treating dense output. *SIAM Journal Numerical Analysis*, 20, nº 3, p. 558-568, 1983.
- [19] KITTEL, C., W. D. KNIGHT E M. A. RUDERMAN - *Curso de física de Berkeley: mecânica*. Edgard Blücher Ltda, 1970.
- [20] LAMBERT, J. D. - *Computational methods in ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 1973.
- [21] LAMBERT, J. D. - *Numerical methods for ordinary differential systems: the initial value problem*. John Wiley & Sons.Ltd., 1993.



- [22] PRINCE, P. J. E J. R. DORMAND - High order embedded Runge-Kutta formulae. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 7, p. 67-75, 1981.
- [23] RALSTON, A. E P. RABINOWITZ - *A first course in Numerical Analysis*. Mc. Graw Hill, 1983.
- [24] SANUGI, B. B. E D. J. EVANS - A new fourth order Runge-Kutta formula based on the harmonic mean. *International Journal of Computer Mathematics*, vol. 50, p. 113-118, 1994.
- [25] SANUGI, B. B. E EVANS, D.J. - A new fourth order Runge-Kutta formula for $y' = Ay$ with stepsize control. *Comput. Math. Applications*, vol 15, n° 12, p.991-995, 1988.
- [26] SHAMPINE, L. F., H. A. WATTS E S. M. DAVENPORT - Solving nonstiff ordinary differential equations: the state of art. *SIAM Review*, 18, p. 376-411, 1976.
- [27] SHAMPINE, L. F. E H. A. WATTS - The art of writing a Runge-Kutta code, Part I. *Mathematical Software III, Academic Press*, p. 257-275, 1977.
- [28] SHAMPINE, L. F. E H. A. WATTS - The art of writing a Runge-Kutta code - Part II. *Applied Mathematics and Computation*, 5, n° 93, p. 93-121, 1979.
- [29] SHARP, P. W. - New low order explicit Runge-Kutta pairs. University of Toronto, dept. Computer Science, *Tech. Rep. 222/89*, 1989.
- [30] SARAFYAN, D. - Continuous approximate solution of ordinary differential equations and their systems. *Comp. Math. applic.*, 10, n° 2, p. 139-159, 1984.
- [31] SARAFYAN, D. - Families of continuous approximate process for the solution of ordinary differential equations. *Comp. Math. applic.*, 16, n°s 10/11, p. 887-894, 1988.
- [32] STOER, J. E R. BULIRSCH - *Introduction to numerical analysis*. Springer-Verlag, 1992.



