



Aplicação de métodos numéricos no estudo da decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio

Gabrielle Maioli e Suzete Maria Silva Afonso

RESUMO: Neste artigo exploraremos os métodos numéricos de passo único, denominados métodos de Euler e Runge - Kutta, e os métodos de passos múltiplos, denominados métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton, para encontrar soluções aproximadas de problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Aplicaremos os métodos numéricos abordados para estudar a decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio, cujo processo pode ser modelado por uma equação diferencial ordinária.

Palavras-chave: Métodos numéricos. Problema de valor inicial. EDO's.

Sumário

1	Introdução	2
2	Métodos numéricos de um passo	3
2.1	Polinômio de Taylor e a reta tangente	4
2.2	Método de Euler	6
2.3	Erros e arredondamento	12
2.3.1	Erro de truncamento global - E_n	13
2.3.2	Erro de truncamento local - e_n	13
2.3.3	Erro de arredondamento - A_n	13
2.3.4	Valor absoluto do erro total	13
2.4	Método de Euler melhorado	16
2.5	Método de Runge-Kutta	20
2.5.1	Runge-Kutta de primeiro grau	20
2.5.2	Runge-Kutta de segundo grau	21
2.5.3	Runge-Kutta de terceiro grau	22
2.5.4	Runge-Kutta de quarto grau	24
2.6	Analisando os métodos	27
3	Métodos de passos múltiplos	28
3.1	Métodos de Adams	28
3.1.1	Método de Adams - Bashforth	28
3.1.2	Método de Adams - Moulton	31
3.2	Método de previsão e correção	33
4	Convergência	33

5	Estudo da decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio	36
5.1	Utilizando os métodos numéricos	38
5.2	Método de Euler	38
5.3	Método de Euler melhorado	38
5.4	Método de Runge-Kutta de quarto grau	39
5.5	Método de previsão e correção	39
5.6	Conclusões	40
5.7	Considerações Finais	43

1. Introdução

A teoria das Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) é objeto de intensa atividade de pesquisa, pois além da utilidade de tais equações na modelagem de diversos fenômenos que ocorrem nas mais diversas áreas do conhecimento como, por exemplo, dinâmica populacional, engenharia, física, química, economia e medicina, o estudo das Equações Diferenciais Ordinárias é motivado pelo interesse intrinsecamente matemático que essas equações possuem. As equações diferenciais ordinárias são poderosas representações teóricas de processos de evolução em que a taxa de variação do estado do processo em cada instante t depende do processo nesse instante.

Há métodos que resolvem analiticamente uma Equação Diferencial Ordinária, todavia nem sempre é possível obter uma solução analítica. Neste caso, os métodos numéricos são uma ferramenta eficaz para se encontrar uma solução aproximada.

Os métodos numéricos que solucionam equações diferenciais têm sido explorados por matemáticos desde o século XVII. Podemos citar alguns nomes famosos que tiveram suas participações na teoria dos métodos numéricos por conta de seus avanços no cálculo, como Isaac Newton (1643-1729) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1643-1716). Porém, foi Leonhard Euler (1707-1783) que conduziu os estudos dos métodos que utilizamos até os dias atuais.

Euler deduziu um método iterativo que aproximava a solução da equação diferencial desde que fosse dada uma condição inicial. A prova rigorosa para esse método iterativo só foi apresentada anos mais tarde por Augustin-Louis Cauchy (1789-1857) e reescrita de forma aprimorada por Rudolf Lipschitz (1832-1908).

Naquela época não existia uma real necessidade do uso dos métodos numéricos, e o método desenvolvido por Euler só foi se tornar usual quando da física, no final do século XIX - início do século XX, desenvolveram-se alguns estudos como, por exemplo, a teoria de calor por Fourier, a mecânica celeste por Adams, entre outros.

Em meados de 1900, vieram os sucessores Carl Runge (1856-1927) e Martin Wilhelm Kutta (1867-1944) que apresentaram generalizações eficientes do mé-

todo numérico de Euler. Assim, os métodos de Euler e Runge-Kutta fecham o bloco dos procedimentos de *passo único*, isto é, métodos em que apenas uma condição inicial é necessária para poder dar início às iterações e encontrar uma solução numérica aproximada de um problema de valor inicial para uma equação diferencial ordinária.

O bloco formado por aqueles processos numéricos conhecidos como *métodos de passos múltiplos* começou a ser formado com os estudos de John Couch Adams (1819-1892) que, utilizando a proposta de Euler e a equação de Bashforth, apresentou uma técnica nova, mais conhecida como Adams-Bashforth. A primeira contribuição para uma melhoria do método de Adams-Bashforth veio em 1925, pelo matemático Forest Ray Moulton (1872-1952), originando assim o conhecido método de Adams-Moulton.

Somente depois da Segunda Guerra Mundial, com o aparecimento do primeiro computador, que os métodos numéricos começaram a ter um uso constante de forma sistemática. E assim foi possível calcular precisão, erros e instabilidade numérica de cada procedimento.

Neste trabalho exploraremos os métodos numéricos de Euler e de Runge-Kutta, com suas respectivas variações, que se enquadram no grupo dos métodos de passo único para investigar soluções de problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Outros métodos numéricos, mais conhecidos como métodos de passos múltiplos de Adams, terão suas teorias contempladas também neste artigo. Os métodos numéricos serão abordados nas Seções 2 e 3. Na Seção 4, analisaremos, de forma sucinta, a convergência dos métodos numéricos estudados nas seções anteriores. Na Seção 5, aplicaremos as técnicas e os métodos numéricos em um modelo matemático criado por Harold Warner Streeter e Earle Bernard Phelps (1876-1953) em 1925 a partir da análise do processo de oxidação e aeração no Rio Ohio que fica nos Estados Unidos, com base em dados obtidos entre 1914 e 1915. Earle Bernard Phelps foi o precursor de estudos sobre qualidade da água.

Informamos que os cálculos e os gráficos foram feitos com o auxílio do software *MATLAB*[®]. A programação utilizada para cada gráfico encontra-se na nossa referência básica [4].

2. Métodos numéricos de um passo

Consideremos o problema de valor inicial de primeira ordem

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x(t)) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad (1)$$

em que $f : \Omega \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função dada, Ω é aberto e $(t_0, x_0) \in \Omega$.

É sabido que se f e D_2f forem contínuas então o problema de valor inicial (1) tem uma única solução $x = \psi(t)$ em algum intervalo contendo o ponto

inicial t_0 (veja [9], Corolário 3, página 15). Atentamos aqui para o fato de que não é possível, em geral, encontrar a solução ψ por meio analíticos. Uma maneira de superar essa dificuldade é calcular valores aproximados da solução $x = \psi(t)$ do problema de valor inicial (1) para valores selecionados de t . Os valores aproximados da solução serão acompanhados de cotas para os erros que garantem um nível de precisão para as aproximações.

Existem vários métodos que fornecem aproximações numéricas de soluções de equações diferenciais. Esta seção será dedicada a uma discussão sobre alguns deles, que são de um passo só. O primeiro método a ser abordado será o mais velho e o mais simples de todos, o chamado método da reta tangente ou método de Euler, desenvolvido por Euler por volta de 1768. Depois, apresentaremos o método de Euler melhorado e, por fim, discutiremos o método desenvolvido, originalmente, por Runge e Kutta.

Iniciaremos a seção com uma subseção de caráter preliminar na qual dissertaremos sobre o Polinômio de Taylor, que está inteiramente relacionado aos métodos numéricos que aparecerão no trabalho.

2.1. POLINÔMIO DE TAYLOR E A RETA TANGENTE. Sejam $I \subseteq \mathbb{R}$ um intervalo e $t_0 \in I$. A reta que melhor aproxima o gráfico de uma função $x : I \rightarrow \mathbb{R}$ derivável em uma vizinhança de um ponto t_0 é a *reta tangente* ao gráfico de x no ponto t_0 :

$$l(t) = x(t_0) + x'(t_0)(t - t_0). \quad (2)$$

Esta é a única reta que satisfaz $l(t_0) = x(t_0)$ e $l'(t_0) = x'(t_0)$ ou, equivalentemente, é a única reta que satisfaz a condição:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \frac{R(t)}{t - t_0} = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{x(t) - l(t)}{t - t_0} = 0,$$

onde $R(t)$ é o resto da aproximação de x por l . A equação da reta acima define o *Polinômio de Taylor de grau 1 no ponto t_0* :

$$p_1(t) = x(t_0) + x'(t_0)(t - t_0). \quad (3)$$

Se $x : I \rightarrow \mathbb{R}$ for n -vezes derivável no ponto t_0 , o polinômio de grau menor do que ou igual a n ,

$$p_n(h) = x(t_0) + x'(t_0)h + \frac{h^2}{2!}x''(t_0) + \cdots + \frac{h^n}{n!}x^{(n)}(t_0),$$

será denominado o *Polinômio de Taylor de grau n no ponto t_0* , onde $x^{(n)}(t_0)$ é a derivada de ordem n de x no ponto t_0 . Convencionamos que $x^{(0)}$ é igual a x .

O Polinômio de Taylor de grau n de x no ponto t_0 é o único polinômio p de grau menor do que ou igual a n cujas derivadas $p(0), p'(0), \dots, p^{(n)}(0)$ no

ponto 0 coincidem com as derivadas correspondentes de x no ponto t_0 , pois, nesse caso, o coeficiente de ordem j de p é $\frac{p^j(0)}{j!} = \frac{x^j(t_0)}{j!}$, $j = 0, 1, \dots, n$.

O próximo resultado, cuja prova pode ser encontrada na referência [3], página 282, atesta que o Polinômio de Taylor de grau n para x no ponto t_0 aproxima x , numa vizinhança do ponto t_0 , a menos de um infinitésimo de ordem superior a n .

Teorema 2.1 (Fórmula de Taylor Infinitesimal). *Se $x : I \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função n -vezes derivável no ponto $t_0 \in I$, então, para todo h tal que $t_0 + h \in I$, tem-se:*

$$x(t_0 + h) = x(t_0) + x'(t_0)h + \frac{h^2}{2!}x''(t_0) + \dots + \frac{h^n}{n!}x^{(n)}(t_0) + R_n(h),$$

com $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{R_n(h)}{h^n} = 0$.

Ademais, $p(h) = \sum_{j=0}^n \frac{x^j(t_0)}{j!}h^j$ é o único polinômio de grau menor do que ou igual a n tal que

$$x(t_0 + h) = p(h) + R_n(h),$$

com $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{R_n(h)}{h^n} = 0$.

Vejam agora outra fórmula de Taylor, que fornece uma estimativa da diferença $x(t_0 + h) - x(t_0)$ para um valor fixo de h , isto é, sem supor $h \rightarrow 0$. Esta fórmula proporciona uma generalização do Teorema do Valor Médio para funções n -vezes derivável.

Teorema 2.2 (Fórmula de Taylor com Resto de Lagrange). *Se $x : [t_0, b] \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de classe C^{n-1} , n -vezes derivável no aberto (t_0, b) , então existe $\xi \in (t_0, b)$ tal que*

$$x(b) = x(t_0) + x'(t_0)(b - t_0) + \dots + \frac{(b - t_0)^{n-1}}{n - 1!}x^{(n-1)}(t_0) + \frac{(b - t_0)^n}{n!}x^{(n)}(\xi). \tag{4}$$

Pondo $b = t_0 + h$, isto equivale a dizer que existe $\theta \in (0, 1)$ tal que

$$x(t_0 + h) = x(t_0) + x'(t_0)h + \dots + \frac{h^{n-1}}{n - 1!}x^{(n-1)}(t_0) + \frac{h^n}{n!}x^{(n)}(t_0 + \theta h).$$

A prova do resultado acima também pode ser encontrada em [3], página 283.

A parcela $R_n(b) = \frac{x^{(n)}(\xi)}{n!}(b - t_0)^n$ em (4) é denominada *Resto de Lagrange*. Em (2) temos que $R(t) = R_1(t)$.

2.2. MÉTODO DE EULER. Consideremos o problema de valor inicial (1) e suponhamos que f seja de classe C^1 (dessa forma f é contínua e D_2f é contínua). Seja $x = \psi(t)$ a solução exata deste problema num intervalo $[t_0, b]$. Tal solução existe e é única, conforme fora supramencionado. Além disso, a solução $x = \psi(t)$ é de classe C^2 , já que f é de classe C^1 . Queremos encontrar uma aproximação para a solução $x = \psi(t)$ no intervalo $[t_0, b]$. Como $x : [t_0, b] \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de classe C^2 , consideremos a aproximação de x pelo polinômio de Taylor de grau 1:

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + R_2(t), \quad (5)$$

para $t \in [t_0, b)$, onde $h > 0$ é tal que $t+h \leq b$ e é denominado *tamanho do passo*.

Como $x'(t) = f(t, x(t))$, a relação (5) é equivalente a:

$$x(t+h) = x(t) + hf(t, x(t)) + R_2(t). \quad (6)$$

Seja $t = t_n$, com $t_n = t_0 + nh$ e $n \in \mathbb{N}$ variando de 0 até N . N é o número de passos necessários para chegar até o fim do intervalo ao qual se quer aproximar a solução; N tem que ser um número natural. Como $t_0 \leq t \leq b$, tomemos N o maior natural menor do que D , onde D é dado por:

$$D = \frac{b - t_0}{h}.$$

Reescrevendo (6) com $t = t_n$ e $n \in \{0, \dots, N\} \subset \mathbb{N}$, temos:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hf(t_n, x(t_n)) + R_2(t_n).$$

Temos, assim, um processo de iteração a partir do dado inicial do problema, $x(t_0) = x_0$. Para cada $n \in \{0, \dots, N\}$, $x(t_n)$ aproxima o valor da solução $\psi(t)$ no ponto t_n . Esse processo é denominado *método de Euler* ou *método da reta tangente*, o segundo nome vem da interpretação geométrica do método. Observe a Figura 1.

Em vermelho, ilustramos os pontos da solução exata $\psi(t)$ de (1). Dando início ao método pela condição inicial $(t_0, \psi(t_0)) = (t_0, x_0)$, é traçada a reta tangente ao gráfico de ψ por este ponto com inclinação dada pela derivada informada no problema de valor inicial, $x'(t_0) = f(t_0, x_0)$. Na Figura 1, a reta tangente está em azul. Essa primeira reta tangente nos fornecerá o valor $x(t_1)$, onde $t_1 = t_0 + h$. Em seguida é traçada a reta tangente pelo ponto (t_1, x_1) com inclinação $x'(t_1) = f(t_1, x_1)$, que também está representada em azul, e essa nova reta nos fornecerá o valor de $x(t_2)$, onde $t_2 = t_0 + 2h$. E assim o método segue sucessivamente. Essa interpretação geométrica serve para enfatizar que o erro vai se acumulando durante o processo. Para o método de Euler ser

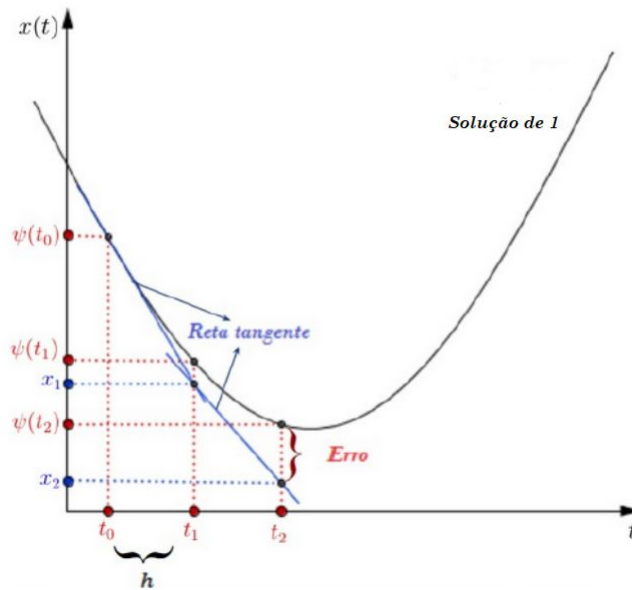


Figura 1: Interpretação geométrica do método de Euler.

aplicado é preciso tomar um passo h e saber o tempo final t para dar início às iterações utilizando a fórmula abaixo:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \tag{7}$$

sendo $x_n = x(t_n)$ e $t_n = t_0 + nh$.

Com uma pequena dose de programação, é possível desenvolver um algoritmo que nos auxilie a visualizar o processo feito nas iterações. Um exemplo de algoritmo segue abaixo:

1. Entre com a condição inicial $x(t_0) = x_0$;
2. Coloque o número de iterações desejadas n ;
3. Entre com o tempo final t_f ;
4. Faça $h = (t_f - t_0)/n$;
5. Para $i = 1 : n$ faça:
 - $f(i) = x(i)$;
 - $t(i + 1) = t(i) + h$;
 - $x(i + 1) = x(i) + h * f(i)$;
 fim
6. Imprima os pontos $(t(i), x(i))$.

Vamos, agora, aplicar o método de Euler a problemas de valor inicial cujas soluções analíticas são conhecidas. Veremos como o tamanho do passo h interfere no erro de aproximação da solução exata pela numérica.

Exemplo 2.3. *O problema de valor inicial*

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

em que k é uma constante positiva, tem como solução exata a função $\psi(t) = 2e^{kt}$. Consideremos $k = 1$ e calculemos os valores aproximados $x(t)$ de $\psi(t)$ para $t \in [0, 0.9]$, utilizando o método de Euler (fórmula (7)). Para aplicarmos o método, tomemos $h = 0.3$. Pelo que foi visto anteriormente, o número de passos necessários para chegar até $t = 0.9$ é 3. Para $n = 0$, temos

$$\begin{aligned} t_0 &= 0 \\ x_0 &= 2. \end{aligned}$$

Para $n = 1$, temos

$$\begin{aligned} t_1 &= t_0 + h = 0.3 \\ x_1 &= x_0 + hf(t_0, x_0) = 2 + 0.3 * 2 = 2.6. \end{aligned}$$

Para $n = 2$, temos

$$\begin{aligned} t_2 &= t_0 + 2h = 0.6 \\ x_2 &= x_1 + hf(t_1, x_1) = 2.6 + 0.3 * 2.6 = 3.38. \end{aligned}$$

A tabela a seguir contém as iterações e o valor do erro de aproximação em cada iteração.

n	t_n	$x_n = x_{n-1} + hx'_{n-1}$	$\psi(t_n) = 2e^{t_n}$	Erro = $\psi_n - x_n$
0	0	2	2	0
1	0.3	2.6	2.6997	0.0997
2	0.6	3.38	3.6442	0.2642
3	0.9	4.394	4.9192	0.5252

Tabela 1: Método de Euler - Exemplo 2.3 com $h = 0.3$.

Observando o gráfico ilustrado na Figura 2 vemos que os pontos calculados no Exemplo 2.3 ficaram distantes da solução exata. Assim, o processo nos forneceu uma aproximação com um erro excessivo. Isso ocorreu por conta da escolha do passo h , que foi relativamente grande. Aplicando o método com $h = 0.1$, temos:

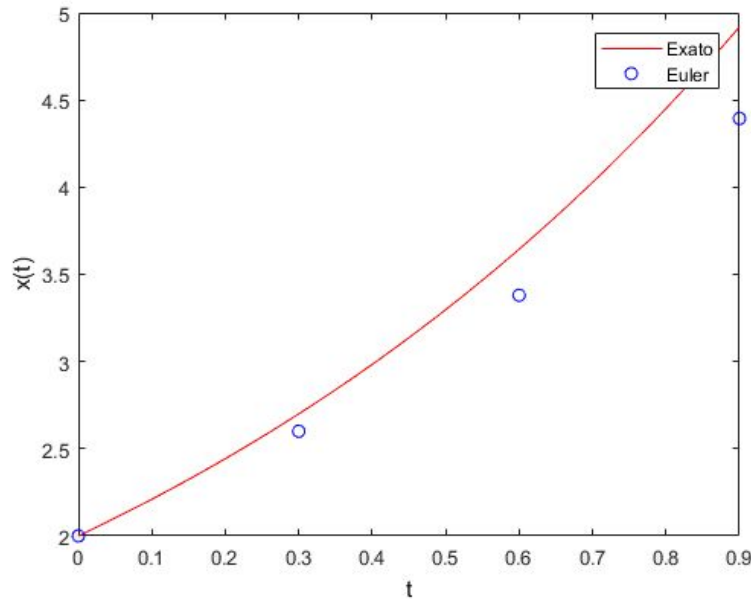


Figura 2: Gráfico dos pontos da Tabela 1 com $h = 0.3$.

n	t_n	$x_n = x_{n-1} + hx'_{n-1}$	$\varphi(t_n) = 2e^{t_n}$	Erro = $\varphi_n - x_n$
0	0	2	2	0
1	0.1	2.2	2.2103	0.0103
2	0.2	2.42	2.4428	0.0228
3	0.3	2.662	2.6997	0.0377
4	0.4	2.9282	2.9836	0.0554
5	0.5	3.2210	3.2974	0.0764
6	0.6	3.5431	3.6442	0.1011
7	0.7	3.8974	4.0275	0.1300
8	0.8	4.2871	4.4510	0.1639
9	0.9	4.7158	4.9192	0.2033

Tabela 2: Método de Euler com $h = 0.1$.

Observando essa nova tabela e a Figura 3, vemos que quanto menor h , mais a solução numérica se aproxima da solução exata, já que o erro diminui consideravelmente. O gráfico com este novo h ficou muito mais parecido com uma exponencial do que na Figura 2. Note que, tomando um h três vezes menor do que o anterior, o erro de uma tabela para outra no mesmo t diminuiu proporcionalmente a h . Porém, o esforço computacional aumentou, pois precisamos de mais passos para chegar a $t = 0.9$.

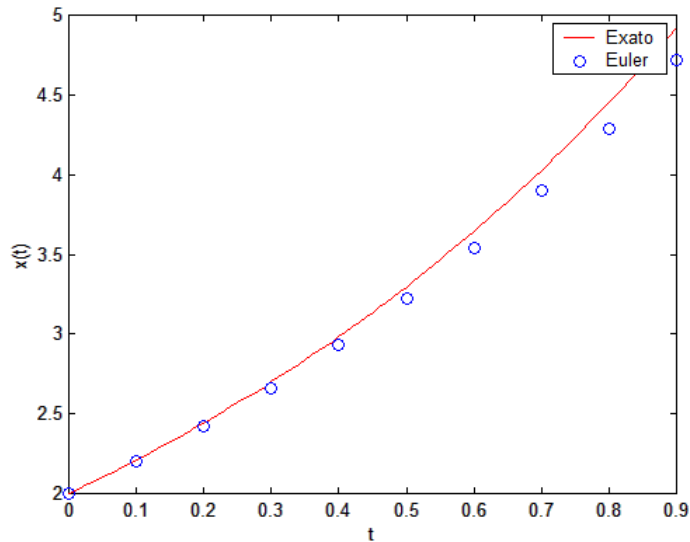


Figura 3: Gráfico dos pontos da Tabela 2 com $h = 0.1$.

Exemplo 2.4. Vamos resolver o problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3 \end{cases} \quad (8)$$

utilizando o Método de Euler com $h = 0.1$ e, posteriormente, com $h = 0.05$ para compararmos os resultados. Consideraremos o tempo final $t = 1$.

A solução exata do problema (8) é a função $\psi(t) = e^{-t} + 2e^{-2t}$. Para encontrarmos a solução numérica, começaremos as iterações utilizando a fórmula (7). Para $n = 0$, temos

$$\begin{aligned} t_0 &= 0 \\ x_0 &= 3. \end{aligned}$$

Para $n = 1$, temos

$$\begin{aligned} t_1 &= t_0 + h = 0.1 \\ x_1 &= x_0 + hf(t_0, x_0) = 3 + 0.1(e^{-0} - 2 * 3) = 2.5. \end{aligned}$$

Para $n = 2$, temos

$$\begin{aligned} t_2 &= t_0 + 2h = 0.2 \\ x_2 &= x_1 + hf(t_1, x_1) = 2.5 + 0,1(e^{-0.1} - 2 * 2.5) = 2.0904. \end{aligned}$$

Desse modo, continuamos o processo até $t_{10} = 1$. Veja a Tabela 3 com os valores resultantes das iterações do método de Euler utilizando $h = 0.1$. Na última coluna, temos o erro absoluto que é dado pelo módulo da diferença entre a solução exata $\psi(t)$ e a aproximação x_n .

n	t_n	x_n	EXATA	Erro Absoluto
0	0	3	3	0
1	0.1	2.5	2.5422	0.0422
2	0.2	2.0904	2.1593	0.0688
3	0.3	1.7542	1.8384	0.0841
4	0.4	1.4774	1.5689	0.0914
5	0.5	1.2490	1.3422	0.0932
6	0.6	1.0598	1.1512	0.0913
7	0.7	0.9027	0.9897	0.087
8	0.8	0.7719	0.8531	0.0812
9	0.9	0.6624	0.7371	0.0747
10	1	0.5706	0.6385	0.0679

Tabela 3: Método de Euler com $h = 0.1$.

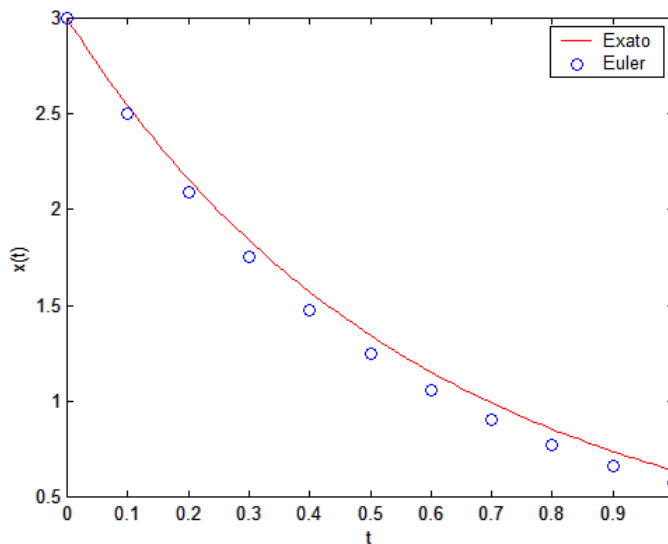


Figura 4: Gráfico dos pontos da Tabela 3 com $h = 0.1$.

Na Figura 4, podemos notar o quão próximo da solução exata estão os pontos da solução aproximada pelo método de Euler. Iterando agora com $h = 0.05$, pela forma que o método foi deduzido, o erro sofrerá uma redução. Neste caso teremos ao todo 20 iterações. Na Tabela 4 a seguir, pularemos as iterações ímpares para diminuir o tamanho da tabela e colocar em destaque os resultados que nos interessam para comparação.

Podemos, então, visualizar como o tamanho do passo h tem influência sobre o erro. Ao diminuirmos h vemos que o erro também diminui. Veja as últimas colunas das Tabelas 3 e 4. Entretanto, alertamos que ao diminuirmos o tamanho do passo h , o

n	t_n	x_n	EXATA	Erro Absoluto
0	0	3	3	0
2	0.1	2.5225	2.5423	0.0197
4	0.2	2.1270	2.1593	0.0323
6	0.3	1.7986	1.8384	0.0397
8	0.4	1.5255	1.5689	0.0435
10	0.5	1.2977	1.3423	0.0446
12	0.6	1.1072	1.1512	0.0439
14	0.7	0.9477	0.9898	0.0421
16	0.8	0.8136	0.8531	0.0395
18	0.9	0.7006	0.7371	0.0365
20	1	0.6051	0.6385	0.0334

Tabela 4: Método de Euler - Exemplo 2.4 com $h = 0.05$.

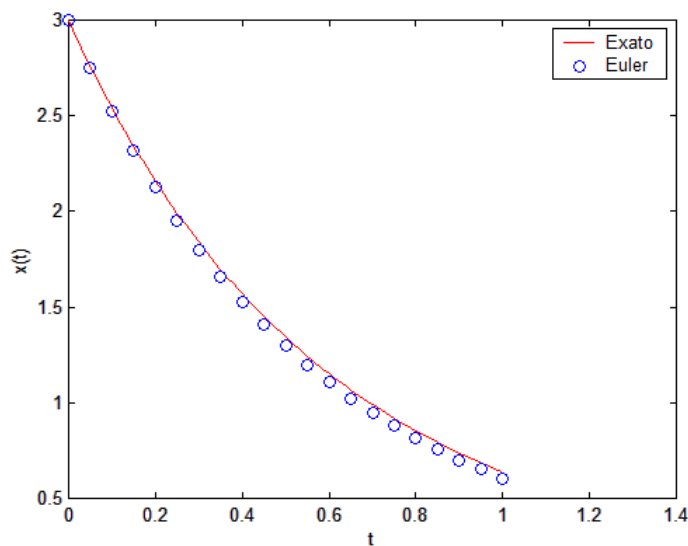


Figura 5: Gráfico dos pontos da Tabela 4 com $h = 0.05$.

número de cálculos pode aumentar substancialmente. Para este exemplo específico a quantidade de passos foi dobrada.

2.3. ERROS E ARREDONDAMENTO. Em uma situação real não teremos a solução exata para termos a noção de que a solução numérica estará próxima da solução do problema. Quão pequeno deve ser o tamanho do passo h para garantir uma precisão necessária e ao mesmo tempo não gerar uma quantidade excessiva de cálculos e deixar o método com um esforço computacional excedente? Exploraremos, nesta subseção, um pouco dos erros obtidos no método de Euler. Este estudo nos dará uma ideia geral sobre o melhor tamanho de h a se escolher para obter uma melhor precisão.

2.3.1. *Erro de truncamento global - E_n .* Suponhamos que nosso computador seja tal que possamos efetuar todos os cálculos com precisão absoluta, isto é, mantendo um número infinito de casas decimais. A diferença E_n entre a solução exata $\psi(t_n)$ do problema de valor inicial (1) e seu valor numérico x_n , com todas as casas decimais, é chamada de *erro de truncamento global*. Temos, pois,

$$E_n = \psi(t_n) - x_n.$$

Para calcular este erro é necessário conhecer a solução exata e ainda não ter casas decimais arredondadas. Este erro tem duas causas: primeiro, em cada passo usamos uma fórmula aproximada para determinar x_{n+1} ; segundo, os dados de entrada em cada etapa estão aproximadamente corretos, já que, em geral, $\psi(t_n)$ não é igual a x_n .

2.3.2. *Erro de truncamento local - e_n .* A única diferença do *erro de truncamento local* para o anterior é que tanto $\psi(t_n)$ quanto x_n são usados com valores arredondados com um número finito de casas decimais, chamemos então de $\tilde{\psi}(t_n)$ e \tilde{x}_n os valores com casas decimais arredondadas. Este erro é o mais viável e utilizado em nossas contas quando sabemos a solução exata, assim:

$$e_n = \tilde{\psi}(t_n) - \tilde{x}_n.$$

2.3.3. *Erro de arredondamento - A_n .* Como em todas as iterações temos um número finito de casas decimais, em certo momento começará a acontecer arredondamentos feitos pelos computadores. Então, se x_n for o valor numérico de fato, com todas as casas decimais, e X_n for o valor com arredondamento, o *erro de arredondamento* A_n será dado por:

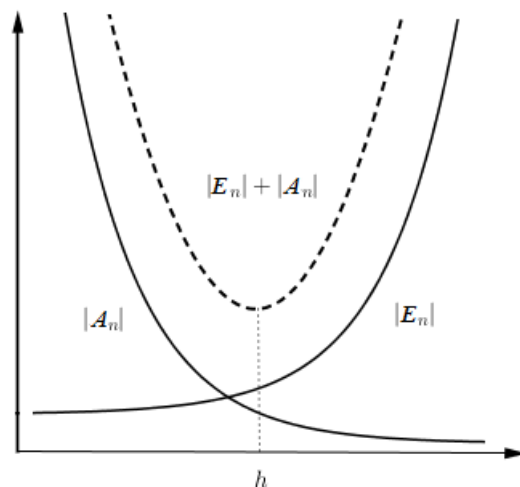
$$A_n = x_n - X_n,$$

o qual só será possível calcular possuindo um super computador sem limite de casas decimais.

2.3.4. *Valor absoluto do erro total.* Considerando os erros introduzidos anteriormente, o *valor absoluto do erro total* em um ponto t_n em questão será dado por:

$$|\psi(t_n) - x_n| = |\psi(t_n) - X_n + X_n - x_n| \leq |\psi(t_n) - X_n| + |X_n - x_n| = |E_n| + |A_n|.$$

Logo, o erro total é limitado pela soma dos valores absolutos dos erros de truncamento e de arredondamento. Pelo método de Euler já deu para perceber que quanto maior o tamanho do passo h maior será o erro de truncamento. Porém, se maior for o h , então teremos bem menos passos e, assim, menor será o erro de arredondamento. Com o mesmo raciocínio, quanto menor o h , menor será E_n , mas com um maior número de iterações, maior será A_n . O gráfico a seguir ilustra essa conclusão.



Como se pode observar, existirá um valor h ideal, que não poderá ser muito pequeno, nem muito grande por conta dos erros de truncamento e arredondamento que são limitados pelo erro absoluto total. O h ideal é a abscissa do vértice da parábola com concavidade para cima que representa o gráfico do erro absoluto.

Utilizando o problema de valor inicial do Exemplo 2.4 e variando o h , construímos a Tabela 5 a fim de encontrar o melhor h para este problema.

h	n	$x_{n/2}$	Erro $e_{n/2}$	x_n	Erro e_n
0.05	20	1.2976	0.0044	0.6051	0.0334
0.025	40	1.3204	0.0218	0.6219	0.0165
0.001	1000	1.3414	0.0008	0.6378	0.0006
0.0005	2000	1.3449	0.0004	0.6382	0.0003
0.00025	4000	1.342	0.0002	0.6383	0.0001
0.0001	10 000	1.3422	1.3422	0.6384	0.6382

Tabela 5: Investigando o melhor h para o Exemplo 2.4.

A coluna do n nos diz quantos passos serão necessários para chegar até $t = 1$. Na terceira coluna se encontra o valor de x_n , na ‘metade do caminho’, isto é, em $t = 0.5$. Como podemos perceber, o melhor h a ser tomado para este problema de valor inicial está entre 0.00025 e 0.0001. Note que, quando tomamos o passo $h = 0.0001$, o erro tornou a aumentar.

É claro que o intervalo onde se encontra o melhor h varia de problema para problema. E varia também dependendo do método a ser escolhido. Veremos outros métodos numéricos e em todos eles os erros estarão presentes.

Como já dissemos, em uma situação problemática real, não teremos a solução exata nem para calcularmos o erro de truncamento local. Por isso, faz-se

necessário estimar o erro em cada método numérico utilizado. Para o método de Euler, tomemos a aproximação pelo polinômio de Taylor com resto de Lagrange (Teorema 2.2) da solução exata do problema de valor inicial (1), que é dada por $\psi(t)$, ou seja:

$$\psi(t_{n+1}) = \psi(t_n) + h\psi'(t_n) + h^2 \frac{1}{2!} \psi''(t'_n), \quad (9)$$

com $t_n < t'_n < t_{n+1}$. Subtraindo dessa equação acima $x_{n+1} = x_n + hx'_n$, temos:

$$\psi(t_{n+1}) - x_{n+1} = [\psi(t_n) - x_n] + h[\psi'(t_n) - x'_n] + h^2 \frac{1}{2!} \psi''(t'_n).$$

Se fizermos $\psi(t_n) = x_n$, encontraremos o erro de truncamento local

$$e_{n+1} = \psi(t_{n+1}) - x_{n+1} = h^2 \frac{1}{2!} \psi''(t'_n), \quad (10)$$

que é proporcional ao quadrado do passo h e depende da segunda derivada da solução exata. Se estivermos calculando o valor da solução em um intervalo limitado, ou seja, para $t \in [t_0, b]$, então teremos $|\psi''(t)| \leq C$, já que ψ é de classe C^2 , e assim:

$$e_{n+1} \leq C \frac{h^2}{2}. \quad (11)$$

Então, conseguimos estimar um intervalo de tolerância para o h , quando se é dado um valor máximo para o erro e_{n+1} . Como a estimativa (11) é baseada no maior valor possível de $|\psi''(t)|$, esta nos auxiliará na escolha do tamanho h para que o erro de truncamento local não ultrapasse um valor de tolerância dado. Por exemplo, supondo que este valor de tolerância seja ε , teremos:

$$e_{n+1} \leq C \frac{h^2}{2} \leq \varepsilon \Rightarrow h \leq \sqrt{\frac{2\varepsilon}{C}}. \quad (12)$$

A maior dificuldade reside no fato de que, na maioria dos casos, não conhecemos a solução exata, pois o valor C provém da estimativa de $\psi''(t)$.

Exemplo 2.5. Consideremos o problema de valor inicial abaixo que tem como solução exata a função $\psi(t) = 2e^t$:

$$\begin{cases} x'(t) = x \\ x(0) = 2. \end{cases} \quad (13)$$

Pela igualdade (10), temos

$$e_{n+1} = \frac{2e^{t_n^*} h^2}{2}, \text{ com } t_n < t_n^* < t_n + h.$$

Assim, para o passo $h = 0.1$, o primeiro erro é:

$$e_1 = \frac{2e^{t_0^*} 0.1^2}{2} = 0.01e^{t_0^*}, \quad 0 < t_0^* < 0.1.$$

Como e_1 é positivo e $e^{t_0^*} < e^{0.1}$, segue que

$$e_1 \leq 0.01e^{t_0^*} \leq 0.01e^{0.1} = 0.011051709.$$

Como $t_0^* > 0$, é claro que $e^{t_0^*} > e^0 = 1$, de onde segue que $e_1 > 0.01$. Assim, o erro neste primeiro passo está estimado em $0.01 < e_1 < 0.011051709$.

Se quiséssemos ter um erro local em $0 < t < 0.1$ menor que $\varepsilon = 0.001$ utilizando (12), deveríamos ter:

$$e_1 \leq \frac{2e^t h^2}{2} \leq 0.001,$$

ou seja,

$$h \leq \sqrt{\frac{0.001}{e^{t_0^*}}} \leq 0.000904837.$$

Portanto, se desejamos ter um erro de truncamento local menor que 0.001, precisamos considerar $h < 0.0009$.

2.4. MÉTODO DE EULER MELHORADO. É possível notar que o erro no método de Euler é grande. Com o objetivo de diminuir este erro de aproximação, podemos utilizar o *método de Euler melhorado* ou *método do Trapézio*.

Em vez de avançarmos ao longo da reta tangente no ponto (t_0, x_0) com inclinação dada por $f(t_0, x_0)$ até o ponto (t_1, x_1) e assim por diante, o método de Euler melhorado consiste em avançarmos ao longo da reta que passa por (t_0, x_0) com inclinação dada pela média entre $f(t_0, x_0)$ e $f(t_1, x_1)$, para calcularmos x_1 . Teremos assim:

$$x_1 = x_0 + h \frac{f(t_0, x_0) + f(t_1, x_1)}{2}.$$

O valor de $f(t_1, x_1)$ é calculado pelo método de Euler. Observando a Figura 6 vemos a interpretação geométrica do que acabamos de explicar. Mantemos em azul os passos do método de Euler e, em preto, ilustramos os passos do método de Euler melhorado. As inclinações das *retas medianas* são dadas por:

$$\frac{f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x'_{n+1})}{2},$$

onde o ponto x'_n é calculado usando o método de Euler.

De uma forma mais concisa, o método de Euler melhorado consiste nas fórmulas:

$$x'_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n), \quad (14)$$

$$x_{n+1} = x_n + h \left[\frac{f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x'_{n+1})}{2} \right]. \quad (15)$$

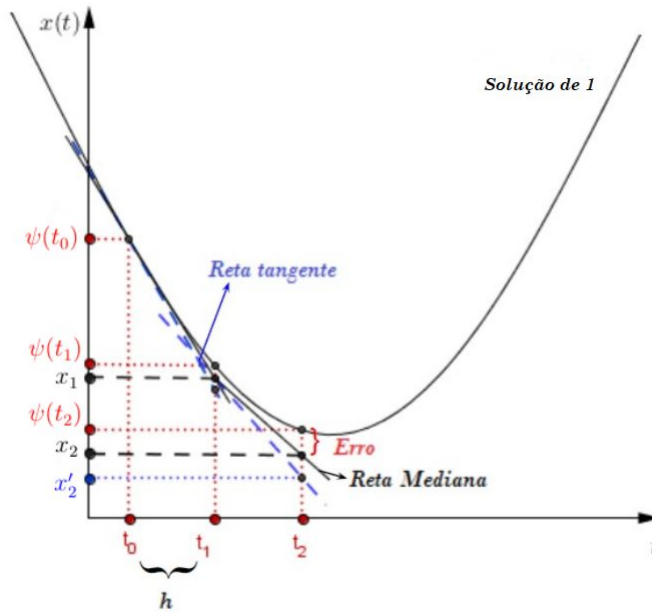


Figura 6: Interpretação geométrica do método de Euler melhorado.

Na Subseção 2.2, no Exemplo 2.4, encontramos a solução aproximada do problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3 \end{cases}$$

aplicando o método de Euler. Agora, resolveremos o mesmo problema utilizando o método de Euler melhorado, para compararmos os métodos. Tomaremos $h = 0.1$. Sabemos que $x_0 = 3$. Utilizaremos (14) para as primeiras iterações. Para $n = 0$, temos:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_0 + h \cdot f(t_0, x_0) \\ x'_1 &= 3 + 0.1 \cdot (e^{-0} - 2 \cdot 3) \\ x'_1 &= 2.5. \end{aligned}$$

Colocando este valor encontrado de x'_1 na fórmula (15), temos:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + h \frac{f(t_0, x_0) + f(t_1, x'_1)}{2} \\ x_1 &= 3 + 0.1 \cdot \frac{(e^{-0} - 2 \cdot 3) + (e^{-0.1} - 2 \cdot 2.5)}{2} \\ x_1 &= 2.5452. \end{aligned}$$

Para $n = 1$, utilizando (14), calculamos $x'_2 = 2.5814$. Agora, colocando este valor em (15), obtemos $x_2 = 2.1678$. Prosseguindo desta forma, construímos a Tabela 6:

n	t_n	x_n	EXATA	Erro Euler Melhorado	Erro Euler
0	0	3	3	0	0
1	0.1	2.5	2.5423	0.0029	0.0423
2	0.2	2.0905	2.1594	0.0085	0.0689
3	0.3	1.7543	1.8384	0.0152	0.0842
4	0.4	1.4775	1.5690	0.0221	0.0915
5	0.5	1.2490	1.3423	0.0286	0.0933
6	0.6	1.0599	1.1512	0.0344	0.0913
7	0.7	0.9028	0.9898	0.0392	0.0870
8	0.8	0.7719	0.8531	0.0431	0.0812
9	0.9	0.6624	0.7372	0.0460	0.0747
10	1	0.5706	0.6386	0.0479	0.0679

Tabela 6: Método de Euler melhorado - Exemplo 2.4, com $h = 0.1$.

A última coluna da Tabela 3 foi colocada na última coluna da Tabela 6 para podermos comparar os erros em cada um dos métodos. É notável como o erro nos primeiros passos diminui de um método para o outro. Porém, na décima iteração, já temos um acúmulo de erros até no Euler melhorado. Na Figura 7, fica visível o quão mais próxima da solução exata a solução aproximada por este método fica.

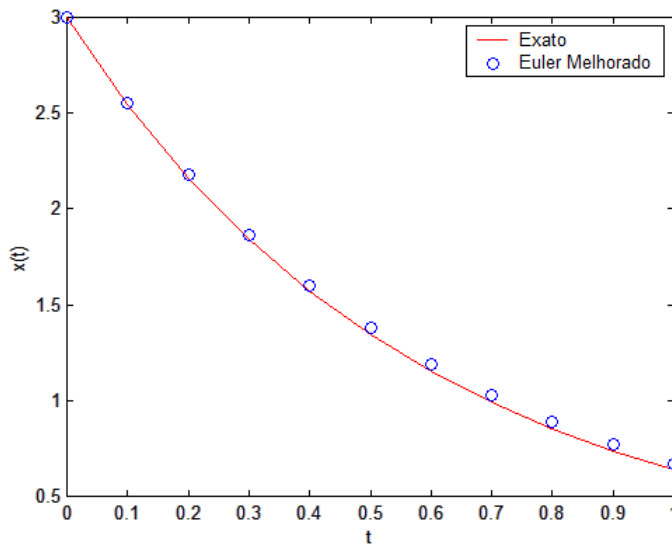


Figura 7: Gráfico dos pontos da Tabela 6 com $h = 0.1$.

Reduzindo o passo h à metade, isto é, considerando $h = 0.05$, dobramos as iterações, porém adquirimos um resultado com um erro menor. Observe a Tabela 7, com os valores das iterações, com a última coluna extraída da Tabela

4 para facilitar a comparação entre os métodos.

n	t_n	x_n	EXATA	Erro Euler Melhorado	Erro Euler
0	0	3	3	0	0
2	0.1	2.5226	2.5423	0.0012	0.0197
4	0.2	2.1270	2.1594	0.0037	0.0323
6	0.3	1.7987	1.8384	0.0069	0.0398
8	0.4	1.5255	1.5690	0.0102	0.0435
10	0.5	1.2977	1.3423	0.0134	0.0446
12	0.6	1.1073	1.1512	0.0163	0.0439
14	0.7	0.9477	0.9898	0.0187	0.0421
16	0.8	0.8136	0.8531	0.0207	0.0395
18	0.9	0.7006	0.7372	0.0223	0.0366
20	1	0.6051	0.6386	0.0234	0.0334

Tabela 7: Método de Euler melhorado - Exemplo 2.4, com $h = 0.05$.

Toda vez que diminuirmos o tamanho do passo h , estaremos mais próximos da solução exata? Na prática é o que gostaríamos de ter, porém nem sempre será verdade, já que temos também o erro de arredondamento a considerar toda vez que diminuimos o passo h .

2.5. MÉTODO DE RUNGE-KUTTA. Nesta subseção trataremos do método mais famoso: o *método de Runge-Kutta*. Ele nasce do método de Euler, sendo o Runge-Kutta de primeiro grau o próprio método de Euler. O Runge-Kutta de segundo grau é o método de Euler melhorado, como veremos a seguir. Concluiremos a subseção com o Runge-Kutta de quarto grau, que é o método mais preciso para a obtenção de soluções aproximadas para um problema de valor inicial.

Cada método de Runge-Kutta é uma comparação com um polinômio de Taylor conveniente, daí que surgem os graus em seus nomes. Quando comparado a um polinômio de grau 1, teremos o Runge-Kutta de primeiro grau. Ao fazermos essa comparação, o cálculo da derivada é eliminado, fazendo-se assim avaliações da função f em cada iteração.

Pelo Teorema 2.2, se x for uma função de classe C^k , $(k+1)$ -vezes derivável em um intervalo contendo t_0 e t , então existirá $\xi \in (t_0, t)$ tal que

$$x(t) = x(t_0) + x'(t_0)(t - t_0) + \cdots + \frac{(t - t_0)^k}{k!} x^{(k)}(t_0) + \frac{(t - t_0)^{k+1}}{(k+1)!} x^{(k+1)}(\xi). \quad (16)$$

A fórmula (16) será utilizada para descrever os métodos a seguir.

2.5.1. Runge-Kutta de primeiro grau. Se substituirmos t_0 por t_n e t por $t_{n+1} = t_n + h$, a fórmula (16) equivale a:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + x'(t_n)h + \cdots + \frac{h^k}{k!} x^{(k)}(t_n) + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} x^{(k+1)}(\xi), \quad (17)$$

onde ξ é algum número entre t_n e t_{n+1} .

Se $k = 1$ na equação (17) e se o resto $\frac{x''(\xi)}{2}h^2$ for pequeno, obteremos a fórmula de Euler:

$$x_{n+1} = x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) = x_n + hf(t_n, x_n).$$

Portanto, podemos concluir que o procedimento de Runge-Kutta de primeiro grau é o método de Euler básico, sendo o erro de truncamento local igual a $e_{n+1} = \frac{h^2}{2!} x''(\xi)$.

2.5.2. *Runge-Kutta de segundo grau.* Fazendo $k = 2$ na equação (17), temos:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) + \frac{h^3}{3!}x^{(3)}(\xi), \quad (18)$$

com $\xi \in (t_n, t_{n+1})$.

Vamos buscar uma função φ de forma que a equação (18) seja escrita da seguinte forma:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n) \quad (19)$$

com $\varphi = ak_1 + bk_2$. Devemos encontrar a, b, k_1 e k_2 de modo que $x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n)$ seja igual ao polinômio de Taylor de x de grau 2, ou seja,

$$\begin{aligned} x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) &= x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n) \\ h[x'(t_n) + \frac{h}{2!}x''(t_n)] &= h(ak_1 + bk_2) \\ [x'(t_n) + \frac{h}{2!}x''(t_n)] &= ak_1 + bk_2. \end{aligned} \quad (20)$$

Consideremos $k_1 = x'(t_n) = f(t_n, x_n)$ e $k_2 = f(t_n + \alpha h, x_n + \beta hk_1)$. Vamos expandir k_2 com o seu polinômio de Taylor de grau 1, centrado em (t_n, x_n) (ou seja, com $h = 0$):

$$k_2 = f(t_n, x_n) + \alpha h \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + \beta h f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x} + R_2(t_n).$$

Lembrando que $R_2(t_n)$ é o resto de Lagrange para um polinômio de grau 1. Vamos calcular $ak_1 + bk_2$ e simplificar as contas, desprezando o resto $R_2(t_n)$, pois desejamos que ele seja suficientemente pequeno para ser desconsiderado.

$$\begin{aligned} ak_1 + bk_2 &= a(f(t_n, x_n)) + b \left[f(t_n, x_n) + \alpha h \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + \beta h f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x} \right] \\ &= (a + b)f(t_n, x_n) + b\alpha h \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + b\beta h f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x}. \end{aligned}$$

Por (20) e pelas contas até aqui feitas, a igualdade

$$x'(t_n) + \frac{h}{2}x''(t_n) = f(t_n, x_n) + \frac{h}{2} \left[\frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t} + f(t_n, x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x} \right]$$

só acontece se

$$\begin{cases} a + b &= 1 \\ b\alpha &= \frac{1}{2} \\ b\beta &= \frac{1}{2} \end{cases}$$

Este sistema tem infinitas soluções; vamos considerar a solução em que $a = b = \frac{1}{2}$ e $\alpha = \beta = 1$. Assim, por (19), temos

$$\begin{aligned} x(t_{n+1}) &= x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n) \\ x_{n+1} &= x_n + h \left[\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2 \right]. \end{aligned}$$

Com $k_1 = f(t_n, x_n)$, $k_2 = f(t_n + \alpha h, x_n + \beta k_1)$, $\alpha = \beta = 1$, obtemos:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{2}h[f(t_n, x_n)] + \frac{1}{2}h[f(t_n + h, x_n + f(t_n, x_n))].$$

Como $t_n + h = t_{n+1}$, obtemos

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

que é a fórmula de Euler melhorada.

2.5.3. *Runge-Kutta de terceiro grau.* Os métodos de Runge-Kutta de graus mais elevados são obtidos de modo semelhante aos de segundo grau.

Fazendo $k = 3$ na equação (17), temos:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) + \frac{h^3}{3!}x'''(t_n) + \frac{h^4}{4!}x^{(4)}(\xi), \quad (21)$$

com $\xi \in (t_n, t_{n+1})$. Novamente, buscaremos uma função φ tal que $x(t_{n+1}) = x(t_n) + h\varphi(t_n, x_n)$, porém, neste caso, devemos ter

$$\varphi = ak_1 + bk_2 + ck_3,$$

onde k_1, k_2 e k_3 aproximam derivadas em vários pontos do intervalo $[t_n, t_{n+1}]$. Aqui faz-se

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n), \\ k_2 = f(t_n + \alpha_1 h, x_n + \beta_1 h k_1), \\ k_3 = f(t_n + \alpha_2 h, x_n + \beta_2 h k_2 + (\alpha_2 - \beta_2) h k_1). \end{cases}$$

Teremos um sistema com mais incógnitas do que equações, que também terá infinitas soluções. Como o Runge-Kutta de terceiro grau não nos fornece uma boa precisão, não nos atentaremos a resolução de tal sistema de equações. Porém, informamos ao leitor interessado que os cálculos dessa resolução podem ser encontrados em [2], páginas 125-131. A solução mais conhecida do Runge-Kutta de terceira ordem é:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6} [k_1 + 4k_2 + k_3],$$

onde

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + h, x_n + 2hk_2 - hk_1). \end{cases}$$

Exemplo 2.6. Calculemos a solução numérica do Exemplo 8, utilizando Runge-Kutta de terceira ordem. O resultado está na Tabela 8 a seguir:

n	t_n	EXATA	Erro R-K 3º grau	Erro Euler Melhorado
0	0	3.0000	0.0000	0.0000
1	0.1	2.5423	0.0421	0.0029
2	0.2	2.1594	0.0690	0.0085
3	0.3	1.8384	0.0849	0.0152
4	0.4	1.5690	0.0929	0.0221
5	0.5	1.3423	0.0953	0.0286
6	0.6	1.1512	0.0940	0.0344
7	0.7	0.9898	0.0902	0.0392
8	0.8	0.8531	0.0849	0.0431
9	0.9	0.7372	0.0788	0.0460
10	1	0.6386	0.0722	0.0479

Tabela 8: Método de Runge-Kutta de terceiro grau - Exemplo 2.4, com $h = 0.1$.

Observemos que apesar de ser um método diferenciado e com erro de truncamento de ordem 4, ainda não superamos o método de Euler melhorado neste exemplo. É claro que considerando longas distâncias, o Runge-Kutta de terceiro grau será a melhor escolha pelo simples fato de que os erros não se acumulam nas iterações, diferentemente do que ocorre em Euler.

n	t _n	EXATA	ERRO R-K 3º grau	ERRO Euler Melhorado
0	0	3.00000	0.00000	0.00000
2	0.1	2.52142	0.02088	0.00119
4	0.2	2.12498	0.03439	0.00371
6	0.3	1.79593	0.04251	0.00686
8	0.4	1.52224	0.04674	0.01018
10	0.5	1.29407	0.04822	0.01338
12	0.6	1.10341	0.04779	0.01626
14	0.7	0.94369	0.04609	0.01873
16	0.8	0.80954	0.04358	0.02074
18	0.9	0.69656	0.04060	0.02229
20	1	0.60115	0.03740	0.02339

Tabela 9: Método de Runge-Kutta de terceiro grau - Exemplo 2.4, com $h = 0.05$.

A seguir veremos que o método de Runge Kutta de quarto grau, apesar de exigir um esforço computacional maior, ganha em eficácia, diminui os erros, e tem erro de truncamento de quinta ordem.

2.5.4. *Runge-Kutta de quarto grau.* O método mais preciso e mais utilizado é o método de Runge-Kutta de quarto grau.

Como nos casos anteriores, fazemos $k = 4$ na equação (17):

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2!}x''(t_n) + \frac{h^3}{3!}x^{(3)}(t_n) + \frac{h^4}{4!}x^{(4)}(t_n) + \frac{h^5}{5!}x^{(5)}(\xi) \tag{22}$$

com $\xi \in (t_n, t_{n+1})$, e precisamos encontrar as constantes apropriadas para que

$$x_{n+1} = x_n + h \underbrace{(ak_1 + bk_2 + ck_3 + dk_4)}_{\varphi(t_n, x_n)},$$

sendo as constantes k_1, k_2, k_3 e k_4 dadas por:

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + \alpha_1 h, x_n + \beta_1 h k_1) \\ k_3 = f(t_n + \alpha_2 h, x_n + \beta_2 k_1 + \beta_3 h k_2) \\ k_4 = f(t_n + \alpha_3 h, x_n + \beta_4 k_1 + \beta_4 k_2 + \beta_5 h k_3). \end{cases}$$

Novamente, teremos um sistema com mais incógnitas do que equações e, consequentemente, infinitas soluções. A solução mais conhecida deste método, de acordo com Boyce & DiPrima [1], é dada por:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4],$$

com

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 = f(t_n + h, x_n + hk_3). \end{cases}$$

Neste caso, o erro de truncamento global será de ordem 5, e dado por:

$$\frac{h^5}{5!} x^{(5)}(\xi).$$

Exemplo 2.7. Vamos encontrar uma solução numérica para o problema de valor inicial do Exemplo 2.4:

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3, \end{cases}$$

para o passo $h = 0.1$, utilizando o método de Runge-Kutta de quarto grau.

Conhecendo a condição inicial, encontraremos as constantes para $n = 0$. Com efeito,

$$k_1 = f(t_0, x_0) = e^{-t_0} - 2x_0 = -5,$$

$$k_2 = f(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + \frac{h}{2}k_1) = e^{-(t_0 + \frac{h}{2})} - 2(x_0 + \frac{h}{2}k_1) = -4.5488,$$

$$k_3 = f(t_0 + \frac{h}{2}, x_0 + \frac{h}{2}k_2) = e^{-(t_0 + \frac{h}{2})} - 2(x_0 + \frac{h}{2}k_2) = -4.5939,$$

$$k_4 = f(t_0 + h, x_0 + k_3h) = e^{-(t_0 + h)} - 2(x_0 + hk_3) = -4.1764.$$

Assim,

$$x_1 = x_0 + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] = 2.5423.$$

A solução exata é dada pela função $\psi(t) = e^{-t} + 2e^{-2t}$ e, neste caso, $\psi(0.1) = 2.5423$, ou seja, nas quatro casas decimais em que fixamos, este método tem uma ótima precisão. Observe a Tabela 10 para $h = 0.1$:

n	t_n	x_n	EXATA	ERRO R-K 4° grau	ERRO E-M
0	0	3	3	0.000000	0
1	0.1	2.500000	2.542299	0.000006	0.002943
2	0.2	2.090484	2.159371	0.000010	0.008477
3	0.3	1.754260	1.838441	0.000012	0.015173
4	0.4	1.477490	1.568978	0.000013	0.022083
5	0.5	1.249024	1.342290	0.000014	0.028605
6	0.6	1.059872	1.151200	0.000013	0.034385
7	0.7	0.902779	0.989779	0.000013	0.039240
8	0.8	0.771882	0.853122	0.000012	0.043102
9	0.9	0.662438	0.737167	0.000011	0.045986
10	1	0.570608	0.638550	0.000010	0.047949

Tabela 10: Método de Runge-Kutta de quarto grau - Exemplo 2.4, com $h = 0.1$.

Na última coluna, colocamos o erro do método de Euler Melhorado e fica nítido o quanto o Runge - Kutta de quarto grau é mais eficiente.

Observemos, abaixo, como o método age quando o passo h vai para $h = 0.05$. Na próxima tabela (Tabela 11) , colocamos seis casas decimais de aproximação, para observamos o erro.

n	t_n	x_n	EXATA	ERRO R-K 4° grau	ERRO E-M
0	0	3.0000000	3.0000000	0.00000000	0
2	0.1	2.5422993	2.5422989	0.00000034	0.00119137
4	0.2	2.1593714	2.1593708	0.00000056	0.00370693
6	0.3	1.8384422	1.8384415	0.00000069	0.00685934
8	0.4	1.5689787	1.5689780	0.00000076	0.01018427
10	0.5	1.3422903	1.3422895	0.00000078	0.01338008
12	0.6	1.1512008	1.1512001	0.00000077	0.01626241
14	0.7	0.9897800	0.9897792	0.00000075	0.01873003
16	0.8	0.8531227	0.8531220	0.00000071	0.02073946
18	0.9	0.7371681	0.7371674	0.00000066	0.02228619
20	1	0.6385506	0.6385500	0.00000060	0.02339102

Tabela 11: Método de Runge-Kutta de quarto grau - Exemplo 2.4 com $h = 0.05$.

É claro que aqui temos uma precisão muito boa. Com um passo h menor, teríamos um erro menor ainda. Observe a Figura 8 com os pontos da Tabela 10 plotados, e compare com os gráficos anteriores. O método de Runge-Kutta de 4° grau tem uma eficácia maior.

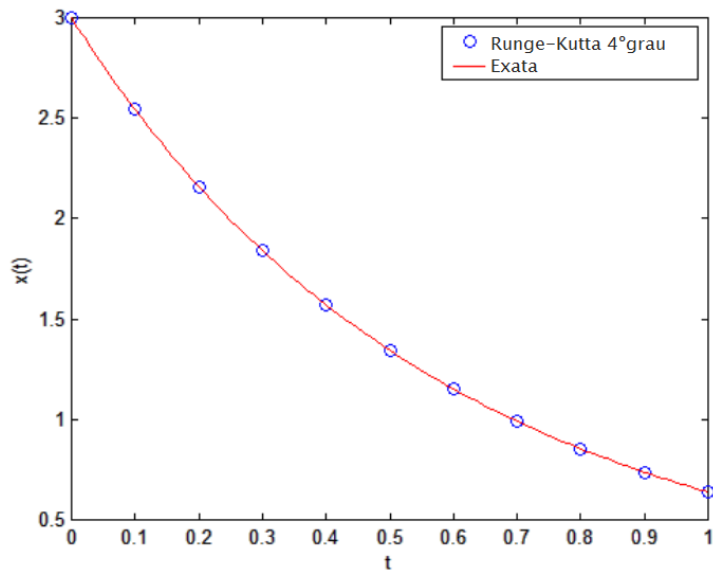


Figura 8: Gráfico dos pontos da Tabela 10 com $h = 0.1$.

2.6. ANALISANDO OS MÉTODOS. Até o momento estudamos os métodos numéricos conhecidos como *métodos de um passo só*. Todos eles derivam do método de Euler. Para ilustrar, na tabela abaixo, descrevemos os erros obtidos pelos métodos de: Euler, Euler Melhorado e Runge-Kutta de quarto grau para aproximar a solução do problema de valor inicial do Exemplo 2.4 com $h = 0.05$.

n	Euler	Euler Melhorado	R-K 4º grau
0	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2	0.0197375	0.0011914	0.0000003
4	0.0323430	0.0037069	0.0000005
6	0.0397660	0.0068593	0.0000006
8	0.0434796	0.0101843	0.0000007
10	0.0445900	0.0133801	0.0000007
12	0.0439221	0.0162624	0.0000007
14	0.0420853	0.0187300	0.0000007
16	0.0395252	0.0207395	0.0000007
18	0.0365635	0.0222862	0.0000006
20	0.0334281	0.0233910	0.0000006

Tabela 12: Comparação entre os erros dos métodos, com $h = 0.05$, utilizando o problema de valor inicial do Exemplo (2.4).

Observando a Tabela 12 vemos que, quanto maior o grau de um método, melhor será a precisão obtida comparando com a solução exata. Euler é um método de rápidas iterações, sem grande esforço computacional. Runge-Kutta de quarto grau é um método que agrega uma quantia maior de cálculos, mas que conta com uma precisão maior do que a do método de Euler. Na Seção 4 discutiremos sobre convergência dos métodos numéricos e estas afirmações feitas acima farão mais sentido do ponto de vista matemático.

3. Métodos de passos múltiplos

Na seção anterior, vimos somente métodos de passos únicos. Os métodos que veremos aqui, chamados de passos múltiplos, são bem precisos, porém eles necessitam de conhecimento prévio de alguns pontos da solução. Assim, os métodos de passos múltiplos são apropriados para os casos em que já se conhece alguns pontos do problema, digamos $(t_1, x_1), (t_2, x_2), \dots, (t_n, x_n)$, e se deseja estimar o valor de (t_{n+1}, x_{n+1}) . Todos aqueles que precisam de mais de uma informação, ou seja, mais um ponto além da condição inicial, são chamados *métodos de passos múltiplos*.

3.1. MÉTODOS DE ADAMS. Nesta subseção, veremos os dois métodos de Adams: a fórmula de *Adams-Bashforth* e a fórmula de *Adams-Moulton*. Ambas são de passos múltiplos, mas a diferença é que a primeira é uma fórmula explícita e a segunda implícita. O *método de previsão e correção* é a combinação desses dois métodos.

3.1.1. *Método de Adams - Bashforth.* Relembremos que

$$\psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, \psi(s)) ds, \quad (23)$$

com $\psi(t)$ sendo a solução do problema de valor inicial

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

quando f é uma função contínua.

A ideia é aproximar a derivada ψ' por um polinômio P_k de grau k e usar esse polinômio para calcular a integral em (23). Vejamos um exemplo simples em que gostaríamos de aproximar ψ' por um polinômio P_1 de grau 1. Para isso será necessário conhecer a priori dois pontos, além da condição inicial, digamos: (t_{n-1}, x_{n-1}) e (t_n, x_n) . Como P_1 deve ser uma aproximação de ψ' , precisamos ter:

$$\begin{cases} P_1(t_{n-1}) = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \\ P_1(t_n) = f(t_n, x_n). \end{cases}$$

Para simplificar, trocaremos a notação $f(t_i, x_i)$ por f_i . Seja $P_1(t) = \alpha t + \beta$. É preciso resolver o sistema abaixo encontrando os valores α e β que satisfaçam:

$$\begin{cases} \alpha t_{n-1} + \beta = f_{n-1} \text{ (I),} \\ \alpha t_n + \beta = f_n \text{ (II).} \end{cases} \quad (24)$$

De (I) segue que

$$\beta = f_{n-1} - \alpha t_{n-1} \text{ (III).}$$

Substituindo (III) em (II), temos:

$$\begin{aligned} \alpha t_n + (f_{n-1} - \alpha t_{n-1}) &= f_n \\ \alpha(t_n - t_{n-1}) &= f_n - f_{n-1}. \end{aligned}$$

Como $t_n - t_{n-1} = h$, segue que:

$$\alpha = \frac{f_n - f_{n-1}}{h}.$$

Agora, substituindo esse α na equação (III), obtemos

$$\begin{aligned} \beta &= f_{n-1} - \left(\frac{f_n - f_{n-1}}{h} \right) t_{n-1} \\ \beta &= \frac{f_{n-1}(t_n - t_{n-1}) - f_n t_{n-1} + f_{n-1} t_{n-1}}{h} \\ \beta &= \frac{f_{n-1} t_n - f_n t_{n-1}}{h}. \end{aligned}$$

Trocando $\psi'(t)$ por $P_1(t)$ em (23), temos:

$$\psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\alpha s + \beta) ds = \frac{\alpha}{2} (t_{n+1}^2 - t_n^2) + \beta(t_{n+1} - t_n).$$

Como este é um método para estimar a solução que ainda não conhecemos, então substituímos $\psi(t_i)$ por x_i e assim:

$$\begin{aligned} x_{n+1} - x_n &= \frac{\alpha(t_{n+1}^2 - t_n^2)}{2} + \beta(t_{n+1} - t_n) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{(f_n - f_{n-1})(t_{n+1}^2 - t_n^2)}{2h} + \frac{(f_{n-1} t_n - f_n t_{n-1})(t_{n+1} - t_n)}{h} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{(f_n - f_{n-1})(t_{n+1} + t_n)}{2} + (f_{n-1} t_n - f_n t_{n-1}) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{(f_n - f_{n-1})(2t_n + h) + 2f_{n-1} t_n - 2f_n t_{n-1}}{2} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{2f_n t_n + f_n h - 2f_{n-1} t_n - f_{n-1} h + 2f_{n-1} t_n - 2f_n t_{n-1}}{2} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{3f_n t_n - 3f_n t_{n-1} - f_{n-1} h}{2} \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{3f_n(t_n - t_{n-1}) - f_{n-1} h}{2}, \end{aligned}$$

de onde segue que

$$x_{n+1} = x_n + \frac{3f_n h - f_{n-1} h}{2}. \quad (25)$$

A equação (25) é a fórmula de *Adams-Bashforth* de segundo grau. Ela tem erro de truncamento de ordem $O(h^3)$ e é explícita; para deduzí-la tomamos um polinômio de segundo grau. Para deduzir *Adams-Bashforth* de graus maiores basta seguir o esquema acima, porém será necessário conhecer mais pontos. Para obter a fórmula de *Adams-Bashforth* de quarto grau, que é a mais precisa e conhecida, é necessário conhecer quatro pontos. Aproximando ψ' por um polinômio de grau 3, $P_3(t)$, e fazendo as devidas simplificações algébricas, obtemos:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 32f_{n-2} - 9f_{n-3}). \quad (26)$$

Para resolvê-la, portanto, é necessário conhecer $(t_{n-3}, x_{n-3}), (t_{n-2}, x_{n-2}), (t_{n-1}, x_{n-1})$ e (t_n, x_n) . Para conseguir esses pontos, basta utilizar qualquer método de passo único, visto na seção anterior. Como o *Runge-Kutta* de quarto grau é o mais preciso entre eles, utilizaremos ele no exemplo a seguir.

Exemplo 3.1. Resolveremos o problema de valor inicial (8) (Exemplo 2.4), utilizando o método de *Adams-Bashforth* para ver como ele se comporta comparado aos métodos de passo único. O problema de valor inicial

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3 \end{cases}$$

tem como solução exata $\psi(t) = e^{-t} + 2e^{-2t}$. Este exemplo foi utilizado no estudo dos métodos vistos até agora. Em todos eles, estamos iterando até $t = 1$, fixando $h = 0.1$. Por conta disso, iremos estimar o valor de $x(t)$ para $t = 1$, utilizando *Adams-Bashforth*. Para o *Runge-Kutta*, foi necessário 10 iterações até chegar neste ponto. Consideremos então as quatro últimas iterações, ou seja, $n = 6, 7, 8$ e 9 , pois precisamos calcular:

$$x_{10} = x_9 + \frac{h}{24}(55f_9 - 59f_8 + 32f_7 - 9f_6).$$

Da Tabela 10, temos:

Colocando os valores na fórmula, concluímos que $x_{10} = 0.63860$. Note que o erro absoluto neste método é 0.00005, já que o valor exato é $\psi(1) = 0.63855$. No *Runge-Kutta*, para o mesmo $h = 0.1$, o erro absoluto é 0.00001. Portanto, ainda não vale a pena utilizar o método de *Adams-Bashforth*, já que ele não é tão eficaz quanto o *Runge-Kutta*. E por conta dessa eficácia não tão boa, que o *Adams-Moulton* surge para corrigir, *Adams-Bashforth* prevê e *Adams-Moulton* corrige, juntos eles formam o método de previsão e correção.

n	t_n	x_n	$f(t_n, x_n) = f_n$
6	0.6	1.1512	-1.7536
7	0.7	0.9898	-1.4830
8	0.8	0.8531	-1.2569
9	0.9	0.7372	-1.0678

Tabela 13: Valores retirados do método de Runge-Kutta, para $h = 0.1$.

3.1.2. *Método de Adams - Moulton.* A fórmula de *Adams-Moulton* é uma variação da fórmula de *Adams-Bashforth*, com a diferença de que essa é do tipo implícita. Para a dedução, utilizamos um método bem parecido. Faremos para o polinômio de grau 1 e, para polinômios de maiores graus, as contas serão análogas. Consideremos

$$P_1(t) = \alpha t + \beta, \quad (27)$$

mas agora, para acharmos α e β tomemos os pontos (t_n, x_n) e (t_{n+1}, x_{n+1}) . Assim,

$$\begin{cases} \alpha t_n + \beta = f_n & \text{(I)} \\ \alpha t_{n+1} + \beta = f_{n+1} & \text{(II)}. \end{cases}$$

De (I) segue que

$$\beta = f_n - \alpha t_n \quad \text{(III)}.$$

Substituindo este valor em (II), concluímos que

$$\begin{aligned} \alpha t_{n+1} + \beta &= f_{n+1} \\ \alpha t_{n+1} + f_n - \alpha t_n &= f_{n+1} \\ \alpha(t_{n+1} - t_n) &= f_{n+1} - f_n \\ \alpha &= \frac{f_{n+1} - f_n}{h}. \quad \text{(IV)} \end{aligned}$$

Substituindo (IV) em (III), obtemos:

$$\begin{aligned} \beta &= f_n - \alpha t_n \\ \beta &= f_n - \left(\frac{f_{n+1} - f_n}{h} \right) t_n \\ \beta &= \frac{f_n(t_{n+1} - t_n) - f_{n+1}t_n + f_n t_n}{h} \\ \beta &= \frac{f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n}{h}. \end{aligned}$$

Agora, trocando $\psi'(t)$ da equação (23) pelo polinômio (27) e calculando a integral, temos:

$$\begin{aligned} \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{\alpha(t_{n+1}^2 - t_n^2)}{2} + \beta(t_{n+1} - t_n) \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{(f_{n+1} - f_n)(t_{n+1} - t_n)(t_{n+1} + t_n)}{2h} + \frac{(f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n)(t_{n+1} - t_n)}{h} \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{(f_{n+1} - f_n)(t_{n+1} + t_n)}{2} + f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2}(f_{n+1} t_{n+1} + f_{n+1} t_n - f_n t_{n+1} - f_n t_n) + f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2}(f_{n+1} t_{n+1} - f_{n+1} t_n + f_n t_{n+1} - f_n t_n) \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2} f_{n+1} (t_{n+1} - t_n) + \frac{1}{2} f_n (t_{n+1} - t_n) \\ \psi(t_{n+1}) - \psi(t_n) &= \frac{1}{2} f_{n+1} h + \frac{1}{2} f_n h. \end{aligned}$$

Ao substituírmos $\psi(t_i)$ por x_i , obtemos a fórmula de Adams-Moulton de segundo grau:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n). \quad (28)$$

Como se pode observar, essa fórmula é implícita tendo em ambos os lados da igualdade uma incógnita x_{n+1} . De forma análoga se obtém o método de quinto grau, que é o mais conhecido e preciso por ter um erro de truncamento de quinta ordem, proporcional a h^5 . Sua fórmula é dada por:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}). \quad (29)$$

Exemplo 3.2. Utilizaremos a fórmula (29) para resolver o mesmo problema de valor inicial tratado no Exemplo (3.1), utilizando um passo $h = 0.1$ e calculando o valor de x_n até $t = 1$.

Para aplicarmos a fórmula, é necessário conhecermos a priori três valores. Sejam eles: f_7, f_8 e f_9 . Para conhecê-los, usaremos o método de Runge-Kutta de quarto grau. Consultando a Tabela 13, temos os valores procurados. Então, colocando-os na fórmula, obtemos:

$$\begin{aligned} x_{10} &= 0.737179 + \frac{0,1}{24}(9f_{10} + 19(-1.067788) - 5(-1.256940) + \\ &\quad + (-1.482999)) \\ x_{10} &= 0.672652 + 0.0375f_{10} \\ x_{10} &= 0.672652 + 0.0375(e^{-1} - 2x_{10}) \\ x_{10} &= 0.686448 - 0.075x_{10} \\ 1.075 \cdot x_{10} &= 0.686448 \\ x_{10} &= 0.638556 \end{aligned}$$

Este método é mais preciso que o Adams-Bashforth. Levando em consideração que a solução exata $\psi(1) = 0.638550$, temos que o erro absoluto para Adams-Moulton nesse passo é 0.000006, enquanto o erro obtido pelo método de Adams-Bashforth é 0.000056 e o obtido pelo método de Runge-Kutta é 0.000010. Tanta precisão vem acompanhada de um esforço, já que temos a inconveniência de resolver uma equação a cada passo. É preciso decidir se vale a pena o esforço perante a precisão que se obterá. Diante disso, foi implementado o método de *previsão e correção* que basicamente tentou combinar precisão e menos esforço computacional. As generalizações dos métodos de Adams-Moulton e Adams-Bashforth podem ser consultadas em [6].

3.2. MÉTODO DE PREVISÃO E CORREÇÃO. Este método é uma combinação da fórmula de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de quarto grau. Portanto, é necessário conhecer a priori quatro pontos:

$$(t_{n-3}, x_{n-3}), (t_{n-2}, x_{n-2}), (t_{n-1}, x_{n-1}) \text{ e } (t_n, x_n).$$

Com estes pontos conhecidos é possível calcular $f_{n-3}, f_{n-2}, f_{n-1}$ e f_n . Utilizando a fórmula de Adams-Bashforth (26), conseguimos estimar o valor de x_{n+1} . Usando este valor encontrado, calculamos f_{n+1} e colocamos no método de Adams-Moulton (29), corrigindo o valor de x_{n+1} . Dessa forma não teremos mais um método implícito. Vejamos tal método sendo utilizado em um exemplo prático, o Exemplo 3.1.

Exemplo 3.3. No Exemplo 3.1 calculamos $x_{10} = 0.6386$ para $h = 0.1$, utilizando Adams-Bashforth 26. Assim, $f_{10} = e^{-1} - 2 * 0.6386 = -0.9093$. Tomando os valores da Tabela 13 e o valor de f_{10} , colocamos na fórmula de Adams-Moulton (29) para a correção e obtemos:

$$\begin{aligned} x_{10} &= x_{10} + \frac{0.1}{24}(9f_{10} + 19f_9 - 5f_8 + f_7) \\ x_{10} &= 0.6386 + \frac{0.1}{24}(9(-0.9093) + 19(-1.0678) - 5(-1.2569) - 1.4830) \\ x_{10} &= 0.63855 \end{aligned}$$

Com relação a equação exata, este método tem um erro absoluto de 0.000002, isto é, para este passo $h = 0.1$, o método de previsão e correção fica em torno de 20 vezes mais preciso que o método do Adams-Moulton, e ainda com a vantagem de não ser um método implícito. Outra vantagem deste método é a possibilidade de iterar o mesmo x_n diversas vezes para conseguir uma melhor precisão no ponto t desejado.

4. Convergência

Uma das propriedades mais básicas de um método numérico para encontrar soluções aproximadas de equações diferenciais ordinárias é a precisão. Toda vez que calculamos soluções aproximadas, precisamos saber se o

método usado é capaz de nos fornecer uma solução mais próxima da exata, caso desejarmos. Vejamos, pois, a definição de convergência.

Definição 4.1. (Convergência) Um método numérico de passo único é dito convergente se, para qualquer $t \in [a, b]$,

$$\lim_{h \rightarrow 0} |x_n - \psi(t)| = 0,$$

com $nh = t - a$, onde x_n é a solução obtida pelo método e $\psi(t)$ é a solução da equação diferencial ordinária.

Intuitivamente podemos dizer que um método numérico de passo único é convergente quando a solução x_n obtida pelo método se aproxima ponto a ponto da solução exata da equação diferencial ordinária $\psi(t)$, quando o tamanho do passo h tende a zero.

Exemplo 4.2. Variando o tamanho do passo h , vamos estimar a solução $\psi(t)$ para o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} x'(t) = e^{-t} - 2x \\ x(0) = 3, \end{cases}$$

utilizando os métodos de Euler e Euler melhorado.

Construímos, então, a Tabela 14 para podermos visualizar o erro em cada método para o mesmo ponto. Tomaremos sempre $t = 1$.

h	n	Euler	Euler Melhorado	Erro E	Erro E-M
0,5	2	0.303265	0.917786	0.335285	0.279236
0,25	4	0.461333	0.767561	0.177217	0.129010
0.2	5	0.498555	0.739293	0.139995	0.100743
0.1	10	0.570608	0.686499	0.067942	0.047949
0.05	20	0.605122	0.661941	0.033428	0.023391

Tabela 14: Ordem de convergência.

Note que, à medida que o passo h diminui, cada método obtém uma melhor aproximação. Além disso, a cada valor menor de h , o método de Euler melhorado nos fornece uma melhor aproximação. Isto está relacionado com a ordem de convergência de cada método.

Definição 4.3. (Ordem de Convergência) Considere a solução de uma equação diferencial no ponto $t = t_n$ e a solução aproximada x_n pelo método neste ponto. Dizemos que a ordem de convergência é p se existir uma constante C tal que:

$$|x_n - \psi(t_n)| < Ch^p.$$

A ordem de convergência é uma maneira de quantificar a rapidez com a qual a solução numérica obtida por um método se aproxima da solução exata. Conforme h tende a zero, o termo $O(h^p)$, que na verdade é o erro de truncamento local, tende a zero com a mesma rapidez que h^p . Por exemplo, o método de Euler tem ordem 2 (veja (10)), o método de Euler melhorado tem ordem 3 (veja (18)), o método de Runge-Kutta de 3º grau tem ordem 4 (veja (21)) e o método de Runge-Kutta de 4º grau tem ordem 5 (veja (22)). Assim, o método de Runge-Kutta de 4º grau aproxima mais rápido a solução numérica da solução exata do que os outros métodos citados. Para mais detalhes, sugerimos ao leitor que consulte a referência [7].

Exemplo 4.4. *Considere o seguinte problema de valor inicial:*

$$\begin{cases} x'(t) = 0.3x \\ x(0) = 3 \end{cases} \quad (30)$$

que tem como solução exata $\psi(t) = 3e^{0.3t}$, para $t \geq 0$. Mostraremos que o método de Euler é convergente utilizando a definição de convergência.

Primeiramente, precisamos deduzir a equação de diferença. Do método de Euler, temos:

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

Assim, para $n = 1$:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + h(0.3x_0) \\ x_1 &= x_0(1 + 0.3h). \end{aligned}$$

Para $n = 2$:

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 + h(0.3x_1) \\ x_2 &= x_1(1 + 0.3h) \\ x_2 &= x_0(1 + 0.3h)^2. \end{aligned}$$

Dessa forma deduzimos a equação de diferença para o problema de valor inicial (30): $x_n = 3(1 + 0,3h)^n$. Podemos, então, provar a convergência do método para este problema de valor inicial utilizando a definição de convergência (Definição 4.1), com $a = 0$ e $nh = t$ (ou seja, $n = t/h$). Calculemos o limite de $|x_n|$ quando h tende a 0:

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} |x_n| &= \lim_{h \rightarrow 0} |3(1 + 0,3h)^n| \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} |3(1 + 0,3h)^{\frac{t}{h}}| \\ &= 3 \left| \lim_{h \rightarrow 0} (1 + 0,3h)^{\frac{t}{h}} \right| \\ &= 3e^{0.3t}. \end{aligned}$$

Como a solução do problema (30) é dada também por $\psi(t) = 3e^{0.3t}$, obtemos a convergência.

Observação 4.5. *A definição de convergência para métodos de passos múltiplos é similar a utilizada para métodos de passo único (Definição 4.1).*

Observe que, no Exemplo (30), para usar a definição de convergência foi preciso conhecer a solução exata do problema de valor inicial e também calcular sua equação de diferença. Isso não é sempre possível. Entretanto, estudando a estabilidade e a consistência de métodos numéricos, conceitos estes não explorados neste artigo, também é possível investigar a convergência dos mesmos. Indicamos as referências [11] e [5] para este estudo.

5. Estudo da decomposição de matéria orgânica antropogênica em um rio

Os corpos hídricos são o destino final dos esgotos sanitários e industriais em quase todo o mundo. Além de ser um canal que leva os resíduos para longe, os rios, riachos ou mares contemplam de uma característica natural: capacidade de autodepuração. Isto é, quando se é jogado lixo orgânico em um riacho, uma demanda bioquímica de oxigênio é exercida, isto quer dizer que a decomposição bacteriana do lixo utiliza oxigênio. Esse oxigênio que está dissolvido na água é reabastecido por difusão através da interface ar-água, processo denominado re-aeração. Se existe um ponto de esgoto in natura jogado em um rio com fluxo uniforme estacionário sendo considerado, um padrão de oxigênio dissolvido é observado. Logo abaixo do canal do emissário de resíduos a quantidade de oxigênio dissolvido cai por conta da demanda de bioquímica. Como a decomposição do lixo prossegue, a bioquímica é diminuída pela falta de oxigênio e a re-aeração atmosférica reabastece a quantidade de oxigênio dissolvido. Assim, com esse processo acontecendo, o oxigênio dissolvido tende a ir diminuindo rio abaixo, até chegar em um valor crítico, mínimo e, em seguida, volta gradualmente às condições ambientais ou não. O processo pode ser modelado e sua forma é de uma equação ordinária.

Basicamente, esta ferramenta fornece a visualização do comportamento do corpo d'água em relação à quantidade de oxigênio dissolvido ao longo de seu curso ou do tempo após a recepção do esgoto. Para essa visualização utiliza-se como referência um limite mínimo de oxigênio dissolvido, para ser feita a análise e poder determinar qual o nível de tratamento é necessário ao esgoto antes deste ser lançado. Caso nenhum atenda as condições legais locais, precisa-se encontrar outro corpo receptor.

A forma inicial deste modelo, conhecido por Streeter-Phelps, foi proposta em 1925 por Harold Warner Streeter e Earle Bernard Phelps a partir de um estudo do processo de oxidação e aeração no Rio Ohio nos Estados Unidos com base em dados obtidos de maio de 1914 a abril de 1915. Outras versões

mais complexas já foram desenvolvidas por conta do avanço tecnológico e da possibilidade de realizar contas em computadores, envolvendo variáveis como fotossíntese, respiração e demanda bentônica de oxigênio.

Este é um problema complexo, repleto de variáveis e compostos químicos. Para um maior entendimento, sugerimos a leitura do trabalho de Streeter-Phelps [10].

De acordo com o estudo apresentado em [10], a taxa de mudança no deficit de oxigênio é regida por duas reações independentes. Em primeiro lugar, o deficit aumenta a uma velocidade que pode ser considerada proporcional à exigência de oxigênio da matéria orgânica. Em segundo lugar, diminui o re-arejamento a uma velocidade diretamente proporcional. As duas doses podem ser expressas por:

$$\frac{dD_1}{dt} = K_1L \quad (31)$$

$$\frac{dD_2}{dt} = -K_2D \quad (32)$$

com

$$\frac{-dL}{dt} = K_1L,$$

onde

$$L = L_0e^{-K_1t},$$

sendo (31) a taxa de desoxigenação em termos do deficit de saturação de oxigênio e (32) a taxa de re-aeração, também em termos da diminuição da saturação de oxigênio, representado pela letra D em partes por milhões. Já L é a variável da demanda de oxigênio que a matéria orgânica necessita. O tempo t nessa fórmula é considerado em dias. K_1 e K_2 são constantes que definem a taxa de desoxigenação e re-aeração, respectivamente.

Agora, a equação que modela a concentração D de oxigênio dissolvido é:

$$\frac{dD}{dt} = \left(\frac{dD_1}{dt} \right) + \left(\frac{dD_2}{dt} \right), \quad (33)$$

portanto,

$$\frac{dD}{dt} = K_1L - K_2D. \quad (34)$$

A equação (34) é linear e tem solução exata, a saber:

$$D(t) = \frac{K_1}{K_2}(L_0e^{-K_1t}) + Ce^{-K_2t},$$

sendo D_0 a taxa inicial de saturação de oxigênio presente na água, em partes por milhões e L_0 a demanda inicial de oxigênio requisitado pela matéria orgânica, levando em consideração $t = 0$. C é a constante de integração, que dependerá da condição inicial dada. Para podermos conhecer C , vamos considerar os seguintes valores, retirados de Silva, 2004 [8] :

- $K_1 = 0.4$ por dia;
- $K_2 = 0.2$ por dia;
- $D_0 = 7.6$ mg/L;
- $L_0 = 300$ mg/L.

De (34), obtemos o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dD}{dt} = 120e^{-0.4t} - 0,2D \\ D(0) = 7.6. \end{cases}$$

Como este é um problema com condição inicial, então $C = 607.6$ e a solução exata sob essas condições é:

$$D(t) = -600e^{-0.4t} + 607.6e^{-0.2t}.$$

5.1. UTILIZANDO OS MÉTODOS NUMÉRICOS. Utilizando os métodos estudados nas seções anteriores, vamos resolver o problema proposto.

Utilizaremos para cada método $h = 0.1$ e calcularemos a quantidade de oxigênio dissolvido na água para o 5^o dia.

5.2. MÉTODO DE EULER. Para aplicarmos o método de Euler, utilizamos a fórmula:

$$D_{n+1} = D_n + hf(t_n, D_n).$$

Obtemos, então, os valores obtidos na Tabela 15:

n	t _n	D _n	f(t _n , D _n)	EXATA	Erro Absoluto
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.000000
10	1	97.879806	60.862444	95.268778	2.611028
20	2	141.423202	25.634835	137.689082	3.734121
30	3	156.743063	4.794693	152.741423	4.001640
40	4	155.680984	-6.908615	151.874368	3.806616
50	5	145.710563	-12.901879	142.322379	3.388184

Tabela 15: Método de Euler.

5.3. MÉTODO DE EULER MELHORADO. Para aplicarmos o método de Euler melhorado, utilizamos as fórmulas:

$$D'_{n+1} = D_n + hf(t_n, D_n), \tag{35}$$

$$D_{n+1} = D_n + h \left[\frac{f(t_n, D_n) + f(t_{n+1}, D'_{n+1})}{2} \right]. \tag{36}$$

Utilizando (35) e (36), construímos a Tabela 16:

n	t_n	D_n	f(t_n, D_n)	EXATA	Erro Absoluto
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.000000
10	1	95.136080	61.411190	95.268778	0.132698
20	2	137.264670	26.466542	137.689082	0.424411
30	3	151.990313	5.745243	152.741423	0.751109
40	4	150.825993	-5.937616	151.874368	1.048375
50	5	141.035016	-11.966769	142.322379	1.287363

Tabela 16: Método de Euler melhorado.

5.4. MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE QUARTO GRAU. Para aplicarmos o método de Runge-Kutta de quarto grau, utilizamos a fórmula:

$$D_{n+1} = D_n + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4], \tag{37}$$

com

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, D_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, D_n + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, D_n + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 = f(t_n + h, D_n + hk_3) \end{cases}$$

Utilizando (37), construímos a Tabela 17:

n	t_n	D_n	f(t_n, D_n)	EXATA	Erro Absoluto
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.0000000000
10	1	95.268778	61.384650	95.268778	0.0000003104
20	2	137.689081	26.381659	137.689082	0.0000004422
30	3	152.741422	5.595021	152.741423	0.0000004717
40	4	151.874367	-6.147291	151.874368	0.0000004463
50	5	142.322378	-12.224242	142.322379	0.0000003947

Tabela 17: Método de Runge-Kutta de quarto grau.

Informamos que a coluna referente ao erro absoluto para a Tabela 17 está com uma aproximação de dez casas decimais, para podermos visualizar os pequenos erros deste método.

5.5. MÉTODO DE PREVISÃO E CORREÇÃO. Vimos que o método da previsão e correção é um método de passos múltiplos explícito, isto é, precisamos conhecer alguns pontos iniciais para darmos início às iterações. Ele é composto por duas fórmulas famosas: Adams-Bashforth e Adams-Moulton, ambas de

quarto grau, sendo a primeira explícita e a segunda implícita.

$$\text{Adams-Bashforth} - D_{n+1} = D_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 32f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

$$\text{Adams-Moulton} - D_{n+1} = D_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}).$$

Para começarmos as iterações, consideremos quatro pontos conhecidos por já terem sido estimados com o método de Runge-Kutta de quarto grau:

n	t _n	D _n	f(t _n , D _n)
0	0	7.6	118.48
1	0.1	19.09505037	111.4757226
2	0.2	29.90585532	104.7927905
3	0.3	40.06386846	98.41767871

Tabela 18: Quatro primeiras iterações utilizando o método de Runge-Kutta de quarto grau.

Vamos usar a fórmula de Adams-Bashforth para calcular o valor de D até o passo 50, que é quando o tempo atinge 5 dias, lembrando que $h = 0.1$. Depois corrigiremos os valores encontrados, usando a fórmula de Adams-Moulton. Assim, temos a seguinte tabela:

n	t _n	D _n	f(t _n , D _n)	EXATA	Erro Absoluto
0	0	7.600000	118.480000	7.600000	0.000000
10	1	95.669573	61.304491	95.268778	4.007951
20	2	139.307328	26.058010	137.689082	1.618246
30	3	155.689708	5.005364	152.741423	2.948285
40	4	155.900374	-6.952493	151.874368	4.026006
50	5	147.037320	-13.167230	142.322379	4.714941

Tabela 19: Método de previsão e correção de quarto grau.

5.6. CONCLUSÕES. Para o método de Euler, com $h = 0.1$, tivemos um grau de precisão bom, pelo menos até o tempo de 5 dias. A título de exemplificação, colocaremos apenas este gráfico, já que, nos outros, quase não se nota diferença entre a solução real e a aproximada.

Vale a pena tentar interpretar os resultados obtidos com a solução desse problema. A demanda bioquímica de oxigênio para um rio é de essencial importância para a vida dele. Existe um limite permitido, mínimo e máximo,

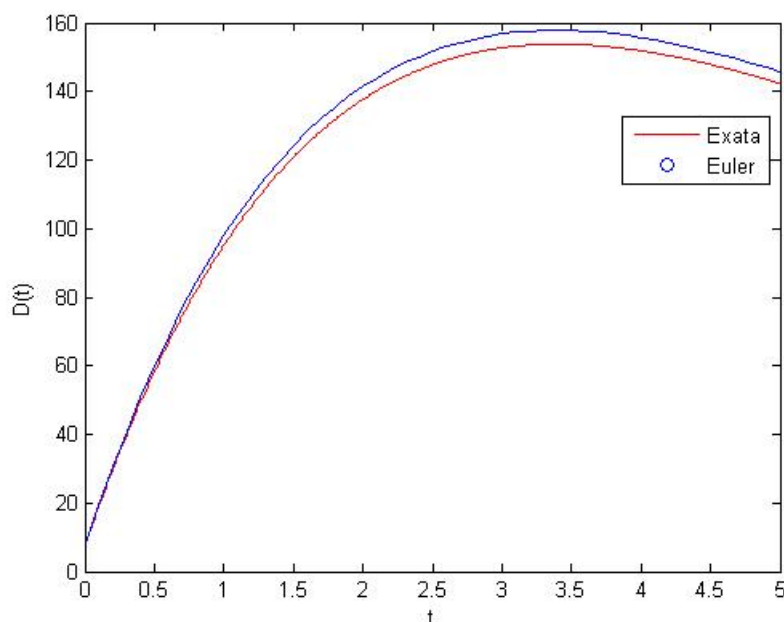


Figura 9: Gráfico do problema de demanda bioquímica de oxigênio, usando Euler com $h = 0.1$.

dessa demanda. Antes de colocar uma saída de resíduos em um rio, este estudo é vital. Enfatizando que, para o nosso caso, o problema foi simplificado o suficiente para ser possível encontrar a solução exata. Utilizando o método de Euler e um passo $h = 1$ fizemos os cálculos para t igual a 50 dias. Vale ressaltar que uma fonte de resíduos fica em um rio durante anos, justificando a importância do estudo da demanda bioquímica para que o rio consiga se recuperar e continue com vida.

Note que a demanda bioquímica de oxigênio começa a aumentar muito haja vista que existe matéria orgânica sendo acrescentada na água necessitando de decomposição. Porém, essa demanda atinge um limite máximo, pois cada corpo d'água reage de uma forma diferente que depende de temperatura, tipo e quantidade de resíduos, fator re-aeração, entre outros. Depois de atingido esse limite, a demanda bioquímica começa a diminuir e é com essa diminuição que se deve tomar cuidado. Quando a demanda ficar igual zero, significa que o corpo d'água não tem mais microrganismos vivos capazes de praticar decomposição, isto é, o rio está morto. É claro que neste caso estamos levando em conta apenas os fatores de desoxigenação, causado pelo maior uso de oxigênio para decompor os resíduos e a re-aeração, processo de difusão que ocorre entre o ar e a água. É preciso buscar um equilíbrio para que o rio não chegue a níveis críticos.

Exemplificando o parágrafo a cima, consideremos que a constante K_1 referente a desoxigenação diminua em quatro vezes, ou seja, $K_1 = 0.1$ e a cons-

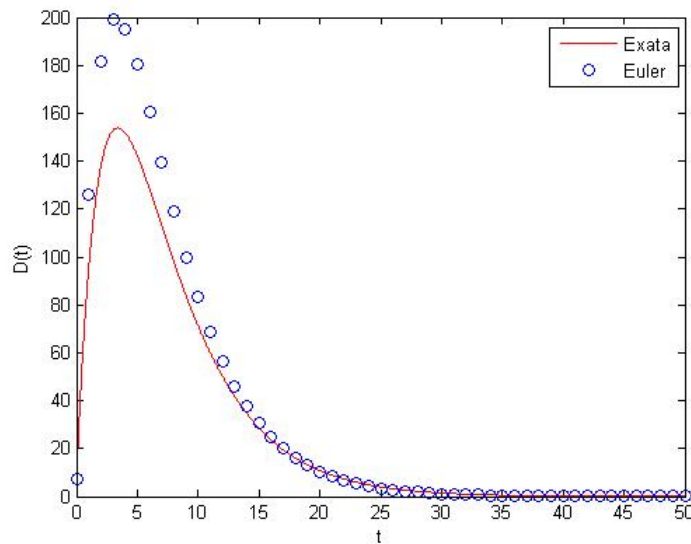


Figura 10: Gráfico do problema de demanda bioquímica de oxigênio, usando Euler com $h = 1$.

tante responsável pelo fator re-aeração quadruplicado, $K_2 = 0.8$. Vejamos o que acontece com o modelo em 50 dias, no Gráfico 11.

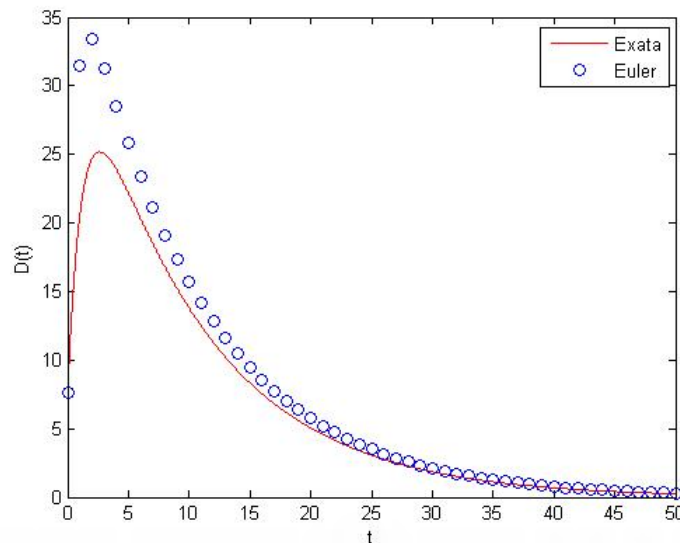


Figura 11: Gráfico depois de alteradas as constantes K_1 e K_2 do problema de demanda bioquímica de oxigênio, usando Euler com $h = 1$.

Veja que, no Gráfico 11, a demanda bioquímica de oxigênio teve sua queda mais suave, comparada ao Gráfico 10. Neste caso, a vida do riacho foi prolongada em alguns dias.

5.7. CONSIDERAÇÕES FINAIS. A grande quantidade de cálculos e a complexidade de problemas de modelagem matemática não podem ser facilmente resolvidos sem a ajuda de processos numéricos para a solução de equações diferenciais ordinárias, já que na maioria das vezes a solução exata não é simples de ser encontrada. Depois do aparecimento do primeiro computador, é que estes métodos começaram a ser usados de maneira sistemática.

A escolha do método numérico para resolver um problema matemático depende de vários fatores, entre eles:

- qual precisão se espera;
- quão longe se deseja conhecer a solução;
- esforço computacional necessário.

A obtenção de uma solução numérica para um problema real por meio da aplicação de métodos numéricos nem sempre fornece valores que se encaixam dentro de limites razoáveis. Os erros irão acontecer, independente do método usado ser adequado e dos cálculos estarem corretos. Temos aqueles erros chamados inerentes porque, em geral, um modelo matemático é uma adaptação da realidade, em que é necessário impor algumas restrições. Temos os erros de truncamento provenientes do método numérico, e ainda, o erro computacional, já que os computadores atuais utilizam apenas um número finito de dígitos para representar os números reais.

O tamanho do passo h deve ser cuidadosamente escolhido. Se t for um número grande, o esforço computacional para chegar até ele será grande e os erros acumulados nesse processo, também. O exemplo que estudamos nesta seção foi forçadamente simplificado para que conseguíssemos analiticamente uma solução exata e pudéssemos calcular os erros em cada método. Observe a Tabela 20 com a coluna dos erros cometidos em cada método. Vale recordar que o erro absoluto é o módulo da diferença entre a solução exata e a solução encontrada pelo método numérico.

n	t_n	Euler	Euler melhorado	Runge-Kutta	Previsão e Correção
0	0	0	0	0	0
10	1	2.611028	0.132698	0.0000003104	0.400795
20	2	3.734121	0.424411	0.0000004422	1.618246
30	3	4.001640	0.751109	0.0000004717	2.948285
40	4	3.806616	1.048375	0.0000004463	4.026006
50	5	3.388184	1.287363	0.0000003947	4.714941

Tabela 20: Erros obtidos em cada método.

É visível o quanto o método de quarto grau de Runge-Kutta é eficaz. Seu erro não se acumula conforme aumenta as iterações, diferente dos outros métodos explorados. Para um problema com poucas iterações talvez não valha a pena perder tanto tempo com o Runge-Kutta, que precisa de cinco cálculos de valores em cada iteração. O método de previsão e correção precisa de apenas dois, sendo um cálculo referente ao método de Adams-Bashforth e o outro de Adams-Moulton. Os métodos de passos múltiplos acabam ganhando força pelo simples fato de que neles é mais fácil estimar o erro em cada passo e assim ajustar facilmente a ordem da fórmula usada e o tamanho do passo h .

A escolha do método para resolver um problema de modelagem envolve um equilíbrio nas questões de precisão e o esforço computacional, isto é, o tempo gasto para executar cada iteração. Um método implícito, como o Adams-Moulton, exige um grande esforço em cada passo, em contrapartida é um método estável e preciso, que permite o uso de um tamanho h maior e, conseqüentemente, um número menor de iterações.

Referências

1. W. E. Boyce; R. C. DiPrima, *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, 8ª edição, LTC Editora, 2002. 25
2. D. F. Griffiths; D. J. Higham, *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations: Initial Value Problems*, Springer, 2010. 22
3. E. L. Lima, *Curso de Análise - Volume 1*, Projeto Euclides, IMPA, 7ª edição, 1976. 5
4. G. Maioli, *Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Ordinárias*, Dissertação (Mestrado Profissional), Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, PGMAT, 2015. 3
5. R. D. Richtmyer; K. W. Morton, *Difference Methods for Initial Value Problems*, Second Edition, John Wiley & Sons, Abingdon, England, 1967. 36
6. B. Seidu, *A Matrix System for Computing the Coefficients of the Adams Bashforth-Moulton Predictor-Corrector formulae*, International Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 6, Number 3, p. 215-220, 2011. 33
7. D. Seperandio; J. T. Mendes; L. H. M. Silva, *Cálculo Numérico - Características matemáticas e computacionais dos métodos numéricos*, Prentice Hall, São Paulo, 2003. 35
8. R. C. Silva, *Avaliação das constantes cinéticas envolvidas na modelagem das concentrações de oxigênio dissolvido em rios com aplicação da Programação Não-Linear*, Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Tecnologia em Saneamento Ambiental), Instituto Federal do Espírito Santo, 2004. 37
9. J. Sotomayor, *Lições de equações diferenciais Ordinárias*, Projeto Euclides, Volume 11, IMPA, 1979. 4
10. H. W. Streeter; E. B. Phelps, *A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River*, U.S. Department of Health, Education & Welfare, Washington, D.C., 1925. 37
11. J. C. Strikwerda, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equation*, Second Edition, Siam, 1989. 36