Mestrado em Modelagem e Otimização - RC/UFG

Modelagem Computacional

Aula 5[2]

Prof. Thiago Alves de Queiroz

[2][Cap. 5] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical Analysis (9th ed). Cengage Learning, 2010.

Métodos de Múltiplos Passos

- Os métodos discutidos anteriormente são chamados de *métodos de passos simples*, uma vez que a aproximação do ponto t_{i+1} ocorre somente a partir do ponto t_i.
- Observe que a aproximação é obtida nos pontos $t_0, t_1, \ldots, t_i$ antes de obter em t_{i+1}.
- Além disso, o erro $|w_j - y(t_j)|$ tende a crescer com j, daí a necessidade de usar mais informações anteriores para aproximar em t_{i+1}.
- Métodos que usam a aproximação em mais de um ponto anterior para aproximar nos próximos pontos são chamados de *métodos de múltiplos passos*.

Métodos de Múltiplos Passos

- **Definição.** Um *método de múltiplos passos com m-passos* para resolver um problema de valor inicial:

$$y' = f(t,y),\; a \leq t \leq b,\; y(a) = \alpha,$$

tem a equação de diferenças para aproximar em t_{i+1} dada por:

$$\begin{aligned} w_{i+1} = {} & a_{m-1}w_i + a_{m-2}w_{i-1} + \cdots + a_0 w_{i+1-m} + \\ & h[b_m f(t_{i+1}, w_{i+1}) + b_{m-1} f(t_i, w_i) + \cdots + b_0 f(t_{i+1-m}, w_{i+1-m})], \end{aligned}$$

para $i = m-1, m, \ldots, N-1$, sendo $h = \frac{b-a}{N}$, as constantes $a_0, a_1, \ldots, a_{m-1}$ e $b_0, b_1, \ldots, b_m$, e os valores iniciais conhecidos:

$$w_0 = \alpha,\; w_1 = \alpha_1,\; w_2 = \alpha_2, \ldots, w_{m-1} = \alpha_{m-1}.$$

- Quando $b_m = 0$, o método é chamado de *explícito*, pois w_{i+1} é obtido explicitamente em termos dos valores anteriores.

Métodos de Múltiplos Passos

- Quando $b_m \neq 0$, o método é chamado de *implícito*, pois w_{i+1} ocorre em ambos os lados, sendo obtido implicitamente.
- As equações, para $i = 3, 4, \ldots, N-1$, definem o *método de Adams-Bashforth de Quarta Ordem* explícito:

$$w_0 = \alpha, \; w_1 = \alpha_1, \; w_2 = \alpha_2, \; w_3 = \alpha_3, \tag{1}$$

$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{24}\left[55f(t_i, w_i) - 59f(t_{i-1}, w_{i-1}) + 37f(t_{i-2}, w_{i-2}) - 9f(t_{i-3}, w_{i-3})\right]. \tag{2}$$

- As equações, para $i = 2, 3, \ldots, N-1$, definem o *método de Adams-Moulton de Quarta Ordem* implícito:

$$w_0 = \alpha, \; w_1 = \alpha_1, \; w_2 = \alpha_2, \tag{3}$$

$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{24}\left[9f(t_{i+1}, w_{i+1}) + 19f(t_i, w_i) - 5f(t_{i-1}, w_{i-1}) + f(t_{i-2}, w_{i-2})\right]. \tag{4}$$

- Os valores inicias em $w_0, w_1, \ldots$ podem ser especificados usando algum método de passo simples, como Runge-Kutta.

Exemplo

- **Exemplo.** Calcule as aproximações em w_4, para $t = 0,8$ e w_5, para $t = 1,0$, usando o método de Adams-Bashforth de Quarta Ordem, sabendo que $w_0 = 0,5$, $w_1 \approx 0,8292933$, $w_2 \approx 1,2140762$ e $w_3 \approx 1,6489220$. O tamanho do passo é $h = 0,2$ e o problema é:
$y' = y - t^2 + 1,\ 0 \leq t \leq 2,\ y(0) = 0,5.$
- **Resposta.** Observando a eq. (1), tem-se:
$w_4 = w_3 + \frac{h}{24}[55f(t_3, w_3) - 59f(t_2, w_2) + 37f(t_1, w_1) - 9f(t_0, w_0)]$,
$w_4 = 1,6489220 + \frac{0,2}{24}[55f(0,6; 1,6489220) - 59f(0,4; 1,2140762) + 37f(0,2; 0,8292933) - 9f(0; 0,5)]$,
$w_4 = 2,1272892.$
- Sabendo que o valor exato é $y(0,8) = 2,1272295$, tem-se o erro absoluto:
$|2,1272295 - 2,1272892| = 0,0000597.$

Exemplo

- Para $t = 1$ e w_5, tem-se:
  $w_5 = w_4 + \frac{h}{24}[55f(t_4, w_4) - 59f(t_3, w_3) + 37f(t_2, w_2) - 9f(t_1, w_1)]$,
  $w_5 = 2,1272892 + \frac{0,2}{24}[55f(0,8; 2,1272892) - 59f(0,6; 1,6489220) + 37f(0,4; 1,2140762) - 9f(0,2; 0,8292933)]$,
  $w_5 = 2,6410533$.
- Sabendo que o valor exato é $y(0,8) = 2,6408591$, tem-se o erro absoluto: $|2,6408591 - 2,6410533| = 0,000194$.
- A derivação de um método de múltiplos passos considera que:

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))dt. \tag{5}$$

- Note que seria preciso saber a solução $y(t)$. Todavia, considera-se um polinômio interpolador $P(t)$ que aproxima $f(t, y(t))$ nos pontos previamente conhecidos $(t_0, w_0), (t_1, w_1), \ldots, (t_i, w_i)$.

Métodos do tipo Adams

- A derivação dos métodos de Adams explícitos seguem o procedimento anterior de usar um polinômio interpolador $P(t)$ que aproxima $f(t, y(t))$, sendo que o *erro de truncamento local* é da forma:

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{y(t_{i+1}) - a_{m-1}y(t_i) - \cdots - a_0 y(t_{i+1-m,})}{h} \tag{6}$$

$$- [b_m f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) + \cdots + b_0 f(t_{i+1-m,y(t_{i+1-m})})], \tag{7}$$

  para cada $i = m-1, m, \ldots, N-1$.

- Para o método de Adams-Bashforth de Quarta Ordem explícito, o erro de truncamento local é:

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{251}{720} h^4 y^{(5)}(\mu_i), \text{ para algum } \mu_i \in (t_{i-3}, t_{i+1}). \tag{8}$$

Métodos do tipo Adams

- A derivação dos métodos de Adams implícitos consideram um polinômio interpolador $P(t)$ que aproxima $f(t_{i+1}, f(t_{i+1}, y(t_{i+1})))$ na integral $\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))dt$.
- Para o método de Adams-Moulton de Quarta Ordem implícito, o erro de truncamento local é:

$$\tau_{i+1}(h) = -\frac{19}{720} h^4 y^{(5)}(\mu_i), \text{ para algum } \mu_i \in (t_{i-2}, t_{i+1}). \quad (9)$$

- É interessante comparar um método explícito de Adams-Bashforth de m-passos com um método implícito de Adams-Moulton de (m-1)-passos.
- Neste caso, ambos envolvem m avaliações de f por passo e possuem no erro de truncamento local o termo $h^m y^{(m+1)}(\mu_i)$.
- Geralmente, o coeficiente no erro de truncamento local envolvendo f é menor nos métodos implícitos do que nos explícitos.

Exemplo

- **Exemplo.** Derive as equações para obter o termo w_{i+1} usando o método implícito e explícito do tipo Adams de Quarta Ordem para o seguinte problema:
  $y' = y - t^2 + 1, \; 0 \leq t \leq 2, \; y(0) = 0,5.$
  Sabendo que a solução exata é $y(t) = (t+1)^2 - 0,5e^t$ e $h = 0,2$, obtenha as aproximações iniciais por ela.
- **Resposta.** Para $i = 3, 4, \ldots, 9$, que substituindo $h = 0,2$, $t_i = 0,2i$ e $f(t, y)$ na equação de diferenças do método de Adams-Bashforth de Quarta Ordem resulta em:
  $w_{i+1} =$
  $\frac{1}{24}[35w_i - 11,8w_{i-1} + 7,4w_{i-2} - 1,8w_{i-3} - 0,192i^2 - 0,192i + 4,736].$
- Para $i = 2, 3, \ldots, 9$ substituindo na equação de diferenças do método de Adams-Moulton de Quarta Ordem chega-se em:
  $w_{i+1} = \frac{1}{22,2}[27,8w_i - w_{i-1} + 0,2w_{i-2} - 0,192i^2 - 0,192i + 4,736].$

Métodos Preditores-Corretores

- Os métodos implícitos possuem uma fraqueza: converter a equação de diferenças numa forma algébrica com a representação explícita de w_{i+1}.
- Uma alternativa seria utilizar o método de Newton para aproximar w_{i+1} e, assim, considerar os métodos implícitos.
- Por isso, os métodos implícitos acabam sendo usados para melhorar as aproximações obtidas a partir dos métodos explícitos.
- A combinação de um método explícito para aproximar e o método implícito para melhorar a aproximação resulta no *método Preditor-Corretor*.
- No caso dos métodos de Quarta Ordem, usa-se um método de passo simples, como Runge-Kutta, para obter os valores iniciais w_0, w_1, w_2 e w_4.

Métodos Preditores-Corretores

- O próximo passo é calcular a aproximação w_{4p} usando o método explícito de Adams-Bashforth como preditor:

$$w_{4p} = w_3 + \frac{h}{24}[55f(t_3, w_3) - 59f(t_2, w_2) + 37f(t_1, w_1) - 9f(t_0, w_0)]. \tag{10}$$

- Essa aproximação é então melhorada ao considerar w_{4p} no lado direito do método implícito de Adams-Moulton (corretor):

$$w_4 = w_3 + \frac{h}{24}[9f(t_4, w_{4p}) + 19f(t_3, w_3) - 5f(t_2, w_2) + f(t_1, w_1)]. \tag{11}$$

- Observe que é preciso avaliar apenas $f(t_4, w_{4p})$ no corretor, uma vez que f já foi avaliada nos outros pontos no preditor.
- Uma forma de melhorar a precisão da aproximação é utilizar um tamanho de passo menor do que considerar um corretor de ordem mais alta.

Método Preditor-Corretor de Adams de Quarta Ordem

INPUT endpoints a, b; integer N; initial condition α.

OUTPUT approximation w to y at the $(N+1)$ values of t.

Step 1 Set $h = (b-a)/N$;
$t_0 = a$;
$w_0 = \alpha$;
OUTPUT (t_0, w_0).

Step 2 For $i = 1, 2, 3$, do Steps 3–5.
(*Compute starting values using Runge-Kutta method.*)

Step 3 Set $K_1 = hf(t_{i-1}, w_{i-1})$;
$K_2 = hf(t_{i-1} + h/2, w_{i-1} + K_1/2)$;
$K_3 = hf(t_{i-1} + h/2, w_{i-1} + K_2/2)$;
$K_4 = hf(t_{i-1} + h, w_{i-1} + K_3)$.

Step 4 Set $w_i = w_{i-1} + (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)/6$;
$t_i = a + ih$.

Step 5 OUTPUT (t_i, w_i).

Método Preditor-Corretor de Adams de Quarta Ordem

Step 6 For $i = 4, \ldots, N$ do Steps 7–10.

Step 7 Set $t = a + ih$;

$$w = w_3 + h[55 f(t_3, w_3) - 59 f(t_2, w_2) + 37 f(t_1, w_1) - 9 f(t_0, w_0)]/24; \qquad (\textit{Predict} \quad w_i.)$$

$$w = w_3 + h[9 f(t, w) + 19 f(t_3, w_3) - 5 f(t_2, w_2) + f(t_1, w_1)]/24. \qquad (\textit{Correct} \quad w_i.)$$

Step 8 OUTPUT (t, w).

Step 9 For $j = 0, 1, 2$

set $t_j = t_{j+1}$; *(Prepare for next iteration.)*

$w_j = w_{j+1}$.

Step 10 Set $t_3 = t$;

$w_3 = w$.

Step 11 STOP.

Exemplo

- **Exemplo.** Calcule a aproximação w_4, para $t = 0,8$, usando o método de Preditor-Corretor de Adams de Quarta Ordem, sabendo que $w_0 = 0,5$, $w_1 \approx 0,8292933$, $w_2 \approx 1,2140762$ e $w_3 \approx 1,6489220$. O tamanho do passo é $h = 0,2$ e o problema é: $y' = y - t^2 + 1,\ 0 \leq t \leq 2,\ y(0) = 0,5.$
- **Resposta.** Primeiro, calcula-se o preditor pelo método de Adam-Bashforth:
  $w_{4p} = w_3 + \frac{h}{24}[55f(t_3, w_3) - 59f(t_2, w_2) + 37f(t_1, w_1) - 9f(t_0, w_0)],$
  $w_{4p} = 1,6489220 + \frac{0,2}{24}[55f(0,6; 1,6489220) -$
  $59f(0,4; 1,2140762) + 37f(0,2; 0,8292933) - 9f(0; 0,5)],$
  $w_{4p} = 2,1272892.$
- Agora, considera-se o valor de w_{4p} no corretor pelo método de Adams-Moulton:
  $w_4 = w_3 + \frac{h}{24}[9f(t_4, w_{4p}) + 19f(t_3, w_3) - 5f(t_2, w_2) + f(t_1, w_1)],$
  $w_4 = 1,6489220 + \frac{0,2}{24}[9f(0,8; 2,1272892) +$
  $19f(0,6; 1,6489220) - 5f(0,4; 1,2140762) + f(0,2; 0,8292933)],$
  $w_4 = 2,1272056.$

Sistemas de Equações Diferenciais

- Um sistema de m-ésima ordem de problemas de valor inicial tem a forma:

$$\begin{aligned}
\frac{du_1}{dt} &= f_1(t, u_1, u_2, \ldots, u_m),\\
\frac{du_2}{dt} &= f_2(t, u_1, u_2, \ldots, u_m),\\
&\vdots\\
\frac{du_m}{dt} &= f_m(t, u_1, u_2, \ldots, u_m),
\end{aligned}$$

para $a \leq t \leq b$, com as condições iniciais:

$$u_1(a) = \alpha_1,\; u_2(a) = \alpha_2,\; \ldots,\; u_m(a) = \alpha_m.$$

Sistemas de Equações Diferenciais

- O objetivo é encontrar m funções $u_1(t), u_2(t), \ldots, u_m(t)$ que satisfaz o sistema de equações diferenciais.
- **Definição.** A função $f(t, y_1, \ldots, y_m)$ definida no conjunto:

$$D = \{(t, u_1, \ldots, u_m) | a \leq t \leq b \text{ e } -\infty < u_i < \infty, \text{ para cada } i = 1, 2, \ldots, m\},$$

satisfaz a condição de Lipschitz em D nas variáveis $u_1, u_2, \ldots, u_m$ se existe uma constante $L > 0$ com:

$$|f(t, u_1, \ldots, u_m) - f(t, z_1, \ldots, z_m)| \leq L \sum_{j=1}^{m} |u_j - z_j|, \qquad (12)$$

para todo $(t, u_1, \ldots, u_m)$ e $(t, z_1, \ldots, z_m)$ em D.

Sistemas de Equações Diferenciais

- Note que o Teorema do Valor Médio pode ser usado: se f e suas derivadas parciais de primeira ordem são contínuas em D e:
  $|\frac{\partial f(t,u_1,\ldots,u_m)}{\partial u_i}| \leq L$,
  para cada $i = 1, 2, \ldots, m$ e todos $(t, u_1, \ldots, u_m) \in D$, então f satisfaz a condição de Lipschitz em D com constante de Lipschitz L.
- **Teorema.** Seja $f_i(t, u_1, \ldots, u_m)$, para cada $i = 1, 2, \ldots, m$, contínua e satisfazendo a condição de Lipschitz em:
  $D = \{(t, u_1, \ldots, u_m) | a \leq t \leq b \text{ e } -\infty < u_i < \infty, \text{ para cada } i = 1, 2, \ldots, m\}$.
  Então, o sistema de equações diferenciais anterior sujeito as condições iniciais dadas tem solução única $u_1(t), \ldots, u_m(t)$, para $a \leq t \leq b$.

Sistemas de Equações Diferenciais

- Adiante será feita extensão do método de Runge-Kutta da Quarta Ordem para resolver sistemas de equações diferenciais.
- Seja um inteiro $N > 0$ e o passo $h = \frac{b-a}{N}$. Assim, o intervalo $[a, b]$ é particionado em N subintervalos com os pontos $t_j = a + jh$, para cada $j = 0, 1, \ldots, N$.
- Usa-se a notação w_{ij}, para cada $j = 0, 1, \ldots, N$ e $i = 1, 2, \ldots, m$ para denotar a aproximação a $u_i(t_j)$.

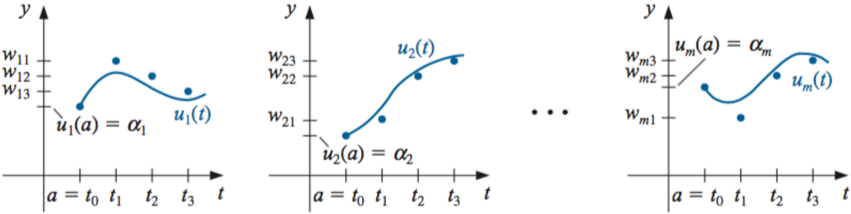

Figura: Aproximação por Runke-Kutta de cada uma das m equações diferenciais.

Sistemas de Equações Diferenciais

- Sejam as condições iniciais $w_{1,0} = \alpha_1, w_{2,0} = \alpha_2, \ldots, w_{m,0} = \alpha_m$ e que os valores $w_{1,j}, w_{2,j}, \ldots, w_{m,j}$ foram computados. Obtém-se $w_{1,j+1}, w_{2,j+1}, \ldots, w_{m,j+1}$:

$$
\begin{aligned}
k_{1,i} &= hf_i(t_j, w_{1,j}, w_{2,j}, \ldots, w_{m,j}),\\
k_{2,i} &= hf_i\left(t_j + \frac{h}{2}, w_{1,j} + \frac{1}{2}k_{1,1}, w_{2,j} + \frac{1}{2}k_{1,2}, \ldots, w_{m,j} + \frac{1}{2}k_{1,m}\right),\\
k_{3,i} &= hf_i\left(t_j + \frac{h}{2}, w_{1,j} + \frac{1}{2}k_{2,1}, w_{2,j} + \frac{1}{2}k_{2,2}, \ldots, w_{m,j} + \frac{1}{2}k_{2,m}\right),\\
k_{4,i} &= hf_i\left(t_j + h, w_{1,j} + k_{3,1}, w_{2,j} + k_{3,2}, \ldots, w_{m,j} + k_{3,m}\right),\\
w_{i,j+1} &= w_{i,j} + \frac{1}{6}(k_{1,i} + 2k_{2,i} + 2k_{3,i} + k_{4,i}).
\end{aligned}
$$

  para cada $i = 1, 2, \ldots, m$.
- Observe que todos os valores $k_{1,1}, k_{1,2}, \ldots, k_{1,m}$ devem ser calculados antes de prosseguir para $k_{2,i}$ (e assim por diante).

Método de Runge-Kutta para Sistemas de Equações Diferenciais

INPUT endpoints a, b; number of equations m; integer N; initial conditions $\alpha_1, \ldots, \alpha_m$.

OUTPUT approximations w_j to $u_j(t)$ at the $(N+1)$ values of t.

Step 1 Set $h = (b-a)/N$;
$t = a$.

Step 2 For $j = 1, 2, \ldots, m$ set $w_j = \alpha_j$.

Step 3 OUTPUT $(t, w_1, w_2, \ldots, w_m)$.

Step 4 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do steps 5–11.

Step 5 For $j = 1, 2, \ldots, m$ set
$k_{1,j} = hf_j(t, w_1, w_2, \ldots, w_m)$.

Step 6 For $j = 1, 2, \ldots, m$ set

$$k_{2,j} = hf_j\left(t + \frac{h}{2}, w_1 + \frac{1}{2}k_{1,1}, w_2 + \frac{1}{2}k_{1,2}, \ldots, w_m + \frac{1}{2}k_{1,m}\right).$$

Método de Runge-Kutta para Sistemas de Equações Diferenciais

Step 7 For $j = 1, 2, \ldots, m$ set

$$k_{3,j} = hf_j\left(t + \frac{h}{2}, w_1 + \frac{1}{2}k_{2,1}, w_2 + \frac{1}{2}k_{2,2}, \ldots, w_m + \frac{1}{2}k_{2,m}\right).$$

Step 8 For $j = 1, 2, \ldots, m$ set

$$k_{4,j} = hf_j(t + h, w_1 + k_{3,1}, w_2 + k_{3,2}, \ldots, w_m + k_{3,m}).$$

Step 9 For $j = 1, 2, \ldots, m$ set

$$w_j = w_j + (k_{1,j} + 2k_{2,j} + 2k_{3,j} + k_{4,j})/6.$$

Step 10 Set $t = a + ih$.

Step 11 OUTPUT $(t, w_1, w_2, \ldots, w_m)$.

Step 12 STOP.

Exemplo

- **Exemplo.** Resolva o sistema de equações diferenciais ordinárias abaixo, sabendo que $I_1(0) = 0$, $I_2(0) = 0$ e $h = 0,1$, para obter $w_{1,1}$ e $w_{2,1}$.

$$\begin{aligned} I_1' &= f_1(t, I_1, I_2) = -4I_1 + 3I_2 + 6, \\ I_2' &= f_2(t, I_1, I_2) = -2,4I_1 + 1,6I_2 + 3,6. \end{aligned}$$

- **Resposta.** Aplicando o método de Runge-Kutta de Quarta Ordem, tem-se:
  $w_{1,0} = I_1(0) = 0$ e $w_{2,0} = I_2(0) = 0$,
  $k_{1,1} = hf_1(t_0, w_{1,0}, w_{2,0}) = 0,6$,
  $k_{1,2} = hf_2(t_0, w_{1,0}, w_{2,0}) = 0,36$,
  $k_{2,1} = hf_1(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{1,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{1,2}) = 0,534$,
  $k_{2,2} = hf_2(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{1,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{1,2}) = 0,3168$,

Exemplo

- Obtendo os demais valores:
  $k_{3,1} = hf_1(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{2,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{2,2}) = 0,54072,$
  $k_{3,2} = hf_2(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{2,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{2,2}) = 0,321264,$
  $k_{4,1} = hf_1(t_0 + h, w_{1,0} + k_{3,1}, w_{2,0} + k_{3,2}) = 0,4800912,$
  $k_{4,2} = hf_2(t_0 + h, w_{1,0} + k_{3,1}, w_{2,0} + k_{3,2}) = 0,28162944,$
- Resultando em:
  $w_{1,1} = w_{1,0} + \frac{1}{6}(k_{1,1} + 2k_{2,1} + 2k_{3,1} + k_{4,1}) = 0,5382552,$
  $w_{2,1} = w_{2,0} + \frac{1}{6}(k_{1,2} + 2k_{2,2} + 2k_{3,2} + k_{4,2}) = 0,3196263.$
- Sendo a solução exata $I_1(t) = -3,375e^{-2t} + 1,875e^{-0,4t} + 1,5$ e $I_2(t) = -2,25e^{-2t} + 2,25e^{-0,4t}$, tem-se o erro absoluto:
  $erro_1 = 0,00008285,$
  $erro_2 = 0,00005803.$

Equações Diferencias de Ordem Superior

- Muitas situações reais envolvem problemas de valor inicial cujas equações têm ordem maior do que um.
- Não é preciso novas técnicas. Basta fazer uma redução de ordem da equação diferencial em um sistema de equações de primeira ordem.
- Um problema de valor inicial de *m*-ésima ordem:

$$y^{(m)}(t) = f(t, y, y', \ldots, y^{(m-1)}), \ a \leq t \leq b, \tag{13}$$

  com condições iniciais $y(a) = \alpha_1, y'(a) = \alpha_2, \ldots, y^{(m-1)}(a) = \alpha_m$ pode ser convertido em um sistema de equações diferenciais de primeira ordem.
- Seja $u_1(t) = y(t), u_2(t) = y'(t), \ldots,$ e $u_m(t) = y^{(m-1)}(t)$.

Equações Diferencias de Ordem Superior

- O seguinte sistema de equações de primeira ordem é obtido:
$\frac{du_1}{dt} = \frac{dy}{dt} = u_2, \ \frac{du_2}{dt} = \frac{dy'}{dt} = u_3, \ \cdots, \ \frac{du_{m-1}}{dt} = \frac{dy^{(m-2)}}{dt} = u_m,$
$\frac{du_m}{dt} = \frac{dy^{(m-1)}}{dt} = y^{(m)} = f(t, y, y', \ldots, y^{(m-1)}) = f(t, u_1, u_2, \ldots, u_m),$
- Com as condições iniciais:
$u_1(a) = y(a) = \alpha_1, \ u_2(a) = y'(a) = \alpha_2, \ \ldots, \ u_m(a) = y^{(m-1)}(a) = \alpha_m$.
- **Exemplo.** Transforme o problema de valor inicial de segunda ordem:
$y'' - 2y' + 2y = e^{2t}\sin(t)$, para $0 \leq t \leq 1$, com $y(0) = -0,4$ e $y'(0) = -0,6$,
em um sistema de problemas de valor inicial de primeira ordem. Use o método de Runge-Kutta de quarta ordem com $h = 0,1$ para aproximar em $t = 0,1$.

Exemplo

- **Resposta.** Seja $u_1(t) = y(t)$ e $u_2(t) = y'(t)$. Assim, tem-se o sistema:
  $u_1'(t) = u_2(t)$,
  $u_2'(t) = e^{2t}\sin(t) - 2u_1(t) + 2u_2(t)$,
  com as condições iniciais $u_1(0) = -0,4$ e $u_2(0) = -0,6$.
- As condições iniciais fornecem: $w_{1,0} = -0,4$ e $w_{2,0} = -0,6$. Segue que:
  $k_{1,1} = hf_1(t_0, w_{1,0}, w_{2,0}) = hw_{2,0} = -0,06$,
  $k_{1,2} = hf_2(t_0, w_{1,0}, w_{2,0}) = h[e^{2t_0}\sin(t_0) - 2w_{1,0} + 2w_{2,0}] = -0,04$,
  $k_{2,1} = hf_1(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{1,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{1,2}) = -0,062$,
  $k_{2,2} = hf_2(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{1,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{1,2}) = -0,03247644757$,

Exemplo

- Continuando...
$k_{3,1} = hf_1(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{2,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{2,2}) = -0,06162832238,$
$k_{3,2} = hf_2(t_0 + \frac{1}{2}h, w_{1,0} + \frac{1}{2}k_{2,1}, w_{2,0} + \frac{1}{2}k_{2,2}) = -0,03152409237,$
$k_{4,1} = hf_1(t_0 + h, w_{1,0} + k_{3,1}, w_{2,0} + k_{3,2}) = -0,06315240924,$
$k_{4,2} = hf_2(t_0 + h, w_{1,0} + k_{3,1}, w_{2,0} + k_{3,2}) = -0,02178637298,$
- Resultando em:
$w_{1,1} = w_{1,0} + \frac{1}{6}(k_{1,1} + 2k_{2,1} + 2k_{3,1} + k_{4,1}) = -0,4617333423,$
$w_{2,1} = w_{1,0} + \frac{1}{6}(k_{1,2} + 2k_{2,2} + 2k_{3,2} + k_{4,2}) = -0,6316312421.$
- Sendo a solução exata $u_1(t) = 0,2e^{2t}(\sin(t) - 2\cos(t))$ e $u_2(t) = 0,2e^{2t}(4\sin(t) - 3\cos(t))$, tem-se o erro absoluto:
$erro_1 = 0,00000037,$
$erro_2 = 0,000000775.$

Equações Diferenciais Rígidas

- Os métodos empregados anteriormente possuem um termo de erro que envolve uma derivada de alta ordem da solução da equação.
- Nos casos em que essa derivada pode ser limitada superiormente, torna-se possível predizer um limite para o erro.
- Mesmo se a derivada cresce conforme o tamanho do passo cresce (e o valor da solução também), o erro pode ser controlado.
- Por outro lado, quando a magnitude da derivada cresce, mas o valor da solução não, o erro pode ser crescer demasiadamente e dominar os cálculos.
- Problemas de valor inicial em que o erro domina os cálculos são denominados de *rígidos*, sendo comuns no estudo de sistemas mecânicos, químicos e elétricos.

Equações Diferenciais Rígidas

- Equações diferenciais rígidas são caracterizadas como aquelas cuja solução possui um termo e^{-ct}, sendo c uma constante positiva grande.
- Como a n-ésima derivada deste termo tem magnitude $c^n e^{-ct}$, a derivada não decresce tão rapidamente.
- Na verdade, a derivada relacionada ao termo do erro cresce (rapidamente) a medida que t cresce.
- Por exemplo, ao aplicar o método de Euler, Runge-Kutta de quarta Ordem e Preditor-Corretor de Adams em: $y' = -30y, \ 0 \leq t \leq 1,5, \ y(0) = \frac{1}{3}$, com $h = 0,1$ e querendo a solução em $t = 1,5$, chega-se a:
  - Solução exata: $9,54173 \times 10^{-21}$;
  - Método de Euler: $-1,09225 \times 10^{4}$;
  - Método de Runge-Kutta: $3,95730 \times 10^{1}$;
  - Método Preditor-Corretor: $8,03840 \times 10^{5}$.

Equações Diferenciais Rígidas

- Um método que é “estável” e pode ser aplicado em equações rígidas é o *Trapezoidal implícito*:

$$w_0 = \alpha,$$
$$w_{j+1} = w_j + \frac{h}{2}\left[f(t_{j+1}, w_{j+1}) + f(t_j, w_j)\right], \; 0 \leq j \leq N-1.$$

- O método Trapezoidal implícito não fornece aproximações precisas para passos h grandes.
- A obtenção do termo w_{j+1} pode requerer a resolução de uma equação/sistema não linear, tal que o método de Newton é geralmente usado.
- Assim, tendo computado t_j, t_{j+1} e w_j, precisa-se obter w_{j+1} que é solução de:

$$F(w) = w - w_j - \frac{h}{2}[f(t_{j+1}, w) + f(t_j, w_j)] = 0. \tag{14}$$

Equações Diferenciais Rígidas

- Para aproximar a eq. (14), seleciona-se $w_{j+1}^{(0)} = w_j$ e gera-se $w_{j+1}^{(k)}$ aplicando o método de Newton:

$$w_{j+1}^{(k)} = w_{j+1}^{(k-1)} - \frac{w_{j+1}^{(k-1)} - w_j - \frac{h}{2}[f(t_j, w_j) + f(t_{j+1}, w_{j+1}^{(k-1)})]}{1 - \frac{h}{2} f_y(t_{j+1}, w_{j+1}^{(k-1)})} \quad (15)$$

  até que $|w_{j+1}^{(k)} - w_{j+1}^{(k-1)}|$ seja suficientemente pequeno.
- Geralmente três ou quatro iterações do método de Newton são suficientes para obter uma boa aproximação.
- O método da Secante pode ser utilizado como alternativa ao método de Newton, sendo preciso duas aproximações iniciais distintas para w_{j+1}.

Método Trapezoidal Implícito com Iteração de Newton

INPUT endpoints a, b; integer N; initial condition α; tolerance TOL; maximum number of iterations M at any one step.

OUTPUT approximation w to y at the $(N+1)$ values of t or a message of failure.

Step 1 Set $h = (b-a)/N$;
$t = a$;
$w = \alpha$;
OUTPUT (t, w).

Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do Steps 3–7.

Step 3 Set $k_1 = w + \frac{h}{2} f(t, w)$;
$w_0 = k_1$;
$j = 1$;
$FLAG = 0$.

Método Trapezoidal Implícito com Iteração de Newton

Step 4 While $FLAG = 0$ do Steps 5–6.

Step 5 Set $w = w_0 - \dfrac{w_0 - \frac{h}{2} f(t+h, w_0) - k_1}{1 - \frac{h}{2} f_y(t+h, w_0)}$.

Step 6 If $|w - w_0| < TOL$ then set $FLAG = 1$
else set $j = j + 1$;
$w_0 = w$;
if $j > M$ then
OUTPUT ('The maximum number of iterations exceeded');
STOP.

Step 7 Set $t = a + ih$;
OUTPUT (t, w).

Step 8 STOP.

Exemplo

- **Exemplo.** O problema de valor inicial rígido adiante tem solução $y(t) = t - e^{-5t}$. Resolva com o método Trapezoidal implícito com iteração de Newton e o método de Runge-Kutta de quarta ordem para $h = 0,25$ e $h = 0,2$.
  $y' = 5e^{5t}(y - t)^2 + 1$, para $0 \leq t \leq 1$, com $y(0) = -1$.
- **Resposta.** Observe a tabela com os resultados numéricos:

	Runge–Kutta Method		Trapezoidal Method	
	$h = 0.2$		$h = 0.2$	
t_i	w_i	$\lvert y(t_i) - w_i \rvert$	w_i	$\lvert y(t_i) - w_i \rvert$
0.0	−1.0000000	0	−1.0000000	0
0.2	−0.1488521	1.9027×10^{-2}	−0.1414969	2.6383×10^{-2}
0.4	0.2684884	3.8237×10^{-3}	0.2748614	1.0197×10^{-2}
0.6	0.5519927	1.7798×10^{-3}	0.5539828	3.7700×10^{-3}
0.8	0.7822857	6.0131×10^{-4}	0.7830720	1.3876×10^{-3}
1.0	0.9934905	2.2845×10^{-4}	0.9937726	5.1050×10^{-4}
	$h = 0.25$		$h = 0.25$	
t_i	w_i	$\lvert y(t_i) - w_i \rvert$	w_i	$\lvert y(t_i) - w_i \rvert$
0.0	−1.0000000	0	−1.0000000	0
0.25	0.4014315	4.37936×10^{-1}	0.0054557	4.1961×10^{-2}
0.5	3.4374753	3.01956×10^{0}	0.4267572	8.8422×10^{-3}
0.75	1.44639×10^{23}	1.44639×10^{23}	0.7291528	2.6706×10^{-3}
1.0	Overflow		0.9940199	7.5790×10^{-4}