

Capítulo 4

Integração numérica

A resolução numérica de uma equação diferencial permite complementar de maneira muito efetiva o estudo analítico ou qualitativo do comportamento das suas soluções podendo até, em muitos casos, ser o único meio de obter certas informações importantes sobre esse comportamento. Alguns exemplos já surgiram anteriormente, mas neste capítulo apresentaremos de modo mais sistemático os principais métodos de integração numérica de equações diferenciais.

O nosso objetivo é munir o leitor com um conjunto de ferramentas que poderá utilizar para analisar diversas situações que surgirão ao longo do texto. Além de descrever os métodos de cálculo propriamente ditos, também discutiremos certas questões relacionadas, tais como as estimativas de erro e a estabilidade do cálculo. No entanto, a nossa apresentação é meramente introdutória: o leitor interessado em aprofundar o seu conhecimento da análise numérica de equações diferenciais poderá consultar obras especificamente dedicadas ao tema, tais como os livros de LeVeque [60], Burden e Faires [17] e Sauer [111].

Começemos por lembrar a noção de *problema de valor inicial*, que é simplesmente a combinação da equação diferencial com uma condição inicial:

$$\begin{cases} x' = F(t, x), \\ x(t_0) = x_0, \end{cases} \quad (4.1)$$

onde $F : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}^d$ é uma função contínua definida em algum aberto \mathcal{U} de \mathbb{R}^{1+d} que contém (t_0, x_0) . Ao longo do capítulo suporemos que F é localmente lipschitziana em x e, portanto (Teorema 2.4), o problema (4.1) admite exatamente uma solução máxima $x : I \rightarrow \mathbb{R}^d$.

Consideremos um intervalo fechado $[t_0, t_0 + L]$ contido no intervalo I de definição da solução máxima. Vamos discretizar este intervalo, isto é, vamos considerar subconjuntos finitos de pontos

$$t_0 < t_1 < \dots < t_N = t_0 + L,$$

que chamaremos *malhas*. O inteiro $N \geq 1$ é o *tamanho* e as diferenças $h_n = t_n - t_{n-1}$, $n = 1, \dots, N$ são os *espaçamentos da malha*. Embora existam situações em

que é conveniente trabalhar com espaçamentos variáveis, aqui consideraremos apenas discretizações com malhas equiespaçadas, ou seja, tais que $h_n = L/N$ para todo n . Por método numérico de integração entende-se um procedimento para encontrar pontos x_1, \dots, x_N em \mathbb{R}^d tais que cada x_n está próximo do valor $x(t_n)$ da solução, para todo $n = 1, \dots, N$. Então, interpolando os dados $(t_0, x_0), (t_1, x_1), \dots, (t_N, x_N)$ podemos obter uma curva que aproxima a solução $x : I \rightarrow \mathbb{R}^d$ do problema (4.1) no intervalo $[t_0, t_0 + L]$.

Um bom exemplo é o método de Picard, que vimos usando desde o Capítulo 2. Mas os métodos numéricos que discutiremos neste capítulo são mais eficazes e, por isso, são muito mais utilizados em aplicações concretas. A razão principal é que, enquanto no caso do método de Picard o cálculo de x_n envolve todos os valores de t_j e x_j para $j = 0, \dots, n-1$, o que tem custo computacional elevado, em todos os métodos que trataremos a seguir o valor de x_n depende apenas de t_{n-1} e x_{n-1} . Dizemos que se trata de *métodos de um passo*.

O mais simples deles é o *método de Euler*, que já apareceu antes no texto e que estudaremos em detalhe na Seção 4.1. A ideia básica é substituir localmente a solução $x(t)$ pela sua aproximação afim

$$t \mapsto x_0 + x'(t_0)(t - t_0) = x_0 + F(t_0, x_0)(t - t_0),$$

o que conduz a escolher $x_1 = x_0 + F(t_0, x_0)(t_1 - t_0)$. Este é um exemplo de *método a diferenças finitas*, pois a aproximação afim corresponde a substituir a derivada por um quociente de diferenças finitas:

$$x'(t_0) \approx \frac{x(t_1) - x(t_0)}{t_1 - t_0}.$$

Repetindo este procedimento sucessivamente, obtemos a seguinte relação de recorrência para todos os pontos da malha:

$$x_n = x_{n-1} + F(t_{n-1}, x_{n-1})(t_n - t_{n-1}) = x_{n-1} + F(t_{n-1}, x_{n-1})h_n$$

para cada $n = 1, \dots, N$.

Os *métodos de Taylor*, que apresentaremos na Seção 4.2 usam uma ideia semelhante, mas com aproximação da solução pelo seu polinômio de Taylor de grau k , para cada $k \geq 1$. Em princípio, métodos com grau k maior permitem obter melhores aproximações da solução, uma vez que a aproximação pelo polinômio de Taylor melhora com o grau. Mas eles também têm maior custo computacional, especialmente devido à necessidade de calcular derivadas de ordem superior.

Com os *métodos de Runge–Kutta*, que estudaremos na Seção 4.3, voltamos à estratégia de usar aproximações afins da solução, mas com uma escolha muito mais cuidadosa da inclinação da reta, buscando obter boas aproximações da solução sem aumentar demasiado o custo computacional. A ideia é tomar como inclinação alguma média (de estimativas) das derivadas da solução em certos pontos entre t_{n-1} e t_n . Escolhendo estes pontos e os respectivos pesos na média de forma adequada (que em geral não é única), obtêm-se métodos de integração muito eficazes.

Para simplificar a apresentação, inicialmente consideraremos todos estes métodos no âmbito de equações diferenciais de ordem 1 e dimensão $d = 1$. No entanto, estas

ideias se estendem naturalmente para dimensões superiores, conforme explicaremos na Seção 4.4.

Um ponto importante, para qualquer método, é obter alguma *estimativa do erro global*, ou seja, algum majorante para

$$\max \{|x_n - x(t_n)| : n = 1, \dots, N\}.$$

Discutiremos esta questão primeiro (Seção 4.1.1) no âmbito do método de Euler e em seguida (Seção 4.5) para métodos de um passo em geral, por meio de três importantes noções: *convergência*, *consistência* e *estabilidade* de métodos numéricos. O Teorema 4.13 afirma que todo método numérico de um passo que é consistente e estável é convergente.

4.1 Método de Euler

Foi concebido inicialmente por Leonhard Euler como uma demonstração da existência de soluções do problema (4.1). Como método de integração numérica, é demasiado simples e pouco eficiente para a maioria das aplicações práticas. No entanto, a simplicidade também faz dele uma ótima introdução ao tema e um exemplo conveniente para descrever e testar ideias antes que sejam aplicadas a métodos mais complicados.

Para formular o método de Euler, comecemos por visualizar o problema (4.1) de maneira geométrica (veja a Figura 4.1). Recorde que neste estágio estamos considerando apenas equações de dimensão $d = 1$. Então, a condição inicial (t_0, x_0) é um ponto no plano. A solução $x(t)$ de (4.1), que estamos buscando, corresponde a uma certa curva no plano passando por esse ponto. Também sabemos que a inclinação da curva nesse ponto é dada por $x'(t_0) = F(t_0, x_0)$. A ideia é usar estas informações para aproximar a curva por sua reta tangente em (t_0, x_0) , na vizinhança na condição inicial.

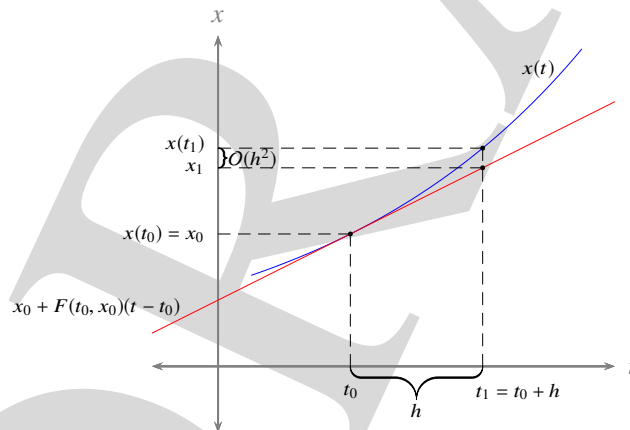


Figura 4.1: Primeiro passo no método de Euler.

Mais precisamente, suponhamos que F é de classe C^1 e fixemos uma pequena constante $h > 0$. Faz parte da definição de solução que a curva $x(t)$ que estamos

buscando é de classe C^1 e então a própria relação $x'(t) = F(t, x(t))$ assegura que $x(t)$ é de classe C^2 . Logo, pelo Teorema de Taylor,

$$x(t) \approx x_0 + F(t_0, x_0)(t - t_0) \text{ para todo } t \in [t_0, t_0 + h], \quad (4.2)$$

no sentido de que a diferença entre as duas expressões está limitada por $M(t - t_0)^2 \leq Mh^2$, onde M é um majorante para $|x''|$ no intervalo $[t_0, t_0 + h]$. Confira a Figura 4.1. Isto sugere que tomemos

$$\begin{cases} t_1 = t_0 + h, \\ x_1 = x_0 + F(t_0, x_0)(t_1 - t_0) = x_0 + F(t_0, x_0)h, \end{cases}$$

o que acabamos de dizer mostra x_1 está próximo de $x(t_1)$, desde que h seja suficientemente pequeno.

Pelo Teorema de Dependência Contínua (Teorema 2.22), também segue que a solução $\tilde{x}(t)$ da equação $x' = F(t, x)$ com condição inicial $\tilde{x}(t_1) = x_1$ permanece próxima da solução $x(t)$ do problema (4.1) na vizinhança de t_1 . Em particular,

$$x(t) \approx \tilde{x}(t) \text{ para todo } t \in [t_1, t_1 + h] \quad (4.3)$$

desde que h seja suficientemente pequeno. Por outro lado, repetindo o procedimento do parágrafo anterior com o novo ponto (t_1, x_1) no lugar de (t_0, x_0) ,

$$\tilde{x}(t) \approx x_1 + F(t_1, x_1)(t - t_1) \text{ para todo } t \in [t_1, t_1 + h]. \quad (4.4)$$

Isto sugere que tomemos

$$\begin{cases} t_2 = t_1 + h, \\ x_2 = x_1 + F(t_1, x_1)(t_2 - t_1) = x_1 + F(t_1, x_1)h : \end{cases}$$

combinando o que acabamos de dizer, vemos que x_2 está próximo de $\tilde{x}(t_2)$ o qual, por sua vez, está próximo de $x(t_2)$.

Desta forma, chegamos à seguinte formulação do *método de Euler*, por recorrência: fixado um espaçamento $h > 0$, para cada $n = 1, \dots, N$ tomamos

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ x_n = x_{n-1} + F(t_{n-1}, x_{n-1})h. \end{cases} \quad (4.5)$$

O argumento apresentado sugere que a curva poligonal definida pelos pontos (t_n, x_n) , $n = 0, 1, \dots, N$, está próxima da curva solução procurada (veja a Figura 4.2), desde que h seja escolhido de maneira conveniente. Discutiremos daqui a pouco, de forma mais cuidadosa, em que medida isto é realmente assim.

Exemplo 4.1. Consideremos o seguinte problema de valor inicial:

$$\begin{cases} x' = t^2 - x^2, \\ x(0) = 1. \end{cases} \quad (4.6)$$

A solução não pode ser expressa analiticamente em termos de funções elementares, mas é muito fácil estimá-la usando o método de Euler. Mediante uma simples planilha, obtemos os seguintes resultados para $L = 1, 2$ e espaçamento $h = 0, 1$ (confira a representação gráfica na Figura 4.3):

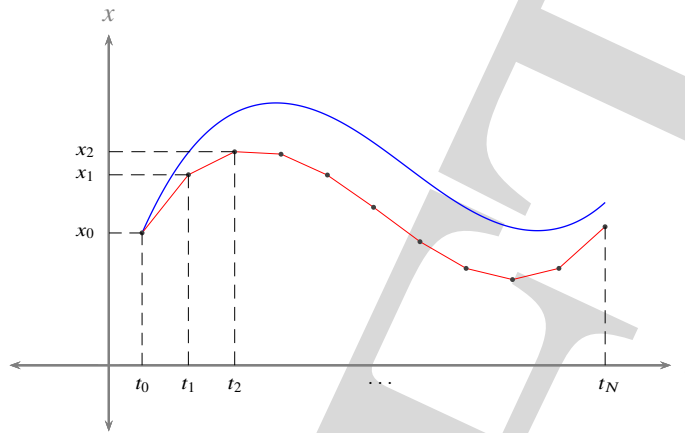


Figura 4.2: Método de Euler.

n	t_n	x_n	$F(t_n, x_n)$
0	0,0	1,0000	-1,0000
1	0,1	0,9000	-0,8000
2	0,2	0,8200	-0,6324
3	0,3	0,7568	-0,4827
4	0,4	0,7085	-0,3420
5	0,5	0,6743	-0,2047
6	0,6	0,6538	-0,0675
7	0,7	0,6471	0,0713
8	0,8	0,6542	0,2120
9	0,9	0,6754	0,3538
10	1,0	0,7108	0,4948
11	1,1	0,7603	0,6320
12	1,2	0,8235	0,7619

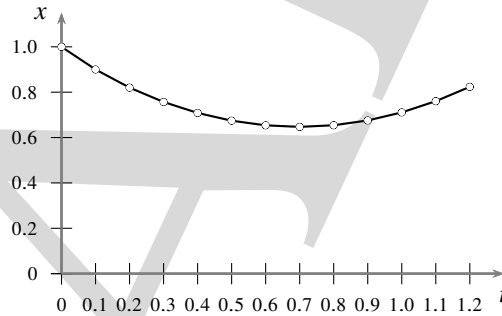


Figura 4.3: Solução numérica do Exemplo 4.1.

A questão que se coloca é em que medida esta função é realmente uma boa aproximação da solução exata do problema no intervalo considerado. Esse é o tema da próxima seção.

4.1.1 Estimativas de erro

O *erro global* do método de integração é o valor absoluto da diferença entre o valor exato da solução e o valor da aproximação calculada. No caso do método de Euler, ele é a combinação de dois tipos de erros que são introduzidos no decurso do cálculo e que vamos analisar a seguir (há um terceiro tipo, na verdade, mas trataremos dele um pouco mais tarde).

O primeiro tipo de erro é devido a que, no lugar da solução $x(t)$ propriamente dita, é utilizada a sua aproximação afim $x_0 + x'(t_0)(t - t_0)$; veja por exemplo (4.2). Ele é chamado *erro de truncamento* porque o que está acontecendo é que estamos truncando a expansão de Taylor de ordem 1,

$$x(t) = x_0 + x'(t_0)(t - t_0) + R_1(t),$$

ou seja, ignorando o termo de resto $R_1(t)$. Como sabemos,

$$R_1(t) = x''(s) \frac{(t-t_0)^2}{2} \text{ para algum } s \in (t_0, t).$$

Portanto, para majorar o erro de truncamento devemos majorar o valor absoluto da segunda derivada. Isto pode parecer complicado, uma vez que nós não conhecemos a solução $x(t)$ e, portanto, também não conhecemos as suas derivadas. No entanto, resulta que é bastante fácil na maioria dos casos: basta observar que a relação $x'(t) = F(t, x(t))$ acarreta que

$$x''(t) = \partial_t F(t, x(t)) + \partial_x F(t, x(t))x'(t) = \partial_t F(t, x(t)) + \partial_x F(t, x(t))F(t, x(t)) \quad (4.7)$$

(lembre que vimos supondo que F é de classe C^1). Em particular, x'' é limitada em qualquer região onde F e as suas derivadas parciais sejam limitadas.

O segundo tipo de erro resulta de que em cada etapa é calculada uma trajetória ligeiramente diferente. Por exemplo, o fato de que x_1 não é exatamente igual a $x(t_1)$ acarreta que as respectivas soluções também não coincidem exatamente: a relação (4.3) é apenas uma igualdade aproximada e, em particular, $\tilde{x}(t_2)$ também não coincide exatamente com $x(t_2)$. O mesmo efeito ocorre em cada uma das etapas sucessivas do método evidentemente. Felizmente, o erro introduzido desta forma pode ser majorado usando um argumento do tipo Gronwall (veja o Teorema 3.8): supondo que F admite uma constante de Lipschitz C , temos que

$$|\tilde{x}(t) - x(t)| \leq e^{C(t-t_1)} |x_1 - x(t_1)| \leq e^{Ch} |x_1 - x(t_1)| \text{ para todo } t \in [t_1, t_1 + h]$$

e analogamente para todas as etapas seguintes.

Estas observações conduzem-nos ao seguinte resultado, que fornece uma estimativa explícita simples para o erro de truncamento do método de Euler a cada iteração.

Teorema 4.2. *Suponha que F é de classe C^1 e existem constantes $C > 0$ e $M > 0$ tais que*

1. $|F(t, u) - F(t, v)| \leq C |u - v|$ para todo $(t, u), (t, v) \in \mathcal{U} \cap ([t_0, t_0 + L] \times \mathbb{R})$ e
2. $|x''(t)| \leq M$ para todo $t \in [t_0, t_0 + L]$.

Então, a aproximação gerada pelo método de Euler (4.5) com espaçamento uniforme $h = L/N$ satisfaz

$$|x_n - x(t_n)| \leq (e^{nCh} - 1) \frac{Mh}{2C} \text{ para todo } n = 0, 1, \dots, N. \quad (4.8)$$

Para a demonstração vamos precisar do seguinte fato elementar:

Lema 4.3. *Sejam a e b números reais positivos e y_0, y_1, \dots, y_N números reais satisfazendo $y_0 \geq -b/a$ e*

$$y_n \leq (1 + a)y_{n-1} + b \text{ para todo } n = 1, \dots, N. \quad (4.9)$$

Então

$$y_n \leq e^{na} \left(y_0 + \frac{b}{a} \right) - \frac{b}{a} \text{ para todo } n = 1, \dots, N. \quad (4.10)$$

Demonstração. Aplicando a hipótese sucessivamente, vemos que

$$\begin{aligned} y_n &\leq (1+a)y_{n-1} + b \\ &\leq (1+a)^2 y_{n-2} + (1+(1+a))b \\ &\leq (1+a)^3 y_{n-3} + (1+(1+a)+(1+a)^2)b \\ &\vdots \\ &\leq (1+a)^n y_0 + \left(\sum_{j=0}^{n-1} (1+a)^j \right) b. \end{aligned}$$

Usando que o último termo é a soma de uma progressão geométrica, concluímos que

$$y_n \leq (1+a)^n y_0 + \frac{(1+a)^n - 1}{a} b = (1+a)^n \left(y_0 + \frac{b}{a} \right) - \frac{b}{a}.$$

Para concluir a demonstração, basta observar que $e^a \geq 1+a$ para todo $a > 0$, uma vez que a função $g(x) = e^x$ é côncava. Lembre também que estamos supondo que $y_0 \geq -b/a$. \square

Demonstração do Teorema 4.2. Para $n = 0$ a afirmação é óbvia, uma vez que $x(t_0) = x_0$. Consideremos qualquer $n = 1, \dots, N$. A definição (4.5) diz que

$$x_n = x_{n-1} + F(t_{n-1}, x_{n-1})h.$$

Pelo Teorema de Taylor, existe $s \in (t_{n-1}, t_n)$ tal que

$$x(t_n) = x(t_{n-1}) + F(t_{n-1}, x(t_{n-1}))h + x''(s) \frac{h^2}{2}.$$

Subtraindo estas duas igualdades, e usando as hipóteses do teorema,

$$\begin{aligned} |x_n - x(t_n)| &\leq |x_{n-1} - x(t_{n-1})| + |F(t_{n-1}, x_{n-1}) - F(t_{n-1}, x(t_{n-1}))| h + \frac{h^2}{2} |x''(s)| \\ &\leq (1+Ch) |x_{n-1} - x(t_{n-1})| + \frac{Mh^2}{2} \text{ para todo } n = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Isto pode ser reescrito na forma (4.9), com $a = Ch$, $b = Mh^2/2$ e $y_n = |x_n - x(t_n)|$. Note também que $y_0 = |x_0 - x(t_0)| = 0$. Então, a relação (4.10) dá que

$$|x_n - x(t_n)| \leq (e^{nCh} - 1) \frac{Mh}{2C} \text{ para todo } n = 0, 1, \dots, N,$$

tal como enunciado. \square

Lembrando que $h = L/N$, a desigualdade (4.8) contém a seguinte estimativa para o erro global:

$$\max \{ |x_n - x(t_n)| : n = 1, 2, \dots, N \} \leq (e^{LC} - 1) \frac{Mh}{2C}. \quad (4.11)$$

Note que a expressão no lado direito é linear no espaçamento h . À primeira vista, isto sugere que podemos reduzir o erro global tanto quanto quisermos, bastando para tal reduzir o espaçamento h . No entanto, o problema é bem mais sutil. De fato, reduzir h corresponde a aumentar o tamanho $N = L/h$ da malha, o que significa aumentar o número de iterações do método de Euler. Isto tem um custo computacional (o tempo para realizar os cálculos) que pode tornar-se proibitivo se N for muito grande. Sem falar na possibilidade de um “erro de máquina” no cálculo de N para h muito pequeno.

Além disso, a discussão anterior é um pouco simplista, já que ela não leva em conta os “erros de arredondamento” cometidos pelo computador a cada etapa do cálculo. Quando atentamos para esse tipo de erro, dá para acreditar que, dependendo da situação, reduzir h (e aumentar N) possa até resultar em *aumento* do erro, ao contrário de diminuição. Para entendermos este ponto um pouco melhor, vamos considerar o seguinte modelo mais realista, chamado *método de Euler perturbado*:

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ x_n = x_{n-1} + F(t_{n-1}, x_{n-1})h + \delta_n, \end{cases} \quad (4.12)$$

onde δ_n modela o arredondamento cometido na n -ésima etapa do cálculo. Temos a seguinte versão do Teorema 4.2, cuja demonstração deixamos a cargo do leitor (veja o Exercício 4.15):

Teorema 4.4. *Suponha que F é de classe C^1 (logo x é de classe C^2) e existem constantes $C > 0$, $M > 0$ e $\delta > 0$ tais que*

1. $|F(t, u) - F(t, v)| \leq C|u - v|$ para todo $(t, u), (t, v) \in \mathcal{U} \cap ([t_0, t_0 + L] \times \mathbb{R})$,
2. $|x''(t)| \leq M$ para todo $t \in [t_0, t_0 + L]$ e
3. $|\delta_n| \leq \delta$ para todo $n = 1, \dots, N$.

Então, a aproximação dada pelo método de Euler perturbado (4.12) com espaçamento uniforme $h = L/N$ satisfaz

$$|x_n - x(t_n)| \leq \frac{e^{nhC} - 1}{C} \left(\frac{Mh}{2} + \frac{\delta}{h} \right) + e^{nhC} \delta \text{ para todo } n = 0, 1, \dots, N. \quad (4.13)$$

A desigualdade (4.13) contém a seguinte estimativa para o erro global:

$$\max \{ |x_n - x(t_n)| : n = 0, 1, \dots, N \} \leq \frac{e^{LC} - 1}{C} \left(\frac{Mh}{2} + \frac{\delta}{h} \right) + e^{LC} \delta. \quad (4.14)$$

No entanto, ao contrário do que acontece em (4.11), a expressão do lado direito não é linear em h : de fato, ela até vai para infinito quando h vai para zero! Observando que a expressão

$$\frac{Mh}{2} + \frac{\delta}{h}$$

atinge o seu mínimo no ponto $h_{min} = \sqrt{2\delta/M}$, concluímos que reduzir o espaçamento h para além desse valor não melhora em nada a estimativa do erro global, pelo contrário.

4.2 Métodos de Taylor

A apresentação que fizemos do método de Euler sugere imediatamente uma generalização natural: no lugar da aproximação afim em (4.2), porque não usar a aproximação pelo polinômio de Taylor de grau k , para cada $k \geq 1$? Isto conduz a uma sequência de métodos de integração, chamados *métodos de Taylor*.

Para explicar melhor, fixemos $k \geq 1$ e suponhamos que a função F em (4.1) é de classe C^k . Então a solução $x(t)$ do problema de valor inicial é de classe C^{k+1} : isto pode ser verificado facilmente, por indução, a partir da própria equação diferencial. Mais ainda, as derivadas até ordem $k + 1$ podem ser calculadas da seguinte forma. Primeiramente, conforme observado em (4.7), a equação diferencial $x'(t) = F(t, x(t))$ acarreta que

$$x''(t) = F_1(t, x(t)) \text{ onde } F_1(t, x) = \partial_t F(t, x) + \partial_x F(t, x)F(t, x).$$

Repetindo este argumento para as derivadas de ordem superior obtemos que $x^{(j)}(t) = F_j(t, x(t))$ para cada $j = 1, \dots, k, k + 1$, onde a sequência de funções F_j está definida recursivamente por

$$\begin{aligned} F_0(t, x) &= F(t, x), \\ F_j(t, x) &= \partial_t F_{j-1}(t, x) + \partial_x F_{j-1}(t, x)F(t, x), \end{aligned} \quad (4.15)$$

Então, pelo Teorema de Taylor

$$x(t) \approx x(t_0) + \sum_{j=1}^k x^{(j)}(t_0) \frac{(t-t_0)^j}{j!} = x(t_0) + \sum_{j=1}^k F_j(t_0, x_0) \frac{(t-t_0)^j}{j!}, \quad (4.16)$$

com termo de resto

$$R_{k+1}(t) = x^{(k+1)}(s) \frac{(t-t_0)^{k+1}}{(k+1)!} \text{ para algum } s \in (t_0, t). \quad (4.17)$$

Agora o *método de Taylor de grau k* com um dado espaçamento $h > 0$ é definido pelas relações

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ F_j(t_{n-1}, x_{n-1}) = \partial_t F_{j-1}(t_{n-1}, x_{n-1}) + \partial_x F_{j-1}(t_{n-1}, x_{n-1})F(t_{n-1}, x_{n-1}) \\ \quad \text{para } j = 1, \dots, k, \\ x_n = x_{n-1} + \sum_{j=1}^k F_j(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{h^j}{j!}. \end{cases} \quad (4.18)$$

Claramente, o método de Taylor de grau $k = 1$ é simplesmente o método de Euler. Normalmente, para todo t próximo de t_0 , o termo de resto $R_k(t)$ tende a diminuir quando k aumenta. Assim, podemos esperar que métodos de Taylor de grau k maior gerem aproximações melhores para a solução. Por outro lado, aumentar k também aumenta o custo computacional, especialmente no cálculo das derivadas na segunda linha de (4.18), além de poder aumentar os erros de arredondamento. Não aprofundaremos

estas observações informais neste momento porque uma discussão mais cuidadosa do assunto será dada daqui a pouco, na Seção 4.5, num contexto bem mais abrangente.

Em vez disso, vamos encerrar a seção exemplificando o uso de métodos de Taylor de grau $k \geq 2$:

Exemplo 4.5. Consideremos o problema de valor inicial (4.6):

$$\begin{cases} x' = t^2 - x^2, \\ x(0) = 1, \end{cases}$$

no intervalo $0 \leq t \leq 1, 2$. As relações do método de Taylor (4.18) de grau $k = 2$ são:

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ F_0(t_{n-1}, x_{n-1}) = t_{n-1}^2 - x_{n-1}^2, \\ F_1(t_{n-1}, x_{n-1}) = 2t_{n-1} - 2x_{n-1}(t_{n-1}^2 - x_{n-1}^2), \\ x_n = x_{n-1} + F_0(t_{n-1}, x_{n-1})h + F_1(t_{n-1}, x_{n-1})h^2. \end{cases}$$

O cálculo está resumido na seguinte planilha, para espaçamento $h = 0, 1$:

n	t_n	x_n	$F_0(t_n, x_n)$	$F_1(t_n, x_n)$
0	0,0	1,00000	-1,00000	1,00000
1	0,1	0,90500	-0,80903	0,93217
2	0,2	0,82876	-0,64684	0,93607
3	0,3	0,76875	-0,50098	0,98513
4	0,4	0,72358	-0,36357	1,06307
5	0,5	0,69254	-0,22961	1,15902
6	0,6	0,67537	-0,09613	1,26492
7	0,7	0,67209	0,03830	1,37426
8	0,8	0,68279	0,17380	1,48133
9	0,9	0,70757	0,30934	1,58112
10	1,0	0,74641	0,44287	1,66944
11	1,1	0,79905	0,57152	1,74333
12	1,2	0,86492	0,69192	1,80155

A tabela a seguir também contém os resultados dos métodos de Taylor de grau 3 e 4, obtidos de forma análoga (Exercício 4.2):

n	t_n	$x_n(\text{Euler})$	$x_n(k=2)$	$x_n(k=3)$	$x_n(k=4)$
0	0,0	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1	0,1	0,90000	0,90500	0,90367	0,90383
2	0,2	0,82000	0,82876	0,82688	0,82712
3	0,3	0,75676	0,76875	0,76676	0,76703
4	0,4	0,70849	0,72358	0,72170	0,72198
5	0,5	0,67430	0,69254	0,69090	0,69117
6	0,6	0,65383	0,67537	0,67403	0,67428
7	0,7	0,64708	0,67209	0,67107	0,67130
8	0,8	0,65421	0,68279	0,68209	0,68231
9	0,9	0,67541	0,70757	0,70720	0,70739
10	1,0	0,71079	0,74641	0,74633	0,74650
11	1,1	0,76027	0,79905	0,79923	0,79938
12	1,2	0,82347	0,86492	0,86534	0,86547

Observação 4.6. Dado $p > 0$, é costume usar a notação $O(h^p)$ para representar expressões que são limitadas em valor absoluto por ch^p para todo h positivo pequeno, onde

c é uma constante positiva. Por exemplo, no caso do método de Euler, as observações em torno de (4.2) mostram que o erro de truncamento é $O(h^2)$ e a desigualdade (4.11) prova que o erro global é $O(h)$. Por esta razão dizemos que esse é um *método de ordem 1*. Mais geralmente, para o método de Taylor de qualquer grau $k \geq 1$, a discussão em (4.16)–(4.17) mostra que o erro de truncamento é $O(h^{k+1})$. Veremos posteriormente que isso acarreta que o erro global é $O(h^k)$. Então, ele também é chamado método de Taylor *de ordem k*.

4.3 Métodos de Runge–Kutta

Como vimos anteriormente, o método de Euler está baseado na ideia de aproximar a solução $x(t)$ pela função afim $x_0 + x'(t_0)(t - t_0)$ para t próximo de t_0 . Nos métodos de Taylor buscamos melhorar o cálculo, substituindo a função afim pelo polinômio de Taylor de grau k da solução. O erro de truncamento cometido nesta aproximação está dado pelo termo de resto (4.17) da expansão de Taylor de ordem k .

Com os métodos de Runge–Kutta, que vamos apresentar a seguir, retomamos a estratégia de usar aproximações afins, mas substituindo a inclinação $x'(t_0)$ por uma média das derivadas da solução em certos pontos $t \in [t_0, t_1]$, escolhidos cuidadosamente de forma obter aproximações comparáveis às dos métodos de Taylor sem ter que incorrer nos respectivos custos computacionais. A escolha dos pontos e dos pesos na média não é única, e depende da ordem de aproximação desejada.

Começaremos por apresentar um exemplo simples desta estratégia. Em seguida discutiremos esta família de métodos de modo geral e apresentaremos outros exemplos representativos.

4.3.1 Um método de ordem 2

A ideia é aproximar a solução $x(t)$ por uma função afim $x_0 + m(t - t_0)$ onde, no lugar de $m = x'(t_0)$, tomamos m igual à média das derivadas de x nos pontos t_0 e $t_1 = t_0 + h$:

$$m = \frac{1}{2}(x'(t_0) + x'(t_1)) = \frac{1}{2}(F(t_0, x(t_0)) + F(t_1, x(t_1))). \quad (4.19)$$

No Exercício 4.1 convidamos o leitor a verificar que o erro de truncamento correspondente é $O(h^3)$, tal como no método de Taylor de ordem 2 (lembre da Observação 4.6).

O problema com (4.19) é que o lado direito depende de $x(t_1)$, que é precisamente o que se pretende calcular! Mas é possível contornar esta dificuldade da seguinte forma (veja a Figura 4.4). Primeiramente, encontramos alguma aproximação \tilde{x}_1 para $x(t_1)$, não necessariamente muito boa. Para isso, podemos usar o método de Euler, por exemplo. Em seguida, usamos a ideia que acabamos de esboçar, com \tilde{x}_1 no lugar de $x(t_1)$, para obter uma aproximação melhor para $x(t_1)$. Em termos precisos, estes dois passos podem ser resumidos da seguinte forma

$$\begin{cases} t_1 = t_0 + h, \\ k_1 = F(t_0, x_0), \\ k_2 = F(t_1, x_0 + k_1 h), \\ x_1 = x_0 + (k_1 + k_2)h/2. \end{cases} \quad (4.20)$$

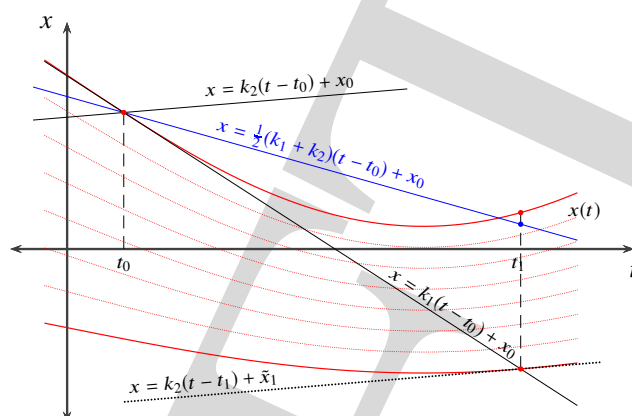


Figura 4.4: Interpretação geométrica do método de Runge–Kutta de ordem 2.

Desta forma chegamos às seguintes relações de recorrência, que definem este método de Runge–Kutta (conhecido como *método de Heun*):

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1 = F(t_{n-1}, x_{n-1}), \\ k_2 = F(t_n, x_{n-1} + k_1 h), \\ x_n = x_{n-1} + (k_1 + k_2)h/2. \end{cases} \quad (4.21)$$

Não é difícil verificar (veja o Exercício 4.1) que se trata de um método de ordem 2, isto é, tal que o erro global é $O(h^2)$. A seguir exemplificaremos como ele pode ser aplicado na prática.

Exemplo 4.7. Consideremos o problema de valor inicial (4.6):

$$\begin{cases} x' = t^2 - x^2, \\ x(0) = 1, \end{cases}$$

no intervalo $0 \leq t \leq 1, 2$. Neste caso as relações (4.21) são:

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1 = t_{n-1}^2 - x_{n-1}^2, \\ \tilde{x}_n = x_{n-1} + k_1 h, \\ k_2 = t_n^2 - \tilde{x}_n^2, \\ x_n = x_{n-1} + (k_1 + k_2)h/2, \end{cases}$$

O cálculo está resumido na seguinte planilha, para espaçamento $h = 0, 1$:

n	t_n	x_n	k_1	\bar{x}_n	k_2
0	0,0	1,00000	-1,00000		
1	0,1	0,91000	-0,81810	0,90000	-0,80000
2	0,2	0,83680	-0,66023	0,82819	-0,64590
3	0,3	0,77858	-0,51619	0,77078	-0,50410
4	0,4	0,73435	-0,37927	0,72696	-0,36848
5	0,5	0,70364	-0,24510	0,69642	-0,23501
6	0,6	0,68632	-0,11104	0,67913	-0,10121
7	0,7	0,68247	0,02423	0,67522	0,03408
8	0,8	0,69223	0,16082	0,68490	0,17092
9	0,9	0,71569	0,29779	0,70831	0,30829
10	1,0	0,75279	0,43331	0,74547	0,44428
11	1,1	0,80326	0,56477	0,79612	0,57619
12	1,2	0,86655	0,68910	0,85974	0,70085

Compare com os resultados obtidos por meio do método de Euler no Exemplo 4.1.

4.3.2 A família de métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta têm a seguinte forma geral:

$$\left\{ \begin{array}{l} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1 = F(t_{n-1}, x_{n-1}), \\ k_2 = F(t_{n-1} + c_2 h, x_{n-1} + a_{21} k_1 h), \\ k_3 = F(t_{n-1} + c_3 h, x_{n-1} + (a_{31} k_1 + a_{32} k_2) h), \\ \vdots \\ k_l = F(t_{n-1} + c_l h, x_{n-1} + (a_{l1} k_1 + \cdots + a_{l,l-1} k_{l-1}) h), \\ x_n = x_{n-1} + (b_1 k_1 + \cdots + b_l k_l) h \end{array} \right. \quad (4.22)$$

onde o inteiro l é chamado *número de estágios* e os números reais c_i com $i = 2, \dots, l$, b_j com $j = 1, \dots, l$ e a_{ij} , com $1 \leq j < i \leq l$ são chamados *coeficientes* do método. É conveniente representar estes números em forma matricial, no chamado *quadro de Butcher* do método:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ c_2 & a_{21} & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ c_l & a_{l1} & a_{l2} & \cdots & a_{l,l-1} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_{l-1} & b_l \end{array}$$

Observe que o método de Euler pode ser escrito nesta forma: trata-se de um método com 1 estágio e

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

como quadro de Butcher. Já o método de Heun, que descrevemos na seção anterior, tem 2 estágios e

0	
1	1
	1/2 1/2

como quadro de Butcher. A seguir, apresentamos os dois métodos de Runge-Kutta mais populares.

Exemplo 4.8 (Método de Kutta de ordem 3). Pode mostrar-se (veja o Exercício 4.6) que o método definido por

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1 = F(t_{n-1}, x_{n-1}) \\ k_2 = F(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_1 h/2) \\ k_3 = F(t_n, x_{n-1} + (-k_1 + 2k_2)h) \\ x_n = x_{n-1} + (k_1 + 4k_2 + k_3)h/6 \end{cases} \quad (4.23)$$

é de ordem 3. Note que ele tem 3 estágios e o respectivo quadro de Butcher é

0		
1/2	1/2	
1	-1	2
	1/6	4/6 1/6.

Exemplo 4.9 (Método clássico de Runge-Kutta). Pode mostrar-se (veja o Exercício 4.6) que as seguintes relações de recorrência definem um método de ordem 4:

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1 = F(t_{n-1}, x_{n-1}), \\ k_2 = F(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_1 h/2), \\ k_3 = F(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_2 h/2), \\ k_4 = F(t_n, x_{n-1} + k_3 h) \\ x_n = x_{n-1} + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h/6. \end{cases} \quad (4.24)$$

Note que ele tem 4 estágios e o quadro de Butcher é

0			
1/2	1/2		
1/2	0	1/2	
1	0	0	1
	1/6	2/6	2/6 1/6.

São conhecidas diversas condições sobre os coeficientes para que o método tenha uma dada ordem. Mas em geral não é sabido qual o número mínimo de estágios necessário para que um método de Runge-Kutta seja de uma dada ordem k .

Exemplo 4.10. A planilha a seguir resume os resultados do método de Euler (ordem 1), do método de Heun (ordem 2), do método de Kutta de ordem 3 e do método clássico de Runge-Kutta (ordem 4) ao problema de valor inicial (4.6):

$$\begin{cases} x' = t^2 - x^2, \\ x(0) = 1. \end{cases}$$

com espaçamento $h = 0,1$ no intervalo $0 \leq t \leq 1,2$.

n	t_n	$x_n(\text{Euler})$	$x_n(\text{RK2})$	$x_n(\text{RK3})$	$x_n(\text{RK4})$
0	0,0	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1	0,1	0,90000	0,91000	0,90939	0,90941
2	0,2	0,82000	0,83680	0,83576	0,83579
3	0,3	0,75676	0,77858	0,77721	0,77724
4	0,4	0,70849	0,73435	0,73269	0,73273
5	0,5	0,67430	0,70364	0,70173	0,70177
6	0,6	0,65383	0,68632	0,68418	0,68423
7	0,7	0,64708	0,68247	0,68013	0,68018
8	0,8	0,65421	0,69223	0,68969	0,68975
9	0,9	0,67541	0,71569	0,71298	0,71304
10	1,0	0,71079	0,75279	0,74994	0,75002
11	1,1	0,76027	0,80326	0,80032	0,80040
12	1,2	0,82347	0,86655	0,86355	0,86365

No Exercício 4.2 convidamos o leitor a refazer os cálculos conduzindo a estes resultados. Compare também com os resultados dos métodos de Taylor apresentados no Exemplo 4.5.

4.4 Dimensões superiores

O nosso próximo objetivo é convencer o leitor de que os métodos numéricos apresentados anteriormente se estendem facilmente para equações diferenciais de ordem 1 em qualquer dimensão $d \geq 1$. Desta forma, mediante o argumento de redução na Seção 2.5.1, eles também podem ser aplicados a equações diferenciais de qualquer ordem, em qualquer dimensão.

De fato, consideremos o problema de valor inicial (4.1) com $x = (x^1, \dots, x^d)$ e $x_0 = (x_0^1, \dots, x_0^d)$ tomando valores em \mathbb{R}^d . É imediato como estender o método de Euler para este contexto: tome

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ x_n^i = x_{n-1}^i + F^i(t_{n-1}, x_{n-1})h \text{ para } i = 1, \dots, d, \end{cases} \quad (4.25)$$

onde F^1, \dots, F^d representam as coordenadas da função F . Para $d = 1$ isto é o mesmo que (4.5).

Analogamente, a versão em dimensão d do método de Taylor de ordem k está dada por

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ F_j^i(t_{n-1}, x_{n-1}) = \partial_t F_{j-1}^i(t_{n-1}, x_{n-1}) + \sum_{i=1}^d \partial_{x^i} F_{j-1}^i(t_{n-1}, x_{n-1}) F^i(t_{n-1}, x_{n-1}), \\ x_n^i = x_{n-1}^i + \sum_{j=1}^k F_j^i(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{h^j}{j!} \end{cases} \quad (4.26)$$

para $i = 1, \dots, d$ e $j = 1, \dots, k$. Para $d = 1$ isto é o mesmo que (4.18).

Finalmente, a versão em dimensão d do método de Runge–Kutta (4.22) é

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1^i = F^i(t_{n-1}, x_{n-1}), \\ k_2^i = F^i(t_{n-1} + c_2h, x_{n-1} + a_{21}k_1h), \\ k_3^i = F^i(t_{n-1} + c_3h, x_{n-1} + (a_{31}k_1 + a_{32}k_2)h), \\ \vdots \\ k_l^i = F^i(t_{n-1} + c_lh, x_{n-1} + (a_{l1}k_1 + \cdots + a_{l,l-1}k_{l-1})h), \\ x_n^i = x_{n-1}^i + (b_1k_1 + \cdots + b_lk_l)h \end{cases} \quad (4.27)$$

para $i = 1, \dots, d$, onde $k_j = (k_j^1, \dots, k_j^d)$ para $j = 1, \dots, l$. Por exemplo, o método clássico de Runge–Kutta de ordem 4 (Exemplo 4.9) para o sistema de duas equações de ordem 1 e dimensão 1

$$\begin{cases} x' = f(t, x, y) \\ y' = g(t, x, y). \end{cases} \quad (4.28)$$

está dado por

$$\begin{cases} t_n = t_{n-1} + h, \\ k_1^1 = f(t_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}), \\ k_1^2 = g(t_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}), \\ k_2^1 = f(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_1^1h/2, y_{n-1} + k_1^2h/2), \\ k_2^2 = g(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_1^1h/2, y_{n-1} + k_1^2h/2), \\ k_3^1 = f(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_2^1h/2, y_{n-1} + k_2^2h/2), \\ k_3^2 = g(t_{n-1} + h/2, x_{n-1} + k_2^1h/2, y_{n-1} + k_2^2h/2), \\ k_4^1 = f(t_{n-1} + h, x_{n-1} + hk_3^1, y_{n-1} + hk_3^2), \\ k_4^2 = g(t_{n-1} + h, x_{n-1} + hk_3^1, y_{n-1} + hk_3^2), \\ x_n = x_{n-1} + (k_1^1 + 2k_2^1 + 2k_3^1 + k_4^1)h/6, \\ y_n = y_{n-1} + (k_1^2 + 2k_2^2 + 2k_3^2 + k_4^2)h/6. \end{cases} \quad (4.29)$$

Exemplo 4.11. Considere o seguinte problema de valor inicial de ordem 2:

$$\begin{cases} x'' = -x + 2x', \\ x(0) = 0, \\ x'(0) = 1, \end{cases}$$

no intervalo $0 \leq t \leq 1, 2$. Reduzindo à ordem 1, obtemos

$$\begin{cases} x' = y, \\ y' = -x + 2y, \\ x(0) = 0, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

que é o caso particular de (4.28) com $f(x, y) = y$ e $g(x, y) = -y + 2x$. Deixamos ao cuidado do leitor verificar que a solução é

$$\begin{cases} x(t) = te^t, \\ y(t) = (1 + t)e^t, \end{cases} \quad (4.30)$$

(isto pode ser encontrado usando os métodos que desenvolveremos no Capítulo 6 para resolver equações lineares). Na tabela a seguir comparamos esta solução exata com a solução aproximada calculada usando o método (4.29) com espaçamento $h = 0,1$:

n	t_n	$x_n(RK4)$	$y_n(RK4)$	$x_n(exata)$	$y_n(exata)$
0	0,0	0,00000	1,00000	0,00000	1,00000
1	0,1	0,11052	1,21569	0,11052	1,21569
2	0,2	0,24428	1,46568	0,24428	1,46568
3	0,3	0,40496	1,75481	0,40496	1,75482
4	0,4	0,59673	2,08855	0,59673	2,08855
5	0,5	0,82436	2,47308	0,82436	2,47308
6	0,6	1,09327	2,91538	1,09327	2,91539
7	0,7	1,40962	3,42337	1,40963	3,42338
8	0,8	1,78042	4,00596	1,78043	4,00597
9	0,9	2,21363	4,67323	2,21364	4,67325
10	1,0	2,71827	5,43655	2,71828	5,43656
11	1,1	3,30457	6,30873	3,30458	6,30875
12	1,2	3,98412	7,30424	3,98414	7,30426
13	1,3	4,77006	8,43936	4,77009	8,43938
14	1,4	5,67725	9,73245	5,67728	9,73248
15	1,5	6,72250	11,20418	6,72253	11,20422
16	1,6	7,92481	12,87784	7,92485	12,87788
17	1,7	9,30566	14,77960	9,30571	14,77966
18	1,8	10,88931	16,93895	10,88937	16,93901
19	1,9	12,70313	19,38902	12,70320	19,38909
20	2,0	14,77803	22,16708	14,77811	22,16717

Vemos que após 20 iterações os resultados numéricos permanecem corretos até a terceira casa decimal.

4.5 Estimativas de erro

Nesta seção voltamos a analisar a questão das estimativas de erro, formalizando um pouco mais alguns conceitos introduzidos na Seção 4.1.1 e estendendo boa parte da discussão (aqui não falaremos de erros de arredondamento) para a classe muito mais ampla dos métodos numéricos de um passo, que inclui todos os métodos numéricos definidos previamente.

Continuamos considerando um problema de valor inicial em (4.1) onde $F : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}^d$ é uma função contínua e localmente lipschitziana em x definida num aberto \mathcal{U} de \mathbb{R}^{1+d} contendo (t_0, x_0) . Consideraremos apenas *métodos numéricos de um passo*, ou seja, cuja relação de recorrência tem a forma

$$x_n = x_{n-1} + \Phi(t_{n-1}, x_{n-1}, h)h \text{ para } n \geq 1, \quad (4.31)$$

para alguma função contínua $\Phi : \mathcal{U} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ que depende de F . Nos principais resultados suporemos que Φ é lipschitziana em x , no sentido de que existem constantes positivas α e h_0 tais que

$$\|\Phi(t, x, h) - \Phi(t, \bar{x}, h)\| \leq \alpha \|x - \bar{x}\| \text{ para quaisquer } (t, x), (t, \bar{x}) \in \mathcal{U} \text{ e } 0 < h < h_0. \quad (4.32)$$

Deixamos ao cuidado do leitor (Exercício 4.7) verificar que todos os métodos apresentados anteriormente neste capítulo pertencem a esta classe, inclusive com Φ lipschitziana em x , desde que a função F seja suficientemente regular.

4.5.1 Erro global e erro de truncamento

Chamamos *erro global* de um método numérico o valor máximo da norma $\|E_n\|$ da diferença

$$E_n = x_n - x(t_n), \quad n = 1, \dots, N \quad (4.33)$$

entre o valor calculado e o valor exato da solução em cada iteração do método. O nosso objetivo principal é entender como majorar este erro global.

Dizemos que um dado método numérico é *convergente* se, para todo problema de valor inicial da forma (4.1) e todo $L > 0$, o erro global converge para 0 quando o espaçamento tende para 0. De forma um pouco mais precisa, convergência significa que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \max \{ \|E_n\| : 1 \leq n \leq N \} = 0 \quad (4.34)$$

para toda função $F : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}^d$ contínua e lipschitziana em x , todo ponto $(t_0, x_0) \in \mathcal{U}$ e todo $L > 0$ tal que $[t_0, t_0 + L] \times \{x_0\} \subset \mathcal{U}$. Lembre que $h = L/N$. Também usaremos uma versão quantitativa desta noção: dado $p > 0$, diremos que o método numérico é *convergente de ordem p* se

$$\max \{ \|E_n\| : 1 \leq n \leq N \} = O(h^p) \quad (4.35)$$

para todo problema de valor inicial da forma (4.1) e todo $L > 0$.

Convergência é o requisito básico para que um método numérico seja útil em aplicações. Mas não é uma propriedade fácil de analisar diretamente, uma vez que normalmente o erro global não é conhecido. A abordagem que vamos esboçar a seguir passa por obter informação sobre o erro global a partir de outro tipo de erro, mais fácil de identificar na maioria dos casos.

Chamamos *erro de truncamento* à norma $\|e_n\|$ da diferença

$$e_n = x(t_{n-1}) + \Phi(t_{n-1}, x(t_{n-1}), h)h - x(t_n), \quad n = 1, \dots, N, \quad (4.36)$$

introduzida em cada iteração pela aproximação utilizada pelo método numérico. Normalmente, não é difícil estimar o erro de truncamento. Por exemplo, vimos que $e_n = O(h^{k+1})$ no caso do método de Taylor de ordem $k \geq 1$ e que $e_n = O(h^3)$ no caso do método de Heun (Seção 4.3.1). No que concerne os métodos de Runge–Kutta nos Exemplos 4.8 e 4.9, confira o Exercício 4.6.

Dizemos que um dado método numérico é *consistente* se a expressão e_n/h converge uniformemente para 0 quando o espaçamento vai para 0, ou seja,

$$\lim_{h \rightarrow 0} \max \left\{ \frac{\|e_n\|}{h} : 1 \leq n \leq N \right\} = 0 \quad (4.37)$$

para todo problema de valor inicial da forma (4.1) e todo $L > 0$. Heuristicamente, isto significa que as iterações do método numérico se aproximam uniformemente do

fluxo da equação diferencial quando o espaçamento h vai para zero, com uma estimativa polinomial em h . Além disso, dado $p > 0$ diremos que o método numérico é *consistente de ordem p* se

$$\max \{ \|e_n\| : 1 \leq n \leq N \} = O(h^{p+1}) \quad (4.38)$$

para todo problema de valor inicial da forma (4.1) e todo $L > 0$. Claro que isto implica que o método é consistente.

Supondo que Φ é lipschitziana em x , conforme (4.32), podemos relacionar o erro de truncamento com o erro global de uma forma simples. De fato, das definições dos dois tipos de erro vemos que

$$\begin{aligned} E_n &= x_n - x(t_n) \\ &= x_{n-1} + \Phi(t_{n-1}, x_{n-1}, h)h + e_n - x(t_{n-1}) - \Phi(t_{n-1}, x(t_{n-1}), h)h \\ &= E_{n-1} + e_n + (\Phi(t_{n-1}, x_{n-1}, h) - \Phi(t_{n-1}, x(t_{n-1}), h))h. \end{aligned}$$

Usando a hipótese (4.32), concluímos que

$$\|E_n\| \leq (1 + \alpha h) \|E_{n-1}\| + \|e_n\| \text{ para todo } n \geq 1.$$

Agora, observando que $\|E_0\| = 0$, podemos aplicar o Lema 4.3 para concluir que

$$\|E_n\| \leq \frac{(e^{\alpha hn} - 1)}{\alpha} \frac{\|e_n\|}{h} \leq \frac{(e^{\alpha L} - 1)}{\alpha} \frac{\|e_n\|}{h} \text{ para todo } n \geq 1. \quad (4.39)$$

Esta desigualdade implica que

- se $\max \left\{ \frac{\|e_n\|}{h} : 1 \leq n \leq N \right\} \rightarrow 0$ então $\max \{ \|E_n\| : 1 \leq n \leq N \} \rightarrow 0$;
- se $\|e_n\| = O(h^{p+1})$ então $\|E_n\| = O(h^p)$.

Portanto, sob a hipótese de que Φ é lipschitziana em x , *todo método numérico consistente é convergente* e, para cada $p > 0$, *todo método numérico consistente de ordem $p > 0$ é convergente de ordem p* . Em particular, o método de Taylor de grau k é convergente (de ordem k) para todo $k \geq 1$. Mas vale a pena explorar esta ideia um pouco mais para obter informação adicional envolvendo outro conceito muito importante: estabilidade do método numérico.

4.5.2 Estabilidade

De acordo com o Teorema da Dependência Contínua (Teorema 2.22), as soluções (exatas) de um problema de valor inicial dependem de maneira contínua dos dados do problema, ou seja, das condições iniciais e da função F . A noção de estabilidade levanta a questão de saber se o mesmo vale para as soluções calculadas mediante um dado método numérico: pequenas modificações dos dados do problema acarretam apenas pequenas mudanças da sequência de resultados x_n ?

Em termos mais precisos, seja x_n , $n = 1, \dots, N$ a sequência gerada pelo método numérico de um passo (4.31) a partir de um dado inicial x_0 . Dizemos que um método numérico é *estável* se existem constantes positivas C_1 e C_2 tais que

$$\max\{\|x_n - \bar{x}_n\| : 1 \leq n \leq N\} \leq C_1 \|x_0 - \bar{x}_0\| + C_2 \max\{\|\omega_n\| : 0 \leq n \leq N-1\}, \quad (4.40)$$

onde \bar{x}_n , $n = 1, \dots, N$ representa a sequência calculada mediante qualquer método numérico perturbado da forma

$$\bar{x}_n = \bar{x}_{n-1} + \Phi(t_{n-1}, \bar{x}_{n-1}, h)h + \omega_{n-1}h \quad (4.41)$$

a partir de um dado inicial \bar{x}_0 .

Segue do teorema a seguir que todos os métodos que discutimos neste capítulo são estáveis:

Teorema 4.12. *Se Φ é lipschitziana em x então o método numérico de um passo (4.31) é estável.*

Demonstração. Sejam x_n , $n = 1, \dots, N$ e \bar{x}_n , $n = 1, \dots, N$ os resultados dos métodos de um passo

$$x_n = x_{n-1} + \Phi(t_{n-1}, x_{n-1}, h)h \text{ e } \bar{x}_n = \bar{x}_{n-1} + \Phi(t_{n-1}, \bar{x}_{n-1}, h)h + \omega_{n-1}h,$$

respectivamente. Para cada $n \geq 1$,

$$\begin{aligned} \|x_n - \bar{x}_n\| &\leq \|x_{n-1} - \bar{x}_{n-1}\| + \|\Phi(t_{n-1}, x_{n-1}, h) - \Phi(t_{n-1}, \bar{x}_{n-1}, h)\| h + \|\omega_{n-1}\| h \\ &\leq \|x_{n-1} - \bar{x}_{n-1}\| + \alpha \|x_{n-1} - \bar{x}_{n-1}\| h + \|\omega_{n-1}\| h \\ &= (1 + \alpha h) \|x_{n-1} - \bar{x}_{n-1}\| + \|\omega_{n-1}\| h \\ &\leq (1 + \alpha h) \|x_{n-1} - \bar{x}_{n-1}\| + \max\{\|\omega_j\| : 1 \leq j \leq N-1\} h. \end{aligned}$$

Aplicando o Lema 4.3 com $a = \alpha h$, $b = \max\{\|\omega_j\| : 0 \leq j \leq N-1\} h$ e $y_n = \|x_n - \bar{x}_n\|$, concluímos que

$$\|x_n - \bar{x}_n\| \leq e^{n\alpha h} \|x_0 - \bar{x}_0\| + \frac{(e^{n\alpha h} - 1)}{\alpha} \max\{\|\omega_j\| : 0 \leq j \leq N-1\} h. \quad (4.42)$$

Para concluir, basta tomar

$$C_1 = e^{\alpha L} \text{ e } C_2 = \frac{e^{\alpha L} - 1}{\alpha},$$

notando que $nh \leq Nh = L$ para todo $n = 1, \dots, N$. \square

Isto também conduz ao seguinte resultado, que por vezes é chamado *teorema fundamental da teoria dos métodos de um passo*:

Teorema 4.13. *Todo método numérico de um passo (4.31) que é consistente (respectivamente, consistente de ordem p) e estável também é convergente (respectivamente, convergente de ordem p).*

Demonstração. Pela definição (4.36) do erro de truncamento,

$$x(t_n) = x(t_{n-1}) + \Phi(t_{n-1}, x(t_{n-1}), h)h - e_n \text{ para cada } n \geq 1.$$

Esta identidade pode ser vista como um método numérico perturbado da forma (4.41), ou seja, com $\bar{x}_n = x(t_n)$ e $\omega_{n-1} = e_n/h$. Então, pela hipótese de estabilidade,

$$\begin{aligned} \max \{ \|E_n\| : 0 \leq n \leq N \} &= \max \{ \|x_n - \bar{x}_n\| : 1 \leq n \leq N \} \\ &\leq C_2 \max \left\{ \frac{\|e_n\|}{h} : 1 \leq n \leq N \right\} \end{aligned} \quad (4.43)$$

(note que neste caso $x_0 = \bar{x}_0$). A hipótese de consistência significa que a expressão do lado direito vai para zero quando h vai para zero. Então a expressão do lado direito também vai para zero quando h vai para zero, o que significa que o método é convergente.

Analogamente, (4.43) também mostra que se o método é consistente de ordem p então ele é convergente de ordem p . \square

Cabe observar que o enunciado se estende para uma classe ainda mais ampla de métodos numéricos e também que a recíproca também é verdadeira (todo método convergente é consistente e estável), desde que Φ satisfaça hipóteses adequadas. Nessa direção, confira o Exercício 4.11.

4.6 Experimento: curvas de nível

O modo mais eficaz de descrever o comportamento qualitativo e quantitativo de uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é, sem dúvida, por meio do respectivo gráfico $\{(x, f(x)) : x \in \mathbb{R}\}$. No caso de funções $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ o gráfico $\{(x, y, f(x, y)) : x, y \in \mathbb{R}\}$ ainda pode ser um instrumento muito útil mas a sua visualização é bem mais delicada do que no caso anterior, por se tratar de um objeto que vive no espaço 3-dimensional.

Uma alternativa importante é utilizar as *curvas de nível* da função:

$$S_c = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : f(x, y) = c\}, \quad c \in \mathbb{R}.$$

Observe que as curvas de nível correspondem, simplesmente, às interseções do gráfico com os planos horizontais, tal como ilustrado na Figura 4.5. Um exemplo clássico do uso desta técnica está dado pela cartografia, que descreve as elevações do terreno de forma precisa por meio das curvas de altitude constante.

Em princípio, curvas de nível podem ser encontradas resolvendo a equação

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

por meio do método de Newton (veja o Apêndice B), ou outro método numérico iterativo. No entanto, essa abordagem não está isenta de dificuldades devidas, sobretudo, à presença de mais que uma variável independente. No que segue descrevemos uma abordagem alternativa, que faz uso da teoria das equações diferenciais.

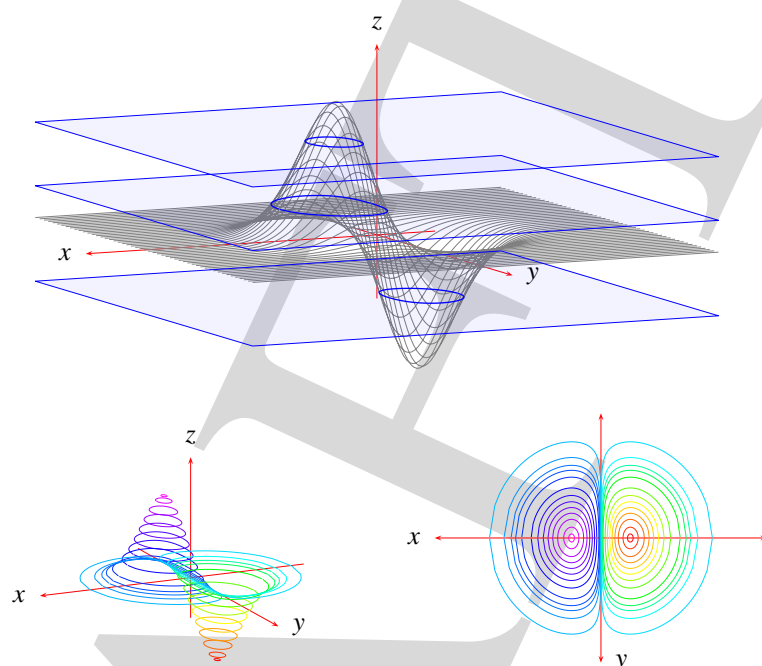


Figura 4.5: Gráfico de uma função $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ e sua relação com as curvas de nível.

Suponha que a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é de classe C^1 e seja $\nabla f = (\partial_x f, \partial_y f)$ o seu gradiente. Uma propriedade importante deste campo de vetores é que ele é ortogonal às curvas de nível em todo ponto. Equivalentemente, o campo de vetores perpendicular

$$F(x, y) = \nabla f(x, y)^\perp = (-\partial_y f, \partial_x f) \quad (4.44)$$

é tangente¹ à curva de nível. Em outras palavras, as *curvas de nível da função f são formadas por trajetórias do campo de vetores F* .

Desta forma, podemos obter aproximações das curvas de nível da função f aplicando ao campo de vetores F um dos métodos de integração numérica introduzidos neste capítulo. De fato, o objetivo geral da presente aplicação computacional é, precisamente, comparar a eficácia de diferentes métodos numéricos na resolução deste problema.

Como ilustração, consideramos a família de funções

$$f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(x, y) = -A \log x + Bx + C \log y - Dy. \quad (4.45)$$

A motivação vem do Exercício 1.29: funções desta forma são integrais primeiras da equação de Lotka-Volterra (1.17); equivalentemente, toda solução da equação está contida em alguma curva de nível da função f .

¹Implicitamente, estamos supondo que o gradiente não se anula: num ponto em que o gradiente é zero a curva de nível pode não ser diferenciável, ela pode não ter direção tangente.

Objetivos:

1. Escreva, em código do MATLAB/Octave ou outro ambiente computacional, funções correspondentes aos métodos de integração numérica de equações diferenciais introduzidos neste capítulo: Euler, Taylor de ordem 2 e 3, Heun, Kutta de ordem 3 e Runge-Kutta de ordem 4.

Por exemplo, $\mathbf{x} = \text{Euler}(t_0, t_{fin}, h, \mathbf{x}_0, F)$ onde:

- t_0 é o tempo inicial, t_{fin} é o tempo final, h é o espaçamento, \mathbf{x}_0 é a condição inicial e F é a função que define a equação diferencial.
 - \mathbf{x} é o vetor contendo a solução aproximada da equação diferencial calculada pelo método de Euler.
2. Use cada uma dessas funções para calcular soluções aproximadas da equação $(x, y)' = F(x, y) = \nabla f(x, y)^\perp$ para diferentes condições iniciais, de forma a obter um esboço das curvas de nível da função f em (4.45) com $A = B = -1$ e $C = D = 1$. Represente os resultados graficamente (confira as Figuras 1.6 e 4.6).
 3. Compare os tempos de execução e os erros cometidos pelos diferentes métodos numéricos. Ao comparar, é importante usar a mesma malha para todos os métodos. Note que malhas grosseiras podem ajudar a perceber as diferenças de desempenho entre métodos numéricos de ordem alta. Discuta as diferenças e as vantagens de cada método.
 4. Avalie a função f sobre as soluções numéricas encontradas por cada método, observando o erro cometido em diferentes malhas.
 5. Considere o seguinte método para melhorar os resultados obtidos em cada passo do método:
 - (a) dada a solução aproximada (x_n, y_n) no instante nh , utilize um dos métodos introduzidos neste capítulo para obter uma aproximação (\hat{x}, \hat{y}) para o instante $(n + 1)h$;
 - (b) na direção definida por $\nabla f(\hat{x}, \hat{y})^\perp$, execute um método iterativo para localização de zeros (por exemplo, o método de Newton), com passo inicial (\hat{x}, \hat{y}) , para encontrar uma aproximação melhor (x_{n+1}, y_{n+1}) da solução, sobre a curva $f(x, y) = f(x_0, y_0)$.

No Exercício 4.13 tiramos proveito desta análise para concluir que as trajetórias da equação (1.17) no primeiro quadrante são todas periódicas. Portanto, as populações das duas espécies (predador e presa) oscilam periodicamente entre um valor mínimo e um valor máximo.

4.7 Exercícios

Exercício 4.1. Dada uma função $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^2 num intervalo compacto I , mostre que existe $C > 0$ tal que

$$|f(b) - [f(a) + m_{a,b}(b - a)]| \leq C(b - a)^3 \text{ para quaisquer } a < b \text{ em } I,$$

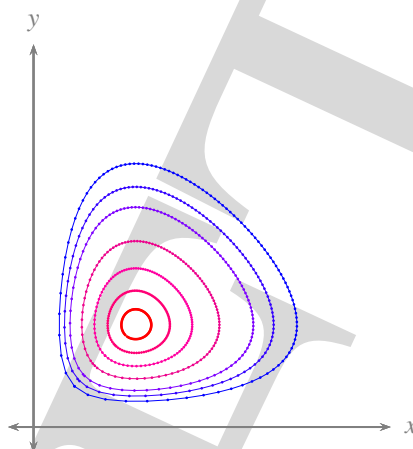


Figura 4.6: Curvas de nível da função (4.45) calculadas por meio do método de Runge-Kutta de ordem 4 para os valores $A = B = -1$ e $C = D = 1$.

onde $m_{a,b} = (f'(a) + f'(b))/2$. Agora justifique que o método de Heun (Seção 4.3.1) é de ordem 2.

Exercício 4.2 (C). Execute os métodos numéricos que conduzem aos resultados nos Exemplos 4.1, 4.5, 4.7, e 4.10.

Exercício 4.3 (C). Use o método de Euler com $h = 0,1$ e com $h = 0,025$ e o método de Runge-Kutta de ordem 4 com $h = 0,1$ para resolver o problema de valor inicial

$$\begin{cases} x' = \cos^2 x, \\ x(0) = \pi/4 \end{cases}$$

numericamente no intervalo $[0,3]$. Compare e discuta os resultados, observando que precisamos calcular a função F uma vez em cada iteração do método de Euler e quatro vezes em cada iteração do método de Runge-Kutta de ordem 4.

Exercício 4.4 (C). Utilize os métodos de Taylor de ordem 2 e 3 para resolver cada uma das equações diferenciais a seguir no respectivo intervalo $(t_0 - 5, t_0 + 5)$:

1. $x' - tx = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (1, 1)$.
2. $x' - e^{2t} + 1 = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (1, 0)$.
3. $tx' - 1 = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (1, 1)$.
4. $x' - e^{2t-x} = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (0, 0)$.

Compare com os resultados dos Exercícios 1.2, 1.30, 2.11 e 3.25.

Exercício 4.5 (C). Utilize os métodos de Heun, Kutta de ordem 3 e Runge-Kutta de ordem $k = 4$ com espaçamento $h = 0,1$ para resolver cada uma das equações diferenciais a seguir no respectivo intervalo $(t_0 - 5, t_0 + 5)$:

1. $x' - tx = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (1, 1)$.
2. $x' - e^{2t} + 1 = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (1, 0)$.
3. $tx' - 1 = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (1, 1)$.
4. $x' - e^{2t-x} = 0$ com condição inicial $(t_0, x_0) = (0, 0)$.

Compare com os resultados dos Exercícios 1.2, 1.30, 2.11 3.25 e 4.4.

Exercício 4.6. Verifique que os métodos de Runge–Kutta nos Exemplos 4.8 e 4.9 são convergentes de ordem 3 e 4, respectivamente.

Exercício 4.7. Verifique que os métodos de Taylor e os métodos de Runge–Kutta satisfazem as condições na definição de método de um passo, desde que nos restrinjamos a funções F suficientemente regulares.

Exercício 4.8 (C). Use o método de Euler e o método de Taylor de ordem 2 com espaçamento $h = 0,1$ para calcular a solução da equação diferencial $x' = x^3$ com condição inicial $x(0) = 1$ no intervalo $[0, 1]$. Estime os erros globais em cada caso. Represente graficamente a solução e as curvas poligonais associadas aos dois métodos numéricos. Observe que a solução é convexa e discuta o efeito que isso tem sobre o erro em cada um dos dois métodos. O que muda quando a solução da equação diferencial é concava?

Exercício 4.9. Mostre que o método de Runge–Kutta (4.22) com l estágios é consistente

$$\text{se } \sum_{i=1}^l b_i = 1.$$

Exercício 4.10. Supondo que F e Φ são de classe C^2 , mostre que o método geral de um passo (4.31) é consistente de ordem 2 se e somente se

$$F_0(t_n, x_n) = \Phi(t_n, x_n, 0), \quad F_1(t_n, x_n) = 2\partial_h \Phi(t_n, x_n, 0) \text{ e } F_2(t_n, x_n) \neq 3\partial_{h,h}^2 \Phi(t_n, x_n, 0)$$

onde F_0, F_1, F_2 são as funções definidas na Seção 4.2. Generalize o resultado para consistência de qualquer ordem $k \geq 2$.

Exercício 4.11. Para o método geral de um passo (4.31):

1. Supondo que Φ é lipschitziana em x , mostre que se o método é convergente então ele é consistente.
2. Supondo que Φ é de classe C^k , mostre que se o método é convergente de ordem k então ele é consistente de ordem k .

[Dica: Use o Exercício 4.10.]

Exercício 4.12 (C). Utilize as funções computacionais desenvolvidas na Seção 4.6 para calcular as curvas de nível das funções

1. $f(x, y) = x^2 + y^2$

$$2. f(x, y) = x^2 - y^2.$$

Compare os resultados obtidos mediante os diferentes métodos de integração.

Exercício 4.13. Use o Exercício 1.29 e a análise numérica na Seção 4.6 para mostrar que as soluções da equação de Lotka-Volterra (1.17) no quadrante $\{x_1 > 0, x_2 > 0\}$ são curvas fechadas.

Exercício 4.14 (C). Considere a sequência de funções $f_m : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dadas, para cada $m \in \mathbb{N}$, por

$$f_m(x, y) = y^2 - \frac{(m-2)^2}{2} \left(x^2 - x^{\frac{2m}{m-2}} \right).$$

Para $m = 3$ e $m = 4$, calcule curvas de nível $\{(x, y) : f_m(x, y) = f_m(\epsilon, 0)\}$ para diferentes valores de ϵ entre 0 e $\epsilon_m = \left(\frac{m-2}{m}\right)^{\frac{m-2}{4}}$. Existem curvas de nível fechadas? Que acontece com a curva de nível quando $\epsilon = \epsilon_m$? Que pode dizer sobre a curva de nível quando $\epsilon \rightarrow 0^+$?

Exercício 4.15. Demonstre o Teorema 4.4.

Exercício 4.16. Verifique que os métodos de Taylor e de Runge–Kutta satisfazem a condição de extrapolação de Richardson (4.47).

Exercício 4.17 (C). Aplique o método de extrapolação de Richardson com espaçamento $h = 0, 1$:

1. aos Exercícios 4.4 e 4.5; compare as conclusões com os resultados obtidos nesses exercícios.
2. aos problemas nos Exemplos 4.1, 4.5, 4.7 e 4.10; compare as conclusões com os resultados do Exercício 4.2.

Exercício 4.18. A solução exata da equação linear $x' = -cx$ com condição inicial $x(0) = x_0$ é $x(t) = x_0 e^{-ct}$. Escreva o método de Euler com espaçamento $h > 0$ para esta equação e analise o seu comportamento, para diferentes valores de c e h . Especificamente, mostre que:

1. Existe $h_1 > 0$ tal que a sequência $(x_n)_n$ gerada pelo método de Euler converge para zero se $h \leq h_1$. No entanto, h_1 depende de c e vai para zero quando c vai para infinito.
2. existem $h_2 > 0$ e $c_2 > c_1 > 0$ tais que o erro total da aproximação está em $[c_1 h, c_2 h]$ para todo $h \leq h_2$. No entanto, h_2 depende de c e vai para zero quando c vai para infinito.

Exercício 4.19 (C). Considere a equação diferencial $x' = -cx$ com condição inicial $x(0) = 1$.

1. Use o método de Euler para aproximar a solução do problema com $c = 15$ no intervalo $[0, 1]$ usando $h = 2^{-n}$ para $n = 1, 2, 3, \dots$. O que está acontecendo com as soluções para $n = 1, 2$ e 3 ? Compare os resultados obtidos com a solução exata $x(t) = e^{-ct}$. Para melhor visualização, represente o gráfico do erro em escala logarítmica.
2. Repita a análise anterior para diferentes valores de c , positivos e negativos. Estime os valores de n necessários para obter erros da ordem de 10^{-2} , 10^{-4} e 10^{-6} . Relacione as suas observações com a análise no Exercício 4.18 e os comentários no início deste exercício.

[Observação: Neste exercício e no anterior, nos deparamos com um problema importante da análise numérica de equações diferenciais, chamado *rigidez* (em inglês: *stiffness*), que é caracterizado pela dificuldade de métodos numéricos para resolverem certas equações diferenciais. Em poucas palavras, o problema é que mesmo que o método numérico seja convergente, nem sempre a convergência é eficiente: pode acontecer que para obter uma boa aproximação seja necessário um espaçamento h tão pequeno que não seja realista. Tipicamente, isso ocorre quando algum termo da equação apresenta variação muito rápida dentro da malha utilizada. Voltaremos a este tema no Exercício 7.18 e na Seção 12.5.]

Exercício 4.20 (C). A equação diferencial SIR

$$\begin{cases} S' = -\beta SI \\ I' = \beta SI - \gamma I \\ R' = \gamma I \end{cases} \quad (4.46)$$

é um modelo matemático para a evolução de uma doença contagiosa não fatal. S representa o número de indivíduos susceptíveis de serem infectados, I o número de indivíduos infectados e R o número de indivíduos que se recuperaram da infecção. β é a taxa de transmissão da doença de um indivíduo infectado a um indivíduo susceptível e γ é a taxa de recuperação de um indivíduo infectado.

Por exemplo, $\beta = 1/2$ e $\gamma = 1/3$ para a gripe de Hong Kong, $\beta = 20/27389$ e $\gamma = 1/14$ para a varíola e $\beta = 1/16$ e $\gamma = 1/20$ para a ferrugem do milho.

1. Use os métodos de Euler, Heun, Kutta de ordem 3 e Runge—Kutta de ordem 4 para calcular soluções aproximadas de (4.46) para diferentes condições iniciais e para cada uma das doenças mencionadas. Represente os resultados graficamente e analise-os.
2. Observe que $S + I + R$ é constante ao longo do tempo e use essa observação para comparar a precisão dos métodos utilizados no item anterior.

[Observação: Em situações concretas os valores de β e γ não são conhecidos: eles são inferidos a partir da evolução observada no período inicial da doença, para poderem ser usados no cálculo da evolução subsequente.]

Exercício 4.21 (C). A descida de um corpo em queda livre pode ser modelada pela equação diferencial

$$x'' = g - c(x')^2,$$

onde x é a distância com relação ao ponto de lançamento, $g > 0$ é a aceleração da gravidade e $c > 0$ é a constante de atrito com a atmosfera.

Tome $g = 9,8$ e $c = 0,01$ e considere a condição inicial $x(0) = x'(0) = 0$. Estime numericamente a distância percorrida nos primeiros 5 segundos. Verifique que a velocidade da queda converge para um valor limite quando $t \rightarrow +\infty$, estime esse valor e interprete-o.

4.8 Notas

Nascido em 1707 na cidade suíça de Basileia, Leonhard Euler é um dos grandes matemáticos de todos os tempos e provavelmente o mais prolífico. As contribuições científicas do chamado *Príncipe das Matemáticas* estendem-se por diversas áreas da Física, Astronomia e Engenharia, além de praticamente todas as disciplinas da Matemática. A publicação do método de Euler, em 1768, pode ser considerada o ato fundador da análise numérica das equações diferenciais e de sua aplicação na resolução de problemas do mundo real. Fez carreira em diversas cortes europeias, especialmente em Berlim e São Petesburgo. Em 1766 aceitou convite da tsarina Catarina, a Grande, para voltar à Rússia. Vítima do gosto da imperatriz por aprender matemática muito cedo pela manhã, no gelado inverno russo, Euler viu a sua saúde deteriorar-se e faleceu em São Petersburgo em 1783. O fato de que o método de Euler é convergente foi provado pela primeira vez por Cauchy em 1824.

O teorema de Taylor (ou *fórmula de Taylor*) foi enunciado pela primeira vez em 1712 pelo matemático inglês Brook Taylor (1685–1731), embora certas versões já tivessem sido mencionadas antes. No entanto, uma expressão explícita para o termo de resto só foi provada muito mais tarde, em 1772, por Joseph-Louis Lagrange. Inicialmente o teorema passou despercebido e a sua importância só foi reconhecida a partir do trabalho de Lagrange, o qual chamou a fórmula de Taylor de “o principal fundamento do cálculo diferencial”. Hoje em dia, o teorema de Taylor é o ponto de partida da chamada análise assintótica e uma das ferramentas mais utilizadas na grande maioria das áreas de aplicações da matemática.

A primeira publicação de um dos métodos que agora chamamos de Runge–Kutta foi devida ao matemático alemão Carl David Tolmé Runge (1856–1927) em 1895, embora métodos numéricos por estágios houvessem sido mencionados anteriormente. À parte do seu trabalho pioneiro nesta área, Runge também deu importantes contribuições à Matemática Física, especialmente na espectroscopia. O chamado método clássico de Runge–Kutta, de ordem 4, foi descrito em 1905 pelo também alemão Martin Wilhelm Kutta (1867–1944), o qual estendeu substancialmente o trabalho de Runge, em particular para sistemas de equações diferenciais.

A técnica de *extrapolação de Richardson* foi proposta em 1910 pelo matemático inglês Lewis Richardson (1881–1953), para melhorar a ordem de convergência de métodos numéricos sem aumentar significativamente o seu custo computacional. Suponha

que o método é de ordem $p > 0$ e a variação do erro com o espaçamento pode ser explicitada da forma

$$E_n(h) = x_n(h) - x(t_n) = D(t_n)h^p + \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad (4.47)$$

onde a função D não depende de h (isto vale para os métodos de Taylor e de Runge–Kutta, de acordo com o Exercício 4.16). Lembre que $t_n = t_0 + nh$. Considerando também o espaçamento $h/2$, vemos que

$$2^p x_{2n}(h/2) - 2^p x(t_n) - x_n(h) + x(t_n) = 2^p E_{2n}(h/2) - E_n(h) = \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Desta forma, obtemos a seguinte aproximação de ordem $p + 1$:

$$x(t_n) = \frac{x_n(h) - 2^p x_{2n}(h/2)}{1 - 2^p} + \mathcal{O}(h^{p+1}). \quad (4.48)$$

DRAFT