

Métodos de passo simples para equações diferenciais ordinárias

Nelson Kuhl

1. Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Métodos de Passo Simples Explícitos

1.1 Introdução

Para a maioria das equações diferenciais ordinárias, não é possível obter uma expressão para a solução, e portanto é necessário calcular aproximações numericamente. Nestas notas, trataremos apenas de equações escalares, pois isto facilita a apresentação dos métodos numéricos. A extensão para sistemas de equações é em geral imediata ([1], [2]).

Considere o problema de valor inicial escalar

$$\dot{x} = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0, \quad (1)$$

onde f está definida em um domínio do R^2 . Sob certas condições de regularidade para f , a equação (1) admite solução única

$$x(t) = \varphi(t; t_0, x_0), \quad t \in (a, b),$$

onde a dependência em relação aos dados iniciais é explicitada. Quando não houver ambigüidade, denotaremos a solução por $x(t)$.

Abaixo discutiremos alguns métodos para a solução numérica de (1). As técnicas apresentadas podem ser úteis para o estudo posterior do tratamento numérico de equações diferenciais parciais e equações diferenciais estocásticas. Nos restringiremos aos chamados métodos de passo simples explícitos; especificamente, aos métodos Runge-Kutta explícitos. Outros métodos, tais como métodos de passo múltiplo e extrapolação podem ser encontrados na literatura ([1], [2]).

1.2 Método de Euler

O método de Euler é o método mais simples para a resolução numérica de uma equação diferencial ordinária. Ele é obtido a partir da definição de derivada como um limite de quociente de diferenças.

Para h suficientemente pequeno, temos

$$\dot{x}(t) \approx \frac{x(t+h) - x(t)}{h}.$$

Se queremos calcular a solução aproximada da equação (1) em um intervalo $[t_0, T]$, é necessário discretizar o domínio e obter uma aproximação para a derivada nos pontos do domínio discreto.

Fixe então um inteiro $N \geq 2$ e divida o intervalo $[t_0, T]$ em N subintervalos de comprimento $h = (T - t_0)/N$. Temos então uma partição do intervalo formada pelos pontos $t_n = t_0 + nh$, $0 \leq n \leq N$. Denote por x_n uma aproximação para $x(t_n)$. A equação diferencial (1) é aproximada por uma equação de diferenças obtida do quociente de diferenças acima, gerando o *Método de Euler* ou *método poligonal*:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \quad x_0 = x(t_0). \quad (2)$$

Ele é um método de *passo simples* pois para determinarmos x_{n+1} basta conhecer x_n .

Exemplo 1. Considere o problema de valor inicial

$$\dot{x} = -2tx^2, \quad x(0) = 1$$

cuja solução exata é dada por $x(t) = 1/(1 + t^2)$. Usando o método de Euler, obtemos as aproximações x_n para diferentes tamanhos do passo h mostradas na Tabela 1. Os valores observados para os erros $e_n = x(t_n) - x_n$ decaem proporcionalmente a h .

Este exemplo é típico do comportamento do método de Euler. Sob condições bem gerais para f , pode-se mostrar que o erro decai proporcionalmente ao tamanho h do passo. Dizemos que o método de Euler tem ordem de convergência igual a 1.

1.3 Método poligonal melhorado, método do trapézio e método de Heun

O método de Euler pode ser melhorado usando-se o seguinte argumento: para calcularmos x_{n+1} , usamos primeiro o método de Euler para avançar metade do intervalo, e com a inclinação f obtida neste ponto intermediário, calculamos a nova aproximação. Este argumento gera o *método poligonal melhorado*, descrito pela fórmula

$$x_{n+1} = x_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}f(t_n, x_n)\right).$$

A fórmula acima pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_n, x_n) \\k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{1}{2}hk_1\right), \\x_{n+1} &= x_n + hk_2\end{aligned}\tag{3}$$

que é conveniente para uma implementação computacional. O método poligonal melhorado foi deduzido de forma heurística, e pode-se mostrar que a sua ordem de convergência é melhor do que a do método de Euler.

Exemplo 2. O método poligonal melhorado foi aplicado ao problema de valor inicial do Exemplo 1, com os resultados mostrados na Tabela 2 para diferentes tamanhos h do passo. Os resultados sugerem que o erro decai proporcionalmente a h^2 .

Quando o erro decai como h^2 , dizemos que a ordem de convergência é 2 ou quadrática. Pode-se mostrar que o método poligonal melhorado tem esta propriedade.

O custo computacional de um método numérico para a resolução de equações diferenciais ordinárias é em geral definido pelo número de vezes que a função f é avaliada. O método (3) tem ordem de convergência 2, porém a cada passo precisamos de duas avaliações de f , contra apenas uma no método de Euler. Se observarmos as Tabelas 1 e 2, vemos por exemplo que o método de Euler com passo $h = 0.001$ e o método poligonal melhorado com passo $h = 0.025$ geram aproximações comparáveis. No primeiro, 1000 avaliações da função são necessárias para se marchar de $t = 0$ a $t = 1$, enquanto que no segundo são necessárias 80 avaliações, o que é um ganho

considerável. Dependendo da precisão desejada, o aumento do custo a cada passo de um método de ordem maior é compensado pelo número menor de passos para se chegar ao instante final.

Muitos métodos são derivados a partir da representação integral da solução exata

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, x(t)) dt,$$

aproximando-se o lado direito por uma fórmula de quadratura numérica. Por exemplo, se usarmos a fórmula do trapézio, obtemos o *método do trapézio*:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_{n+1})). \quad (4)$$

Note que este método é *implícito*, pois para obtermos x_{n+1} precisamos resolver uma equação. Os métodos vistos anteriormente são *explícitos*. Métodos implícitos são importantes para certas classes de equações diferenciais e serão discutidos posteriormente.

A partir de (4) podemos derivar um método explícito usando a idéia de previsão-correção. Por exemplo, podemos calcular primeiro uma aproximação pelo método de Euler e substituí-la na fórmula (4). Obtemos então o *método de Heun*

$$\begin{aligned} x_{n+1}^{(P)} &= x_n + hf(t_n, x_n) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{2}h[f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_{n+1}^{(P)})] \end{aligned}$$

que pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, x_n) \\ k_2 &= f(t_n + h, x_n + hk_1) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2) \end{aligned} \quad (5)$$

Exercício 1. Resolva o problema do Exemplo 1 usando o método de Heun com diferentes tamanhos h do passo. Verifique se os resultados sugerem convergência quadrática.

t _n	x(t _n)	h=0.1		h=0.01		h=0.001	
		x _n	e _n	x _n	e _n	x _n	e _n
0.0	1.00000	1.00000	0.00000	1.00000	0.00000	1.00000	0.00000
0.1	0.99010	1.00000	-0.00990	0.99107	-0.00097	0.99020	-0.00010
0.2	0.96154	0.98000	-0.01846	0.96330	-0.00176	0.96171	-0.00018
0.3	0.91743	0.94158	-0.02415	0.91969	-0.00226	0.91766	-0.00022
0.4	0.86207	0.88839	-0.02632	0.86448	-0.00242	0.86231	-0.00024
0.5	0.80000	0.82525	-0.02525	0.80229	-0.00229	0.80023	-0.00023
0.6	0.73529	0.75715	-0.02185	0.73727	-0.00198	0.73549	-0.00020
0.7	0.67114	0.68835	-0.01721	0.67270	-0.00156	0.67130	-0.00015
0.8	0.60976	0.62202	-0.01226	0.61088	-0.00112	0.60987	-0.00011
0.9	0.55249	0.56011	-0.00763	0.55320	-0.00071	0.55256	-0.00007
1.0	0.50000	0.50364	-0.00364	0.50036	-0.00036	0.50004	-0.00004

Tabela 1. Metodo de Euler com tamanhos de passo diferentes. Os resultados indicam que o erro decai proporcionalmente a h.

t _n	x(t _n)	h=0.1		h=0.05		h=0.025	
		x _n	e _n	x _n	e _n	x _n	e _n
0.0	1.00000	1.00000	0.00000	1.00000	0.00000	1.00000	0.00000
0.1	0.99010	0.99000	0.00010	0.99007	0.00002	0.99009	0.00001
0.2	0.96154	0.96118	0.00036	0.96145	0.00009	0.96152	0.00002
0.3	0.91743	0.91674	0.00069	0.91727	0.00016	0.91739	0.00004
0.4	0.86207	0.86110	0.00096	0.86184	0.00023	0.86201	0.00006
0.5	0.80000	0.79889	0.00111	0.79974	0.00026	0.79994	0.00006
0.6	0.73529	0.73418	0.00111	0.73503	0.00026	0.73523	0.00006
0.7	0.67114	0.67014	0.00100	0.67091	0.00023	0.67109	0.00006
0.8	0.60976	0.60895	0.00080	0.60957	0.00018	0.60971	0.00004
0.9	0.55249	0.55191	0.00058	0.55236	0.00013	0.55246	0.00003
1.0	0.50000	0.49964	0.00036	0.49992	0.00008	0.49998	0.00002

Tabela 2. Metotdo poligonal melhorado com tamanhos de passo diferentes. Os resultados indicam que o erro decai proporcionalmente a h**2.

1.4 Erros de discretização, ordem de convergência e métodos Runge-Kutta

Métodos de passo simples explícitos são representados pela fórmula geral

$$x_{n+1} = x_n + h\Phi(t_n, x_n; h; f).$$

Exercício 2. Obtenha a expressão de Φ para os métodos de Heun e poligonal melhorado.

Um conceito importante para a análise dos métodos de passo simples é o *erro de discretização local* d_{n+1} em t_{n+1} definido por

$$d_{n+1} = x(t_{n+1}) - x(t_n) - h\Phi(t_n, x(t_n); h; f).$$

Ele é igual ao erro cometido ao marcharmos *um passo* com o método partindo da *solução exata* em t_n . Não deve ser confundido com o *erro de discretização global* e_n em t_n ,

$$e_n = x(t_n) - x_n,$$

que é o erro entre a solução exata e a aproximação calculada pelo método em t_n .

O erro de discretização local permite obter informações sobre o decaimento do erro de discretização global relativamente a h . Vejamos o que ocorre com o método de Euler. Para este método $\Phi(t, x; h; f) = f(t, x)$. Usando expansão em série de Taylor, temos:

$$\begin{aligned} x(t_{n+1}) &= x(t_n) + h\dot{x}(t_n) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(\theta_n) \\ &= x(t_n) + hf(t_n, x(t_n)) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(\theta_n) \end{aligned}$$

e portanto o erro de discretização local satisfaz

$$d_{n+1} = \frac{h^2}{2}\ddot{x}(\theta_n) = O(h^2)$$

se a solução for suficientemente regular.

Pode-se mostrar que, se para f suficientemente regular, o erro de discretização local decai como h^{p+1} , então o erro de discretização global decai como h^p . Dizemos então que o método tem

ordem de convergência p . Para os métodos de Heun e poligonal melhorado, usando-se expansão em Taylor para $x(t)$ e Φ , e as fórmulas

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= f(t, x(t)) \\ \ddot{x} &= f_t + f_x \dot{x} = f_t + f f_x \\ \frac{d^3 x}{dt^3} &= f_{tt} + f_{tx} \dot{x} + (f_t + f_x \dot{x}) f_x + f(f_{tx} + f_{xx} \dot{x}) \\ &= (f_{tt} + 2f f_{tx} + f^2 f_{xx}) + (f_t + f f_x) f_x\end{aligned}$$

obtemos $d_{n+1} = O(h^3)$, e portanto estes métodos têm ordem 2.

Os métodos Runge-Kutta são derivados procurando-se uma função Φ como uma média ponderada de f em pontos convenientemente escolhidos, buscando-se uma ordem de convergência fixada. Os métodos de Euler, de Heun e poligonal melhorado são métodos Runge-Kutta. Para métodos de ordem maior, é necessário usar expansões em Taylor de ordens maiores, e obter expressões para mais derivadas de $x(t)$ como as acima. A derivação destes métodos é tediosa, mas muitos podem ser encontrados na literatura. Como um exemplo, apresentamos o *método Runge-Kutta clássico*, que é um método de ordem 4 ($d_{n+1} = O(h^5)$):

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_n, x_n) \\ k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_2\right) \\ k_4 &= f(t_n + h, x_n + hk_3) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}h(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\end{aligned}$$

Exercício 3. Use o método Runge-Kutta clássico para resolver numericamente o problema do Exercício 1, com diferentes tamanhos do passo h . Verifique a ordem de convergência do método a partir dos resultados obtidos.

Para certas classes de equações diferenciais, os métodos explícitos não apresentam um bom desempenho. Para se ter uma idéia do que pode acontecer, resolva o seguinte exercício:

Exercício 4. O problema de valor inicial

$$\dot{x} = \lambda(x - \cos t) - \sin t, \quad x(0) = 0,$$

tem a solução exata $x(t) = \cos t - e^{\lambda t}$. Calcule soluções aproximadas no intervalo $[0, 1.5]$ usando o método de Euler com os valores do parâmetro dados por $\lambda = -50, -100$ e -400 . Para cada caso, apresente gráficos da solução aproximada com diferentes valores de h . Observe o comportamento, comparando com o gráfico da solução exata.

Métodos implícitos tem um comportamento melhor para problemas como o do exercício acima, e este fato está relacionado com o conceito de estabilidade absoluta. Estas questões serão tratadas adiante.

2. Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Estabilidade Absoluta e Métodos Implícitos

2.1 Introdução

Para certas equações diferenciais, a solução tem componentes cujo comportamento está associado a escalas de tempo diferentes. Por exemplo, podemos ter componentes da solução decaindo rapidamente a zero, e outras componentes decaindo lentamente ou tendendo a um estado estacionário. Após um pequeno intervalo de tempo, a contribuição das componentes que decaem rapidamente é desprezível. Ao aproximarmos a solução por um método numérico, poderíamos a partir de um certo instante não nos preocuparmos em calcular estas componentes com uma precisão alta. Porém, para equações deste tipo, há restrições severas de estabilidade numérica, e os métodos explícitos não apresentam um desempenho satisfatório. Estudaremos a seguir o conceito de estabilidade absoluta e discutiremos a importância do uso de métodos implícitos. Estas idéias serão aplicadas posteriormente no curso à resolução numérica de equações diferenciais parciais.

2.2 Estabilidade Absoluta

Considere o problema modelo

$$\dot{x} = \lambda x \quad x(0) = 1, \quad \lambda \in \mathbf{R} \quad \text{ou} \quad \lambda \in \mathbf{C}, \quad (6)$$

cuja solução exata é dada por $x(t) = e^{\lambda t}$. O estudo deste problema simples pode ser aplicado a equações não lineares, pois estas podem ser localmente aproximadas por uma equação da forma (6) após uma linearização em torno de uma solução. Para sistemas de equações diferenciais ordinárias, a linearização envolve o Jacobiano do campo f , e equações da forma (6) estão associadas a autovetores do Jacobiano, onde em λ aparecem os autovalores. Como os autovalores podem ser complexos, consideramos o caso geral $\lambda \in \mathbf{C}$.

Se aplicarmos o método de Euler à equação (6) obtemos a expressão

$$x_{n+1} = x_n + h\lambda x_n = (1 + h\lambda)x_n.$$

Suponha que λ é real negativo. Então a solução exata decai a zero quando t cresce. A solução aproximada calculada pelo método de Euler irá decrescer como $x(t_n)$ se e somente se o fator multiplicador $F(h\lambda) = 1 + h\lambda$ tiver módulo menor do que 1. Em certos problemas, isto implica em uma restrição muito severa para o tamanho do passo h .

Exercício 5. Tente explicar o comportamento observado no Exercício 4 a partir das considerações acima.

Se λ é complexo com parte real negativa, a solução exata também decai, e o mesmo comportamento é observado para a solução aproximada calculada pelo método de Euler se e somente se $|F(h\lambda)| < 1$.

Todos os métodos Runge-Kutta explícitos aplicados ao problema modelo (6) geram aproximações da forma $x_{n+1} = F(h\lambda)x_n$, onde o fator multiplicativo $F(h\lambda)$ é um polinômio em $h\lambda$. Por exemplo, para os métodos de Heun, poligonal melhorado e Runge-Kutta clássico temos

$$\begin{aligned} F(h\lambda) &= 1 + h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} && \text{(Heun e Poligonal Melhorado);} \\ F(h\lambda) &= 1 + h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2} + \frac{(h\lambda)^3}{6} + \frac{(h\lambda)^4}{24} && \text{(Runge-Kutta Clássico).} \end{aligned}$$

Se a parte real de λ é negativa, a condição necessária e suficiente para as aproximações decaírem como a solução exata é dada pelo fator multiplicativo ter módulo menor do que 1. Esta discussão motiva a seguinte definição.

Definição. Suponha que um método de passo simples, quando aplicado ao problema modelo (6), calcula as aproximações da solução pela expressão $x_{n+1} = F(h\lambda)x_n$. O conjunto

$$A = \{\mu \in \mathbf{C} : |F(\mu)| < 1\}$$

é chamado de *região de estabilidade absoluta*.

Para o método de Euler, a região de estabilidade absoluta é o interior da circunferência de raio 1 com centro em -1. A região de estabilidade absoluta pode ser determinada resolvendo-se primeiro a equação $F(\mu) = e^{i\theta}$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, e posteriormente desenhando-se a curva $\mu(\theta)$ no plano complexo. Algumas regiões são apresentadas na bibliografia ([1], [2]). Para se ter uma idéia do comportamento dos métodos vistos até agora, apresentamos os *intervalos de estabilidade absoluta* I , i.e., a intersecção de A com o eixo real:

$$\text{Euler,} \quad I = (-2, 0);$$

$$\text{Heun e Poligonal Melhorado,} \quad I = (-2, 0);$$

$$\text{Runge-Kutta Clássico,} \quad I = (-2.78, 0).$$

O tamanho h do passo deve ser escolhido de forma que para $Re(\lambda) < 0$ tenhamos $h\lambda \in A$. Se esta condição é violada, as aproximações calculadas pelo método não fazem sentido, e o procedimento é instável. Esta condição de estabilidade deve ser levada em conta especialmente quando resolvemos sistemas de equações diferenciais, pois neste caso o passo h deve ser escolhido de forma que, para todas as constantes de decaimento λ_j com $Re(\lambda_j) < 0$, tenhamos as condições $h\lambda_j \in A$ simultaneamente satisfeitas. Para se ganhar uma intuição sobre o problema, resolva o seguinte exercício.

Exercício 6. (Schwarz [1]) Considere o sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\dot{x}_1 = -56.375 x_1 + 18.625 x_2 \quad x_1(0) = 2$$

$$\dot{x}_2 = 55.875 x_1 - 19.125 x_2 \quad x_2(0) = 2$$

cuja solução exata é

$$x_1(t) = e^{-0.5t} + e^{-75t}$$

$$x_2(t) = 3e^{-0.5t} - e^{-75t}$$

Queremos aproximar a solução usando o método Runge-Kutta clássico. A componente que decai rapidamente é aproximada com quatro casas decimais corretas usando-se $h = 0.0025$. Após 60 passos chegamos no instante $t_1 = 0.15$. Como $e^{-75 \cdot 0.15} = 0.000013$ é muito menor do que $e^{-0.5 \cdot 0.15} = 0.9277$, a partir deste instante não seria necessário calcular precisamente a componente de decaimento rápido. O passo $h = 0.4$ calcula a componente que decai lentamente com quatro casas decimais. Faça então uma simulação usando $h = 0.0025$ para t em $[0, 0.15]$, e a partir deste instante usando $h = 0.4$ até chegar em $t = 24.15$. Explique o comportamento do erro em termos de estabilidade absoluta. Repita a simulação usando um valor para h adequado a partir de $t = 0.15$ e observe o comportamento do erro. Qual o custo adicional para se ter uma boa aproximação?

Para certos sistema de equações diferenciais, a solução tem componentes que decaem muito rápido, e outras que decaem lentamente. Eles recebem o nome de *stiff* na literatura, e a restrição imposta no tamanho do passo pela condição de estabilidade pode tornar o custo de métodos explícitos proibitivo.

2.3 Métodos Implícitos

Muitos métodos implícitos têm boas regiões de estabilidade absoluta, sendo mais adequados para a resolução numérica dos sistemas *stiff* mencionados acima. Discutiremos apenas dois métodos, mas muitos outros podem ser encontrados na literatura.

Um método simples pode ser obtido a partir da aproximação da derivada por um quociente de diferenças, gerando o *método de Euler implícito*

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_{n+1}, x_{n+1}),$$

que tem ordem de convergência 1. Quando aplicado ao problema modelo (6), obtemos a expressão

$$x_{n+1} = \frac{1}{1 - h\lambda} x_n$$

e portanto o fator multiplicativo é $F(\mu) = 1/(1 - \mu)$. A região de estabilidade absoluta para este método é então o exterior do disco unitário de raio 1 com centro em 1. Note que todo semiplano $Re(\mu) < 0$ está contido na região de estabilidade absoluta. Métodos com esta propriedade são chamados *absolutamente estáveis*, e para eles a restrição imposta a h deve-se unicamente à precisão desejada para a aproximação, não havendo restrição de estabilidade.

Exercício 7. Repita o Exercício 4 usando o método de Euler implícito.

O *método do trapézio* introduzido na aula anterior é um método implícito com ordem de convergência 2. A sua região de estabilidade absoluta é o semiplano $Re(\mu) < 0$ (**Exercício 8**), e portanto ele é também absolutamente estável. O preço que se paga pelo uso de métodos implícitos é o de termos que, a cada passo, resolver uma equação ou sistema de equações não lineares para calcularmos a nova aproximação. Mas isto é compensado por podermos usar um tamanho de passo maior.

Métodos implícitos com ordem de convergência maior podem ser derivados. Vários deles não são absolutamente estáveis, porém as regiões de estabilidade absoluta são subconjuntos ilimitados do semiplano $Re(\mu) < 0$ contendo a semireta negativa, e eles são muito eficientes para a resolução de sistemas de equações diferenciais *stiff*. Mais detalhes podem ser encontrados na literatura ([1], [2]).

Bibliografia

- [1] H. R. Schwarz, *Numerical Analysis - A Comprehensive Introduction*, John Wiley & Sons, 1989
- [2] J. Stoer and R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer, 1993