Capítulo 7

Métodos preditores-corretores

Ao se propor um método de passo múltiplo linear

$$y_{k+n} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j} \quad = \quad h \sum_{j=0}^{n} \beta_j f_{k+j}, \tag{7.0.1}$$

onde $f_{k+j} = f(t_{k+j}, y_{k+j})$, têm-se como opções escolher $\beta_n = 0$, para um método explícito, ou $\beta_n \neq 0$ para um método implícito. No primeiro caso, têm-se $2n$ coeficientes a se determinar ("graus de liberdade"), α_j e β_j, $j = 1, 2, \ldots, n-1$, e no segundo caso tem-se, além destes, β_n a se escolher perfazendo um total de $2n+1$ coeficientes a se determinar. Imposições sobre os coeficientes (**??**), C_j, $j = 0, 1, \ldots, p$, constituem *vínculos* com os quais controla-se a ordem objetivada.

Com tal diferença no número de graus de liberdade, não é de se surpreender que métodos explícitos e implícitos com mesmo número de passos (e, portanto, com mesma demanda por armazenamento de informação em memória) possam ter propriedades como ordem e intervalo de estabilidade absoluta diferentes. As tabelas 7.1 e 7.2 mostram ordens, intervalos de estabilidade absoluta e o coeficiente principal de erro para os métodos explícitos de Adams-Bashforth e implícitos de Adams-Moulton, respectivamente.

número de passos	1	2	3	4
ordem (p)	1	2	3	4
coeficiente C_{p+1}	$1/2$	$5/12$	$3/8$	$251/720$
estabilidade absoluta	$(-2, 0)$	$(-1, 0)$	$(-6/11, 0)$	$(-3/10, 0)$

Tabela 7.1: Propriedades de alguns métodos de Adams-Bashforth (explícitos).

número de passos	1	2	3	4
ordem p	2	3	4	5
coeficiente C_{p+1}	$-1/12$	$-1/24$	$-19/720$	$-3/160$
estabilidade absoluta	$(-\infty, 0)$	$(-6, 0)$	$(-3, 0)$	$(-90/49, 0)$

Tabela 7.2: Propriedades de alguns métodos de Adams-Moulton (implícitos).

Comparando-se as tabelas 7.1 e 7.2, percebem-se que são muitas as vantagens dos métodos implícitos sobre os métodos explícitos (de mesmo número de passos). Dentre elas, podem ser destacadas menores valores absolutos para os coeficientes principais de erro C_{p+1} e maiores amplitudes dos intervalos de estabilidade absoluta. Claro, como principal desvantagem, pode-se mencionar o fato dos métodos implícitos demandarem a resolução de uma equação algébrica em todo o passo de integração no tempo para se determinar y_{k+n} (e.g. via método da Dicotomia, do Ponto-fixo, de Newton, etc.).

Considere o método de passo múltiplo linear implícito

$$y_{k+n} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}) + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f_{k+j}. \tag{7.0.2}$$

Ao se calcular y_{k+n} em (7.0.2) usando o Método do Ponto Fixo, tem-se

$$y_{k+n}^{[s+1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[s]}) + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f_{k+j} \quad s = 0, 1, 2, \ldots, \tag{7.0.3}$$

onde $y_{k+n}^{[0]}$ é uma aproximação inicial de y_{k+n} e s é o índice de iteração. Uma condição suficiente para a convergência das iterações em (7.0.3) para y_{k+n} é que se tenha o passo de integração h

$$h < \frac{1}{L|\beta_n|}, \tag{7.0.4}$$

onde L é a constante de Lipschitz da função f do Problema de Cauchy em estudo.

A questão que deve ser considerada neste ponto é: *"É possível beneficiar-se das boas propriedades de ambos os tipos de métodos simultaneamente?"*. Como é visto adiante, a resposta é afirmativa.

7.0.1 Exercícios

Exercício 7.1. *Mostre que se* $h < \dfrac{1}{L|\beta_n|}$ *então o processo iterativo (7.0.3) converge.*

Há duas opções para se solucionar as iterações advindas da aplicação do Método do Ponto Fixo ao esquema implícito (7.0.2):

1ª iterar até que $|y_{k+n}^{[s+1]} - y_{k+n}^{[s]}| < \epsilon$, onde $\epsilon > 0$ é uma precisão pré-fixada

2ª iterar m vezes, com m fixo (isto é, $s = 0, 1, 2, \ldots, m-1$).

Para diminuir o número total de iterações na primeira opção, é necessário utilizar boas aproximações iniciais $y_{k+n}^{[0]}$. Observe que, dependendo de $y_{k+n}^{[0]}$ e ϵ, muitas avaliações (cálculos) da função f podem ser necessárias.

Uma forma conveniente de se obter $y_{k+n}^{[0]}$ é usar um método de passo múltiplo linear explícito de ordem p^*, denominado *preditor*, e depois calcular $y_{k+n}^{[1]}$ através de um método de passo múltiplo linear implícito de ordem p, denominado *corretor*. Pode-se denotar a estratégia da seguinte maneira [16]:

P : uma aplicação do método explícito preditor, o qual gera uma boa aproximação para $y_{k+n}^{[0]}$;

E : um cálculo de f (*evaluation*);

C : uma aplicação do método implícito corretor, o qual gera a solução numérica para y_{k+n} via Método do Ponto Fixo.

Em geral, a forma de aplicação do Método Preditor-Corretor é descrita como

$$P(EC)^m \tag{7.0.5}$$

ou

$$P(EC)^m E, \tag{7.0.6}$$

sendo

$$\begin{aligned} P &= y_{k+n}^{[0]}, \\ E &= f\left(t_{k+n}, y_{k+n}^{[0]}\right), \\ C &= y_{k+n}^{[1]}, \\ E &= f\left(t_{k+n}, y_{k+n}^{[1]}\right), \end{aligned}$$

e m o número fixo de vezes que y_{k+n} $\left(y_{k+n}^{[m]}\right)$ será calculado. O modo (7.0.6) difere do modo (7.0.5) por uma avaliação a mais da função f. Obviamente, optar pelo modo (7.0.5) ou (7.0.6) afeta o próximo passo de integração.

O corretor, para m geral, é dado por

$$y_{k+n}^{[s+1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[m]} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[s]}) + h\sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[m-t]}) \quad t = 0, 1. \tag{7.0.7}$$

Para $s = 0$ em (7.0.7), tem-se que

$$y_{k+n}^{[1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[m]} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[0]}) + h\sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[m-t]}),$$

onde se $t = 1$ tem-se $P(EC)^m$ e se $t = 0$ tem-se $P(EC)^m E$.

Para $s = 1$ em (7.0.7), tem-se que

$$y_{k+n}^{[2]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[m]} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[1]}) + h\sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[m-t]}),$$

onde se $t = 1$ tem-se $P(EC)^m$ e se $t = 0$ tem-se $P(EC)^m E$.

Definição 7.1. *Sejam os métodos de passo múltiplo lineares usados como preditor e corretor, respectivamente, definidos pelos polinômios característicos*

$$\rho^*(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^* r^j, \;\; \alpha_n^* = 1, \;\; \sigma^*(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j^* r^j$$

e

$$\rho(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j r^j, \;\; \alpha_n = 1, \;\; \sigma(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j r^j.$$

Os modos $P(EC)^m E$ e $P(EC)^m$ são definidos como:

$P(EC)^m E$:

$$
\begin{aligned}
y_{k+n}^{[0]} \quad & + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* y_{k+j}^{[m]} = h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* f_{k+j}^{[m]} \quad \textit{(prediz)} \\
Para \quad & s = 0, 1, \ldots, m-1 \\
& f_{k+n}^{[s]} = f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[s]}) \quad \textit{(avalia)} \\
& y_{k+n}^{[s+1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[m]} = h\beta_n f_{k+n}^{[s]} + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f_{k+j}^{[m]} \quad \textit{(corrige)} \\
f_{k+n}^{[m]} \quad & = f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[m]}) \quad \textit{(avalia)};
\end{aligned}
$$

$P(EC)^m$:

$$
\begin{aligned}
y_{k+n}^{[0]} \quad & + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* y_{k+j}^{[m]} = h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* f_{k+j}^{[m-1]} \quad \textit{(prediz)} \\
Para \quad & s = 0, 1, \ldots, m-1 \\
& f_{k+n}^{[s]} = f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[s]}) \quad \textit{(avalia)} \\
& y_{k+n}^{[s+1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[m]} = h\beta_n f_{k+n}^{[s]} + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f_{k+j}^{[m-1]} \quad \textit{(corrige)}.
\end{aligned}
$$

É interessante observar que à medida que o número total de iterações m cresce tendendo ao infinito as características do método preditor-corretor aproximam-se cada vez mais àquelas do método usado como corretor (e.g. ordem de consistência, intervalo de estabilidade absoluta e coeficiente principal de erro). Iterar até a convergência das iterações não é, a princípio, a primeira estratégia de implementação que se usa pois nunca se sabe, *a priori*, o custo computacional envolvido por passo de integração no tempo. Prefere-se, ao invés, fixar-se um valor para m (tipicamente $m = 2$) e se resolver o problema a um custo computacional conhecido.

7.1 Erro de discretização local

Sejam P o método preditor e C o método corretor, definidos por

$$P: \quad y_{k+n}^{[s]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* y_{k+j}^{[m]} = h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* f_{k+j}^{[m-t]}, \tag{7.1.8}$$

$$C: \quad y_{k+n}^{[s+1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[m]} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[s]}) + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f_{k+j}^{[m-t]}, \tag{7.1.9}$$

onde $s = 0, 1, \cdots, m-1$, $t = 0 \Rightarrow P(EC)^m E$ e $t = 1 \Rightarrow P(EC)^m$.

O erro local de discretização principal dos métodos preditor e corretor é dado, respectivamente, por

$$P: \quad y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s]} = C_{p^*+1}^* h^{p^*+1} y^{(p^*+1)}(t_k) + O(h^{p^*+2}) = h\alpha^*, \tag{7.1.10}$$

$$C: \quad y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s+1]} = C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}) = h\alpha. \tag{7.1.11}$$

O produto do erro local de discretização pelo passo de integração h (suficientemente pequeno) para um método de passo múltiplo linear é dado por

$$\begin{aligned} h\alpha &= y(t_{k+n}) + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y(t_{k+j}) - h\beta_n f(t_{k+n}, y(t_{k+n})) + \\ &- h\sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f(t_{k+j}, y(t_{k+j})). \end{aligned} \tag{7.1.12}$$

Como até $j = n$ não se cometeu qualquer erro (porquê?), a subtração (7.1.12) - (7.1.9) resulta em

$$h\alpha = y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s+1]} - h\beta_n \left[f\left(t_{k+n}, y\left(t_{k+n}\right)\right) - f\left(t_{k+n}, y_{k+n}^{[s]}\right)\right]. \tag{7.1.13}$$

Aplicando o Teorema do Valor Médio a (7.1.13), chega-se a

$$\begin{aligned} h\alpha &= y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s+1]} - h\beta_n \frac{\partial f}{\partial y}\left(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}\right)\left(y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s]}\right), \\ y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s+1]} &= h\beta_n \frac{\partial f}{\partial y}\left(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}\right)\left(y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[s]}\right) + h\alpha, \end{aligned} \tag{7.1.14}$$

onde $\eta_{k+n,s}$ pertence ao intervalo de extremos $y_{k+n}^{[s]}$ e $y(t_{k+n})$.

(a) Caso $p^* \geq p$:

Substituindo (7.1.10) e (7.1.11) em (7.1.14) e considerando $s = 0$, tem-se

$$\begin{aligned} y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} = h\beta_n \frac{\partial f}{\partial y}\left(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}\right)\left[C_{p^*+1}^* h^{p^*+1} y^{(p^*+1)}(t_k) + O(h^{p^*+2})\right] \\ + C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}), \end{aligned}$$

onde

$$y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} = C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}). \tag{7.1.15}$$

Substituindo-se (7.1.11) e (7.1.15) em (7.1.14) e tomando-se sucessivamente $s = 1, 2, 3, \ldots, m-1$, conclui-se que

$$y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[m]} = C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}).$$

Logo, o erro de discretização local principal do método preditor-corretor é o mesmo do corretor quando $p^* \geq p \ \forall m \geq 1$.

(b) Caso $p^* = p - 1$:

Substituindo-se (7.1.10) e (7.1.11) em (7.1.14) e considerando $s = 0$, tem-se

$$\begin{aligned} y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} &= h\beta_n \frac{\partial f}{\partial y}\left(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}\right)\left(C_p^* h^p y^{(p)}(t_k) + O(h^{p+1})\right) + \\ &+ C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}), \\ y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} &= \beta_n \frac{\partial f}{\partial y}\left(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}\right)\left(C_p^* h^{p+1} y^{(p)}(t_k) + O(h^{p+2})\right) + \\ &+ C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}), \\ y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} &= \left[\beta_n \frac{\partial f}{\partial y} C_p^* y^{(p)}(t_k) + C_{p+1} y^{(p+1)}(t_k)\right] h^{p+1} + O(h^{p+2}). \end{aligned}$$

Para $m = 1$, o erro de discretização local do método preditor-corretor é da mesma ordem do corretor, porém não idêntico. Entretanto, com sucessivas substituições em (7.1.14), tem-se para $m \geq 2$

$$y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[m]} = C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}),$$

ou seja, o erro de discretização local principal do método preditor-corretor torna-se igual ao do corretor.

(c) Caso $p^* = p - 2$:

Substituindo-se (7.1.10) e (7.1.11) em (7.1.14) e considerando $s = 0$, tem-se

$$\begin{aligned} y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} &= h\beta_n \frac{\partial f}{\partial y}(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}) \left(C_{p-1}^* h^{p-1} y^{(p-1)}(t_k) + O(h^p) \right) + \\ &\quad + C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}), \\ y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} &= \beta_n \frac{\partial f}{\partial y}(t_{k+n}, \eta_{k+n,s}) \left(C_{p-1}^* h^{p} y^{(p-1)}(t_k) + O(h^{p+1}) \right) + \\ &\quad + C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}), \\ y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} &= \left[\beta_n \frac{\partial f}{\partial y} C_{p-1}^* y^{(p-1)}(t_k) + C_{p+1} h y^{(p+1)}(t_k) \right] h^p + O(h^{p+1}). \end{aligned}$$

Para $m = 1$, o erro de discretização local principal do método preditor-corretor tem ordem um a menos do que a ordem do corretor. Susbtituindo-se a expressão anterior e (7.1.11) em (7.1.14) com $s = 1$, conclui-se que

$$\begin{aligned} y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[2]} &= \left(\beta_n \frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 C_{p-1}^* y^{(p-1)}(t_k)\, h^{p+1} + \\ &+ \left(1 + h^2 \beta_n \frac{\partial f}{\partial y} \right) C_{p+1} y^{(p+1)}(t_k)\, h^{p+1} + O(h^{p+2}). \end{aligned} \tag{7.1.16}$$

Para $m = 2$, o erro de discretização local principal do método preditor-corretor é da mesma ordem do corretor, porém não idêntico. Entretanto, com sucessivas substituições em (7.1.14), tem-se para $m \geq 3$

$$y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[m]} = C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}),$$

ou seja, o erro de discretização local principal do método preditor-corretor torna-se o mesmo do corretor.

É possível demonstrar que para o caso geral, $p^* = p - q, \quad 0 < q \leq p$, vale o teorema [**?**]

Teorema 7.1. *um método preditor-corretor para o qual o preditor tem ordem p^* e o corretor tem ordem p, aplicado no modo $P(EC)^m$ ou $P(EC)^m E$, com $p^*, p, m \in \mathbb{N}$ tais que $p^* \geq 0$, $p \geq 1$ e $m \geq 1$, satisfaz*

- *se $p^* \geq p$ então o erro discretização local principal do método preditor-corretor é igual ao do corretor;*
- *se $p^* = p - q, \ 0 < q \leq p$, então o erro de discretização local principal do método preditor-corretor*

(a) é igual ao do corretor quando $m \geq q+1$;

(b) é da mesma ordem que a do corretor, porém não idêntico, quando $m = q$;

(c) é da forma $Kh^{p-q+m+1} + O(h^{p-q+m+2})$ quando $m \leq q-1$.

7.2 Estratégia de Milne

A "Estratégia" de Milne[1] tem por finalidade fornecer uma estimativa para o erro de discretização local de um método preditor-corretor. Considere preditor e corretor dados por

$$P: \quad C^*_{p^*+1} h^{p^*+1} y^{(p^*+1)}(t_k) + O(h^{p^*+2}) = y(t_{k+n}) - y^{[0]}_{k+n}, \tag{7.2.17}$$

$$C: \quad C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) + O(h^{p+2}) = y(t_{k+n}) - y^{[m]}_{k+n}, \tag{7.2.18}$$

e tome $p^* = p$. Subtraindo-se (7.2.17) de (7.2.18), tem-se em primeira aproximação

$$\left(C^*_{p+1} - C_{p+1}\right) h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) = y^{[m]}_{k+n} - y^{[0]}_{k+n}. \tag{7.2.19}$$

Multiplicando-se (7.2.19) por C_{p+1} e por C^*_{p+1}, obtêm-se

$$C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) = \frac{C_{p+1}}{C^*_{p+1} - C_{p+1}} \left(y^{[m]}_{k+n} - y^{[0]}_{k+n}\right), \tag{7.2.20}$$

$$C^*_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) = \frac{C^*_{p+1}}{C^*_{p+1} - C_{p+1}} \left(y^{[m]}_{k+n} - y^{[0]}_{k+n}\right), \tag{7.2.21}$$

estimativas para os erros de discretização locais principais do método preditor-corretor e do preditor, respectivamente.

Pode-se melhorar $y^{[m]}_{k+n}$ utilizando-se a estimativa (7.2.20):

$$y(t_{k+n}) - y^{[m]}_{k+n} = C_{p+1} h^{p+1} y^{p+1}(t_k) + O(h^{p+2}),$$

$$y(t_{k+n}) - \underbrace{\left(y^{[m]}_{k+n} + C_{p+1} h^{p+1} y^{p+1}(t_k)\right)}_{\hat{y}^{[m]}_{k+n}} = O(h^{p+2}),$$

$$\hat{y}^{[m]}_{k+n} = y^{[m]}_{k+n} + C_{p+1} h^{p+1} y^{p+1}(t_k). \tag{7.2.22}$$

Substituindo-se (7.2.20) em (7.2.22), obtém-se

$$\hat{y}^{[m]}_{k+n} = y^{[m]}_{k+n} + \frac{C_{p+1}}{C^*_{p+1} - C_{p+1}} \left(y^{[m]}_{k+n} - y^{[0]}_{k+n}\right). \tag{7.2.23}$$

Em (7.2.23), $\hat{y}^{[m]}_{k+n}$ é o *Modificador M* do corretor.

---

[1] Tradução livre do inglês *Milne's Device* com possíveis variações dadas por *Algoritmo* e *Esquema* de Milne.

A Estratégia de Milne também pode ser empregada para aprimorar a solução do preditor. A expressão (7.2.21) não pode ser empregada pois, no momento de aplicar o preditor $y_{k+n}^{[m]}$ não é conhecido. Nesse caso,

$$C_{p+1}^{*} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) = \underbrace{C_{p+1}^{*} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_{k-1})}_{\hat{y}_{k+n}^{[0]} - y_{k+n}^{[0]}} + O(h^{p+2}),$$

$$\hat{y}_{k+n}^{[0]} - y_{k+n}^{[0]} = C_{p+1}^{*} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_{k-1}). \tag{7.2.24}$$

Substituindo-se (7.2.21) em (7.2.24), tem-se

$$\hat{y}_{k+n}^{[0]} = y_{k+n}^{[0]} + \frac{C_{p+1}^{*}}{C_{p+1}^{*} - C_{p+1}} \left(y_{k+n-1}^{[m]} - y_{k+n-1}^{[0]} \right). \tag{7.2.25}$$

Em (7.2.25), $\hat{y}_{k+n}^{[0]}$ é o *Modificador M* do preditor.

Os modos $P(EC)^m E$ e $P(EC)^m$ podem ser agora reescritos com os modificadores do preditor e do corretor como

$$PM(ECM)^m E$$

e

$$PM(ECM)^m.$$

Para $p^* = p$, a Estratégia de Milne pode ser utilizada ou para aprimorar a solução $y_{k+n}^{[m]}$ ou para o controle automático do passo de integração, mas não para ambos simultaneamente. Caso se queira valores aproximados mais precisos, é preferível aumentar a ordem do método e usar a Estratégia de Milne para controlar o passo de integração.

7.3 Estabilidade absoluta

Sabe-se que o polinômio cujas raízes controlam as propriedades de estabilidade absoluta de um método de passo múltiplo linear (ou seja, a escolha do passo de integração numa simulação computacional) é o polinômio

$$\Pi(r) = \rho(r) - \bar{h}\sigma(r),$$

onde $\rho(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j r^j$ e $\sigma(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j r^j$ são, respectivamente, o primeiro e o segundo polinômios característicos do método de passo múltiplo e $\bar{h} = h\lambda = h\dfrac{\partial f}{\partial y}$ é uma constante.

Em métodos preditores-corretores, o polinômio que determina as propriedades de estabilidade absoluta $\Pi(r)$ depende de ambos os polinômios, o do preditor e o do corretor. Tal fato pode ser ilustrado, por exemplo, para um método preditor-

corretor aplicado no modo PECE ($m = 1$), explicitamente dado por

$$P: \quad y_{k+n}^{[0]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* y_{k+j}^{[1]} = h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[1]}), \tag{7.3.26}$$

$$C: \quad y_{k+n}^{[1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y_{k+j}^{[1]} = h\beta_n f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[0]}) + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[1]}), \tag{7.3.27}$$

$$P: \quad y(t_{k+n}) + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* y(t_{k+j}) = h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* f(t_{k+j}, y(t_{k+j})) + \alpha^* h, \tag{7.3.28}$$

$$C: \quad y(t_{k+n}) + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y(t_{k+j}) = h\beta_n f(t_{k+n}, y(t_{k+n})) + h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j f(t_{k+j}, y(t_{k+j})) + \\ + \alpha h. \tag{7.3.29}$$

Subtraindo-se (7.3.26) de (7.3.28), obtém-se

$$\begin{aligned} y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[0]} \quad &+ \quad \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* \left[y(t_{k+j}) - y_{k+j}^{[1]} \right] = \\ &= \quad h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* \left[f(t_{k+j}, y(t_{k+j})) - f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[1]}) \right] + \alpha^* h, \\ e_{k+n}^{[0]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* e_{k+j}^{[1]} \quad &= \quad h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* [f(t_{k+j}, y(t_{k+j})) - f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[1]})] + \\ &+ \quad \alpha^* h. \end{aligned} \tag{7.3.30}$$

Do mesmo modo, subtraindo-se (7.3.27) de (7.3.29), chega-se a

$$\begin{aligned} y(t_{k+n}) - y_{k+n}^{[1]} \quad &+ \quad \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j \left[y(t_{k+j}) - y_{k+j}^{[1]} \right] = \\ &= \quad h\beta_n \left[f(t_{k+n}, y(t_{k+n})) - f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[0]}) \right] + \\ &+ \quad \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j \left[f(t_{k+j}, y(t_{k+j})) - f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[1]}) \right] + \alpha h, \\ e_{k+n}^{[1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j e_{k+j}^{[1]} \quad &= \quad h\beta_n \left[f(t_{k+n}, y(t_{k+n})) - f(t_{k+n}, y_{k+n}^{[0]}) \right] + \\ &+ \quad h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j [f(t_{k+j}, y(t_{k+j})) - f(t_{k+j}, y_{k+j}^{[1]})] + \alpha h. \end{aligned} \tag{7.3.31}$$

Utilizando-se o Teorema do Valor Médio nas equações de diferenças lineares (7.3.30) e (7.3.31), obtêm-se

$$e_{k+n}^{[0]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* e_{k+j}^{[1]} = h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* \frac{\partial f}{\partial y} (t_{k+j}, \eta_{k+j}) \, e_{k+j}^{[1]} + \alpha^* h \tag{7.3.32}$$

e

$$
\begin{aligned}
e_{k+n}^{[1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j e_{k+j}^{[1]} &= h\beta_n \frac{\partial f}{\partial y}\left(t_{k+n}, \eta_{k+n}\right) e_{k+n}^{[0]} + \\
&+ h \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j \frac{\partial f}{\partial y}(t_{k+j}, \eta_{k+j}) e_{k+j}^{[1]} + \alpha h.
\end{aligned} \tag{7.3.33}
$$

Supondo-se que seja aproximadamente constante $\dfrac{\partial f}{\partial y} \approx \lambda$, denotando $h\lambda = \bar{h}$ e substituindo-se (7.3.32) em (7.3.33), tem-se

$$
\begin{aligned}
e_{k+n}^{[1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j e_{k+j}^{[1]} &= \bar{h}\beta_n \left[-\sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* e_{k+j}^{[1]} + \bar{h} \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* e_{k+j}^{[1]} + \alpha^* h \right] + \\
&+ \bar{h} \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j e_{k+j}^{[1]} + \alpha h,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
e_{k+n}^{[1]} + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j e_{k+j}^{[1]} - \bar{h} \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j e_{k+j}^{[1]} &= \bar{h}\beta_n \left[-\sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^* e_{k+j}^{[1]} + \bar{h} \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j^* e_{k+j}^{[1]} \right] + \\
&+ \bar{h}\beta_n \alpha^* h + \alpha h,
\end{aligned}
$$

$$
\sum_{j=0}^{n} \alpha_j e_{k+j}^{[1]} - \bar{h} \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j e_{k+j}^{[1]} = -\bar{h}\beta_n \sum_{j=0}^{n-1} (\alpha_j^* - \bar{h}\beta_j^*) e_{k+j}^{[1]} + \phi, \tag{7.3.34}
$$

onde $\bar{h} = h\lambda = h\frac{\partial f}{\partial y}$ e $\phi = \bar{h}\beta_n \alpha^* h + \alpha h$.

Adicionado-se $-\bar{h}\beta_n e_{k+n}^{[1]}$ a ambos os lados de (7.3.34) e considerando-se $\alpha_n^* = 1$ e $\beta_n^* = 0$, obtêm-se

$$
\sum_{j=0}^{n} (\alpha_j - \bar{h}\beta_j) e_{k+j}^{[1]} = -\bar{h}\beta_n \sum_{j=0}^{n} (\alpha_j^* - \bar{h}\beta_j^*) e_{k+j}^{[1]} + \phi,
$$

$$
\sum_{j=0}^{n} (\alpha_j - \bar{h}\beta_j) e_{k+j}^{[1]} + \bar{h}\beta_n \sum_{j=0}^{n} (\alpha_j^* - \bar{h}\beta_j^*) e_{k+j}^{[1]} = \phi,
$$

$$
\sum_{j=0}^{n} \left[\left(\alpha_j - \bar{h}\beta_j\right) + \bar{h}\beta_n \left(\alpha_j^* - \bar{h}\beta_j^*\right) \right] e_{k+j}^{[1]} = \phi. \tag{7.3.35}
$$

Em (7.3.35), tem-se uma equação de diferenças linear cuja solução é dada por

$$
e_k^{[1]} = \sum_{j=1}^{n} d_j r_j^k + \frac{\phi}{\displaystyle\sum_{j=0}^{n} \left[\left(\alpha_j - \bar{h}\beta_j\right) + \bar{h}\beta_n \left(\alpha_j^* - \bar{h}\beta_j^*\right) \right]},
$$

onde r_j são as raízes do polinômio

$$\pi(r) = \sum_{j=0}^{n} \left[(\alpha_j - \bar{h}\beta_j) + \bar{h}\beta_n(\alpha_j^* - \bar{h}\beta_j^*) \right] r^j. \tag{7.3.36}$$

Pode-se reescrever o polinômio (7.3.36) em função dos polinômios característicos do preditor e do corretor. Assim,

$$\pi(r) = \rho(r) - \bar{h}\sigma(r) + \bar{h}\beta_n \left[\rho^*(r) - \bar{h}\sigma^*(r) \right], \tag{7.3.37}$$

onde $\rho^*(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^* r^j$, $\rho(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j r^j$, $\sigma^*(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j^* r^j$ e $\sigma(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j r^j$.

Caso as raízes r_j do polinômio (7.3.37) satisfaçam a condição

$$|r_j| < 1, \;\; j = 1, 2, \cdots, n,$$

o método preditor-corretor em estudo será absolutamente estável. O intervalo de estabilidade absoluta do Método Preditor-Corretor será (α, β) $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ tal que $\bar{h} = h\lambda \in (\alpha, \beta)$.

7.3.1 Exercícios

7.4 Controle do passo de integração

Para controlar automaticamente o passo de integração $h > 0$ em um método preditor-corretor, utilizam-se simultaneamente três critérios de seleção:

1. a Estratégia de Milne (se $p^* = p$) para estimar o erro de discretização local principal;

2. $h\dfrac{\partial f}{\partial y} = h\lambda = \bar{h}$ deve pertencer ao intervalo de estabilidade absoluta;

3. a condição de convergência do Método do Ponto Fixo

$$h < \frac{1}{L|\beta_n|}.$$

No segundo critério, faz-se necessário estimar $\dfrac{\partial f}{\partial y}$. Uma das estimativas possíveis (Lambert [16]) é dada por

$$\bar{h} = h\lambda = h\frac{\partial f}{\partial y} \approx h\frac{f\left(t_{k+n}, y_{k+n}^{[1]}\right) - f\left(t_{k+n}, y_{k+n}^{[0]}\right)}{y_{k+n}^{[1]} - y_{k+n}^{[0]}}$$

quando $m = 1$ e

$$\bar{h} = h\lambda = h\frac{\partial f}{\partial y} \approx \frac{y_{k+n}^{[m]} - y_{k+n}^{[m-1]}}{\beta_n\left(y_{k+n}^{[m-1]} - y_{k+n}^{[m-2]}\right)}$$

quando $m \geq 2$.

7.4.1 Exercícios

Exercício 7.2. *Deduza as fórmulas que estimam a parte principal do erro de discretização local dos métodos que usam como preditor Adams-Bashforth e como corretor Adams-Moulton, ambos de ordem 4.*

Exercício 7.3. *Defina formalmente os algoritmos de 4 passos que usam o par preditor-corretor de Adams-Bashforth-Moulton de quarta ordem nos modos*

1. *PEC;*
2. *PECE;*
3. *PMEC;*
4. *PMECE.*

Exercício 7.4. *Aplique o Método Preditor-Corretor definido por*

$$\begin{aligned} y_{n+4} - y_{n+3} &= \frac{h}{24}(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n) \\ y_{n+4} - y_{n+3} &= \frac{h}{24}(9f_{n+4} + 19f_{n+3} - 5f_{n+2} + f_{n+1}) \end{aligned},$$

no modo PECE, ao problema de valor inicial

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = -20y(t) & 0 \leq t \leq 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}.$$

Ilustre a estabilidade usando

1. $h = 0,1$;
2. $h = 0,01$.

Exercício 7.5. *Considere o problema de valor inicial*

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = \dfrac{2t}{y^2}, & 0 \leq t \leq 3, \\ y(0) = 1. \end{cases} \tag{7.4.38}$$

1. *Solucione (7.4.38) usando $h = 0,1$ e o método preditor-corretor*

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y_n &= \tfrac{h}{12}\left(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}\right) \\ y_{n+1} - y_n &= \tfrac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \end{aligned}.$$

2. *Solucione (7.4.38) usando $h = 0,1$ e o método preditor-corretor*

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y_n &= \tfrac{h}{24}\left(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}\right) \\ y_{n+1} - y_n &= \tfrac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \end{aligned}.$$

3. *Compare os dois métodos usando y_1, y_2 e y_3 obtidos por um $RK44$.*

P	$\rho^*(\zeta) = \zeta^2 - 1$	$\sigma^*(\zeta) = (3/2)(\zeta - 1)$
C	$\rho(\zeta) = \zeta^2 - 1$	$\sigma(\zeta) = (1/2)\left(\zeta^2 + \zeta\right)$

Tabela 7.3: Polinômios característicos que definem o método preditor-corretor.

Exercício 7.6. *Considere o preditor P e o corretor C definidos pelos polinômios característicos presentes na Tabela 7.3.*

1. *Determine a ordem do método.*
2. *Calcule o coeficiente da parte principal do erro de discretização local .*
3. *Mostre que o coeficiente determinado no item anterior é igual ao do corretor.*

7.5 Suplemento teórico

Um número p é um ponto fixo de uma função $g(t)$ se

$$g(p) = p,$$

ou equivalentemente, se

$$g(p) - p = 0.$$

Teorema 7.2 (Teorema do Ponto Fixo)**.** *Seja $g(t) \in C^{(1)}[a,b]$ tal que $g(t) \in [a,b]$ $\forall t \in [a,b]$. Suponha ainda que $g'(t)$ exista em (a,b) com*

$$|g'(t)| \leq k \ \forall t \in (a,b),$$

onde $k < 1$ é uma constante positiva. Então, para um número qualquer $p_0 \in [a,b]$, a sequência definida por

$$p_{n+1} = g\left(p_n\right), \ \ n \geq 0$$

converge para o único ponto fixo $p \in [a,b]$.

Observação: O Teorema do Ponto Fixo permite determina a raiz p de $f(t) = 0$, ou seja, $f(p) = 0$. Para empregá-lo, é necessário reescrever $f(t) = 0$ como $t = g(t)$.

7.6 Exercícios resolvidos

Exercício Resolvido 7.1. *Considere o preditor P e dois corretores $C^{(1)}$ e $C^{(2)}$, definidos pelos polinômios característicos presentes na Tabela (7.4).*

(a) Deduza uma estimativa do erro local de discretização

(i) para um Método Preditor-Corretor que use P e $C^{(1)}$;

(ii) para um Método Preditor-Corretor que use P e $C^{(2)}$.

(b) Escreva o algoritmo que utiliza P e $C^{(1)}$ no modo $PECE$.

P	$\rho^*(\zeta) = \zeta^4 - 1$	$\sigma^*(\zeta) = (4/3)\left(2\zeta^3 - \zeta^2 + 2\zeta\right)$
$C^{(1)}$	$\rho_1(\zeta) = \zeta^2 - 1$	$\sigma_1(\zeta) = (1/3)\left(\zeta^2 + 4\zeta + 1\right)$
$C^{(2)}$	$\rho_2(\zeta) = \zeta^3 - (9/8)\zeta^2 + (1/8)$	$\sigma_2(\zeta) = (3/8)\left(\zeta^3 + 2\zeta^2 - \zeta\right)$

Tabela 7.4: Polinômios característicos que definem o Método Preditor-Corretor.

(c) Escreva o algoritmo que utiliza P e $C^{(2)}$ no modo $PMECME$.

Solução:

Como $\rho^*(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^* r^j, \quad \rho(r) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j r^j, \quad \sigma^*(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j^* r^j, \quad \sigma(r) = \sum_{j=0}^{n} \beta_j r^j$ *e* $\sum_{j=0}^{n} \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^{n} \beta_j f_{k+j}$, *os polinômios característicos da Tabela (7.4) definem os seguintes métodos de passo múltiplo lineares:*

$$P: \quad y_{k+4} - y_k = \frac{4}{3} h \left[2f_{k+3} - f_{k+2} + 2f_{k+1}\right]; \tag{7.6.39}$$

$$C^{(1)}: \quad y_{k+2} - y_k = \frac{1}{3} h \left[f_{k+2} + 4f_{k+1} + f_k\right]; \tag{7.6.40}$$

$$C^{(2)}: \quad y_{k+3} - \frac{9}{8} y_{k+2} + \frac{1}{8} y_k = \frac{3}{8} h \left[f_{k+3} + 2f_{k+2} - f_{k+1}\right]. \tag{7.6.41}$$

Pode-se mostrar que os métodos P, $C^{(1)}$ e $C^{(2)}$ têm ordem de consistência 4 (verifique que $C_0 = C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = 0$ e $C_5 \neq 0$), o que possibilita o uso do dispositivo de Milne. Ao calcular o coeficiente C_{p+1} do erro, obtêm-se

$$C_5^* = \frac{14}{45}, \tag{7.6.42}$$

$$C_5^{(1)} = -\frac{1}{90}, \tag{7.6.43}$$

$$C_5^{(2)} = -\frac{1}{40}. \tag{7.6.44}$$

Substituindo (7.6.42), (7.6.43) e (7.6.44) em

$$C_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(t_k) = \frac{C_{p+1}}{C_{p+1}^* - C_{p+1}} \left(y_{k+n}^{[m]} - y_{k+n}^{[0]}\right),$$

conclui-se que:

$1(a)(i)$

$$\begin{aligned} C_5^{(1)} h^5 y^{(5)}(t_k) &= \frac{-\frac{1}{90}}{\frac{14}{45} + \frac{1}{90}} \left(y_{k+n}^{[m]} - y_{k+n}^{[0]}\right) \\ &= -\frac{1}{29} \left(y_{k+n}^{[m]} - y_{k+n}^{[0]}\right); \end{aligned}$$

$1(a)(ii)$

$$\begin{aligned} C_5^{(2)} h^5 y^{(5)}(t_k) &= \frac{-\frac{1}{40}}{\frac{14}{45} + \frac{1}{40}} \left(y_{k+n}^{[m]} - y_{k+n}^{[0]}\right) \\ &= -\frac{9}{121} \left(y_{k+n}^{[m]} - y_{k+n}^{[0]}\right). \end{aligned}$$

Como o preditor é um método de 4 passos, os corretores $C^{(1)}$ e $C^{(2)}$ podem ser reescritos na forma

$$C^{(1)}: \quad y_{k+4} - y_{k+2} = \frac{1}{3}h\left[f_{k+4} + 4f_{k+3} + f_{k+2}\right], \tag{7.6.45}$$

$$C^{(2)}: \quad y_{k+4} - \frac{9}{8}y_{k+3} + \frac{1}{8}y_{k+1} = \frac{3}{8}h\left[f_{k+4} + 2f_{k+3} - f_{k+2}\right]. \tag{7.6.46}$$

Assim:

1(b)

$$\begin{aligned}
P: &\quad y_{k+4}^{[0]} - y_k^{[1]} = \frac{4}{3}h\left[2f_{k+3}^{[1]} - f_{k+2}^{[1]} + 2f_{k+1}^{[1]}\right] \\
E: &\quad f_{k+4}^{[0]} = f\left(t_{k+4}, y_{k+4}^{[0]}\right) \\
C: &\quad y_{k+4}^{[1]} - y_{k+2}^{[1]} = \frac{1}{3}h\left[f_{k+4}^{[0]} + 4f_{k+3}^{[1]} + f_{k+2}^{[1]}\right] \\
E: &\quad f_{k+4}^{[1]} = f\left(t_{k+4}, y_{k+4}^{[1]}\right);
\end{aligned}$$

1(c)

$$\begin{aligned}
P: &\quad y_{k+4}^{[0]} - \hat{y}_k^{[1]} = \frac{4}{3}h\left[2\hat{f}_{k+3}^{[1]} - \hat{f}_{k+2}^{[1]} + 2\hat{f}_{k+1}^{[1]}\right] \\
M: &\quad \hat{y}_{k+4}^{[0]} = y_{k+4}^{[0]} + \frac{112}{121}\left(y_{k+3}^{[1]} - y_{k+3}^{[0]}\right) \\
E: &\quad \hat{f}_{k+4}^{[0]} = f\left(t_{k+4}, \hat{y}_{k+4}^{[0]}\right) \\
C: &\quad y_{k+4}^{[1]} - \frac{9}{8}\hat{y}_{k+3}^{[1]} + \frac{1}{8}\hat{y}_{k+1}^{[1]} = \frac{3}{8}h\left[\hat{f}_{k+4}^{[0]} + 2\hat{f}_{k+3}^{[1]} - \hat{f}_{k+2}^{[1]}\right] \\
M: &\quad \hat{y}_{k+4}^{[1]} = y_{k+4}^{[1]} - \frac{9}{121}\left(y_{k+4}^{[1]} - y_{k+4}^{[0]}\right) \\
E: &\quad \hat{f}_{k+4}^{[1]} = f\left(t_{k+4}, \hat{y}_{k+4}^{[1]}\right).
\end{aligned}$$

<u>*Observação:*</u>

$$\begin{aligned}
\hat{y}_{k+n}^{[0]} &= y_{k+n}^{[0]} + \frac{C_{p+1}^*}{C_{p+1}^* - C_{p+1}}\left(y_{k+n-1}^{[m]} - y_{k+n-1}^{[0]}\right) \\
\hat{y}_{k+4}^{[0]} &= y_{k+4}^{[0]} + \frac{\frac{14}{45}}{\frac{14}{45} + \frac{1}{40}}\left(y_{k+3}^{[1]} - y_{k+3}^{[0]}\right) \\
\hat{y}_{k+4}^{[0]} &= y_{k+4}^{[0]} + \frac{112}{121}\left(y_{k+3}^{[1]} - y_{k+3}^{[0]}\right)
\end{aligned}$$

Apêndice A

Exercícios complementares

1 Seja o método de passo único descrito abaixo.

Método A.1 (de Runge-Kutta de $2^{\underline{a}}$ ordem com dois estágios (Ralston))**.**

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ y_{k+1} = y_k + h\Phi(t_k, y_k, h) \end{cases}, \tag{A.0.1}$$

com $\quad t_{k+1} = t_k + h, \quad 0 \leq k \leq n-1, \quad h = \dfrac{b-a}{n} \quad$ *e*

$$\Phi(t_k, y_k, h) = \frac{1}{4}\left(\kappa_1 + 3\kappa_2\right),$$

sendo

$$\begin{cases} \kappa_1 = f(t_k, y_k) \\ \\ \kappa_2 = f\left(t_k + \dfrac{2}{3}h, y_k + \dfrac{2}{3}h\kappa_1\right) \end{cases}.$$

1.1 O método de passo simples (A.0.1) é consistente e convergente? Justifique.

1.2 Comprove a ordem de consistência dois do método de passo simples (A.0.1) verificando que ele concorda com o Método da Série de Taylor até o termo de segunda ordem.

1.3 Determine a região de estabilidade absoluta do método de passo simples (A.0.1). Faça a análise para $\lambda \in \mathbb{R}$.

1.4 Use o método de passo simples (A.0.1) para solucionar o Problema de Cauchy

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = te^{3t} - 2y(t), \quad t \in [0,1] \\ \\ y(0) = 0 \end{cases}, \tag{A.0.2}$$

com $h = 0,5$. Calcule o erro global de discretização no instante $t = 1$ e comente o resultado obtido.

1.5 Ao solucionar o Problema de Cauchy numericamente, é mais vantajoso computacionalmente usar o método de passo simples (A.0.1) ou o Método de Euler Aprimorado? Justifique.

2 Considere o método descrito a seguir.

Método A.2 (de passo único)**.**

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ y_{k+1} = y_k + h\Phi(t_k, y_k, h) \end{cases}, \tag{A.0.3}$$

com $t_{k+1} = t_k + h, \quad 0 \leq k \leq n-1, \quad h = \dfrac{b-a}{n}$ *e*

$$\Phi(t_k, y_k, h) = \frac{1}{5}\left(2\kappa_1 + 3\kappa_2\right),$$

sendo

$$\begin{cases} \kappa_1 = f(t_k, y_k) \\ \kappa_2 = f\left(t_k + \dfrac{5}{6}h, y_k + \dfrac{5}{6}h\kappa_1\right) \end{cases}.$$

2.1 O método (A.0.3) é um Método de Runge-Kutta? Justifique.

2.2 O método (A.0.3) é consistente e convergente? Justifique.

2.3 Seja o Problema de Cauchy

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = -50y(t), \quad t \in [0, 10] \\ \\ y(0) = 5 \end{cases}. \tag{A.0.4}$$

a Discretize o problema de valor inicial (A.0.4) usando o Método de Runge-Kutta 44 clássico.

b Analise a estabilidade absoluta do Método de Runge-Kutta 44 clássico, aplicado ao problema de valor inicial (A.0.4), para os seguintes passos de integração: $h = \dfrac{1}{4}$, $h = \dfrac{1}{10}$, $h = \dfrac{3}{50}$, $h = \dfrac{1}{20}$ e $h = \dfrac{1}{100}$.

2.4 Seja o Problema de Cauchy

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = 1 + \dfrac{1}{t}y(t), \quad t \in [1, 2] \\ \\ y(1) = 2 \end{cases}. \tag{A.0.5}$$

a Calcule a solução exata do problema de valor inicial (A.0.5).

b Discretize o problema de valor inicial (A.0.5) empregando o Método de Euler Implícito.

c Determine o erro global de discretização cometido no instante $t = 2$ ao solucionar numericamente o problema de valor inicial (A.0.5) utilizando o Método de Euler Implícito com passo de integração $h = \dfrac{1}{4}$. Comente o resultado obtido.

2.5 Seja o Problema de Cauchy

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = -5y(t) + 5t^2 + 2t, \quad t \in [0,1] \\ \\ y(0) = \dfrac{1}{3} \end{cases} . \tag{A.0.6}$$

a Calcule a solução exata do problema de valor inicial (A.0.6).

b Estime o passo de integração h para que o erro local de discretização para o Método de Euler, aplicado à solução numérica do problema de valor inicial (A.0.6), seja menor que 10^{-3}.

3 Solucione a equação de diferenças linear

$$y_{k+2} + 4y_k = 15$$

com condições iniciais $y_0 = 1$ e $y_1 = 2$.

4 Seja a sequência de Fibonacci

$$y_{k+2} = y_{k+1} + y_k, \ k \geq 0, \tag{A.0.7}$$

onde

$$y_0 = y_1 = 1. \tag{A.0.8}$$

Solucione a equação de diferenças linear (A.0.7), sujeita às condições iniciais (A.0.8).

5 Calcule φ, δ e γ para que o método de passo múltiplo linear

$$y_{k+4} - y_k + \varphi\left(y_{k+3} - y_{k+1}\right) = h\left[\delta\left(f_{k+3} - f_{k+1}\right) + \gamma f_{k+2}\right] \tag{A.0.9}$$

seja consistente de ordem 3.

6 Os métodos de passo múltiplo lineares

$$y_{k+3} = 3y_{k+1} - \frac{1}{2}\left(3y_{k+2} + y_k\right) + 3hf_{k+2} \tag{A.0.10}$$

e

$$y_{k+3} = \frac{1}{8}\left(9y_{k+2} - y_k\right) + \frac{3h}{8}\left(f_{k+3} + 2f_{k+2} - f_{k+1}\right) \tag{A.0.11}$$

são convergentes? Justifique.

7 Sejam o método de passo múltiplo linear

$$y_{k+2} - y_{k+1} = \frac{h}{3}\left(f_{k+2} + 4f_{k+1} + f_k\right) \tag{A.0.12}$$

e o problema de valor inicial

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = -20\left[y(t) - t^2\right] + 2t, \quad t \in [0,10] \\ \\ y(0) = \dfrac{1}{3} \end{cases} . \tag{A.0.13}$$

7.1 O método de passo múltiplo linear (A.0.12) é *absolutamente estável* considerando o p.v.i. (A.0.13) com $h = 0,1$? Justifique.

7.2 Na sua opinião, o método de passo múltiplo linear (A.0.12) gera bons resultados quando aplicado à solução do p.v.i. (A.0.13) com $h = 0,1$? Justifique.

8 Seja o problema de valor inicial

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = \dfrac{1}{t}y(t) - \dfrac{1}{t^2}y^2(t), \quad t \in [1,2] \\ \\ y(1) = 1 \end{cases} . \tag{A.0.14}$$

8.1 Calcule a solução exata do p.v.i. (A.0.14).

8.2 Discretize o p.v.i. (A.0.14) empregando o método de passo múltiplo linear

$$y_{k+4} = y_k + \frac{4h}{3}\left(2f_{k+3} - f_{k+2} + 2f_{k+1}\right). \tag{A.0.15}$$

8.3 Determine o erro global de discretização cometido no instante $t = 2$ ao solucionar o p.v.i. (A.0.14) com o método de passo múltiplo linear (A.0.15) e $h = \dfrac{1}{4}$.

9 Considere os Métodos Preditor P e Corretor C definidos por

$$\begin{aligned} y_{k+2} + 4y_{k+1} - 5y_k &= h\left(4f_{k+1} + 2f_k\right), \\ y_{k+2} - y_k &= \frac{h}{3}\left(f_{k+2} + 4f_{k+1} + f_k\right). \end{aligned}$$

9.1 Determine o erro local de discretização principal do Método Preditor-Corretor.

9.2 Escreva o polinômio

$$\pi(r) = \rho(r) - \bar{h}\sigma(r) + \bar{h}\beta_n\left[\rho^*(r) - \bar{h}\sigma^*(r)\right] \tag{A.0.16}$$

associado à equação de diferenças linear para o erro global de discretização do Método Preditor-Corretor no modo $PECE$. Qual é a aplicabilidade do polinômio (A.0.16)?

9.3 Escreva o algoritmo que utiliza o Método Preditor-Corretor no modo $PECE$.

10 Seja o Método Preditor-Corretor Adams-Bashforth-Moulton definido por

$$\begin{aligned} y_{k+2} - y_{k+1} &= \frac{h}{2}\left(3f_{k+1} - f_k\right), \\ y_{k+2} - y_{k+1} &= \frac{h}{12}\left(5f_{k+2} + 8f_{k+1} - f_k\right). \end{aligned}$$

10.1 Determine o erro local de discretização principal do Método Preditor-Corretor.

10.2 Escreva o algoritmo que utiliza o Método Preditor-Corretor no modo $PECE$.

Apêndice B

Exercícios computacionais

1 Considere o p.v.i.

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = -20y(t), \quad t \in [0,1] \\ \\ y(0) = 1 \end{cases}. \tag{B.0.1}$$

1.1 Solucione numericamente o p.v.i. (B.0.1) usando os Métodos de Euler e de Runge-Kutta de $4^{\underline{a}}$ ordem com 4 estágios e os seguintes passos de integração:

A $h = 0,05$;
B $h = 0,1$;
C $h = 0,2$.

Implemente os métodos numéricos em linguagem C ou Fortran.

1.2 Analise e justifique os resultados obtidos, comparando os dois métodos numéricos implementados em relação a:

A convergência;
B estabilidade;
C consistência.

2 Seja o Método de Runge-Kutta-Fehlberg, definido por

$$\alpha_k^{RKF} \approx \frac{1}{360}\kappa_1 - \frac{128}{4275}\kappa_3 - \frac{2197}{75240}\kappa_4 + \frac{1}{50}\kappa_5 + \frac{2}{55}\kappa_6.$$

2.1 Valide o Método de Runge-Kutta-Fehlberg, em linguagem C ou Fortran, empregando o p.v.i.

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = \lambda y(t), \quad t \in [a,b] \\ \\ y(a) = y(t_0) = y_0 \end{cases}, \tag{B.0.2}$$

onde λ é uma constante.

2.2 Considere o p.v.i.

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}y(t) = -2t - y(t), \quad t \in [0,10] \\ \\ y(0) = -1 \end{cases}. \tag{B.0.3}$$

A Solucione o p.v.i. (B.0.3) usando o Método de Runge-Kutta-Fehlberg, em linguagem C ou Fortran, com $h = 0,2$ e

(a) $\epsilon = 10^{-6}$;

(b) $\epsilon = 10^{-3}$.

B Compare o erro local de discretização e o passo de integração. Organize os dados em uma tabela.

C Calcule o erro global de discretização no instante $t = 10$ e comente os resultados obtidos.

3 Modelagem da propagação de doenças contagiosas

3.1 Problema

Na teoria de propagação de doenças contagiosas, uma equação diferencial ordinária não linear de primeira ordem homogênea pode ser usada para prever o número de indivíduos infectados em um tempo qualquer (em dias), desde que simplificações adequadas sejam adotadas. Em particular, considera-se que todos os indivíduos de uma população fixa podem ser contaminados e que, uma vez infectados, permanecem nessa condição.

Sejam $x(t)$ o número de indivíduos suscetíveis à infecção e $y(t)$ o número de indivíduos infectados. É razoável supor que a taxa de variação temporal do número de infectados seja proporcional ao produto do número de indivíduos suscetíveis pelo número de indivíduos infectados. Assim, tem-se que

$$\frac{d}{dt}y(t) = k\,x(t)y(t), \tag{B.0.4}$$

onde k é uma constante e

$$x(t) + y(t) = m, \tag{B.0.5}$$

sendo m o tamanho da população. Como $x(t) = m - y(t)$, a equação (B.0.4) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt}y(t) = k[m - y(t)]y(t). \tag{B.0.6}$$

A equação (B.0.6) é chamada *Equação de Bernoulli.* Esta equação pode, pela substituição

$$u(t) = \frac{1}{y(t)}, \tag{B.0.7}$$

ser reescrita como a equação diferencial ordinária linear de primeira ordem não homogênea (verifique!)

$$\frac{d}{dt}u(t) = k[1 - m\,u(t)]. \tag{B.0.8}$$

3.2 Questões

A Calcule a solução exata (família de soluções) da equação (B.0.6) e determine $\lim_{t\to\infty} y(t)$. Esse limite é aceitável? Justifique.

B Implemente computacionalmente, em linguagem C ou Fortran, os seguintes métodos de aproximação da solução do Problema de Cauchy

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = \dfrac{d}{dt}y(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [a, b] \\ \\ y(t_0) = y(a) = y_0 \end{cases} :$$

- Euler;
- Euler Aprimorado;
- Trapézio;
- Runge-Kutta-Fehlberg;
- Adams-Bashforth de 4 passos;
- Adams-Moulton de 4 passos.

C Considere na equação (B.0.6):

$$m = 10^5;$$
$$k = 2\text{x}10^{-6};$$
$$y(0) = 10^3;$$
$$t \in [0, 30].$$

(a) Use os métodos implementados no item B para aproximar a solução da equação (B.0.11) no instante de tempo $t = 30$ *dias*. Otimize o passo temporal em cada método e calcule o erro global de discretização.

(b) Compare os métodos empregados. Use tabelas e gráficos (plote o gráfico da solução exata e da solução numérica empregando aplicativos como o winplot, o octave, o maple, o matlab, o mathematica, etc.).

4 Modelagem do crescimento populacional

4.1 Problema

Seja $P(t)$ o número de integrantes de uma população em um determinado instante de tempo t, medido em anos. Se a taxa média de nascimentos b é constante e a taxa média de mortes d é proporcional ao tamanho da população, então a taxa de crescimento da população é dada pela equação logística

$$\frac{d}{dt}P(t) = bP(t) - dP(t), \tag{B.0.9}$$

sendo d dada por

$$d = kP(t). \tag{B.0.10}$$

Substituindo (B.0.10) na equação (B.0.9), obtém-se a equação diferencial ordinária não linear, de primeira ordem, homogênea

$$\frac{d}{dt}P(t) = bP(t) - k[P(t)]^2. \tag{B.0.11}$$

A equação (B.0.11) pode, pela substituição

$$P(t) = \frac{1}{u(t)}, \tag{B.0.12}$$

ser reescrita como a equação diferencial ordinária linear, de primeira ordem, não homogênea (verifique!)

$$\frac{d}{dt}u(t) + bu(t) = k. \tag{B.0.13}$$

4.2 Questões

A Calcule a solução exata (família de soluções) da equação (B.0.11) e determine

$$\lim_{t\to\infty} P(t).$$

Este limite é aceitável? Justifique.

B Implemente computacionalmente, em linguagem C ou Fortran, os seguintes métodos de aproximação da solução do Problema de Cauchy

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = \dfrac{d}{dt}y(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [a, b] \\ \\ y(t_0) = y(a) = y_0 \end{cases} :$$

- Euler;
- Euler Aprimorado;
- Trapézio;
- Runge-Kutta-Fehlberg;
- Adams-Bashforth de 4 passos;
- Adams-Moulton de 4 passos;
- um método preditor-corretor.

C Considere na equação (B.0.11):

$$b = 2,9\text{x}10^{-2};$$

$$k = 1,4\text{x}10^{-7};$$

$$P(0) = 50.976;$$

$$t \in [0, 30].$$

(a) Use os métodos implementados na questão 2 para aproximar a solução das equações (B.0.11) e (B.0.10) no instante de tempo $t = 30$ *anos*. Otimize o passo temporal em cada método e calcule o erro global de discretização.

(b) Compare os métodos empregados. Use tabelas e gráficos (plote o gráfico da solução exata e da solução numérica empregando aplicativos como o winplot, o octave, o maple, o matlab, o mathematica, etc.).

Bibliografia

[1] BERGMAN, R. N. The minimal model of glucose regulation: a biography. *Mathematical Modeling in Nutrition and Health*, 2001.

[2] BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*. 10. ed. [S.l.]: LTC, 2010.

[3] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical analysis*. [S.l.]: Brooks/Cole Publishing Company, 1997.

[4] BUTCHER, J. C. A history of runge-kutta methods. *Applied numerical mathematics*, North-Holland, v. 20, n. 3, p. 247–260, 1996.

[5] BUTCHER, J. C. *Numerical methods for ordinary differential equations*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2003.

[6] DAHLQUIST, G. Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations. *Mathematica Scandinavica*, JSTOR, p. 33–53, 1956.

[7] DAHLQUIST, G. G. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics*, Springer, v. 3, n. 1, p. 27–43, 1963.

[8] DOERING, C. I.; LOPES, A. O. *Equações diferenciais ordinárias*. Rio de Janeiro: IMPA, 2010.

[9] ENDRE, S.; MAYERS, D. An introduction to numerical analysis. *Cambridge, UK*, 2003.

[10] FIGUEIREDO, D. G.; NEVES, A. F. *Equações diferenciais aplicadas*. Rio de Janeiro: IMPA, 1997.

[11] GERALD, C. F.; WHEATLEY, P. O. *Applied numerical analysis*. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.

[12] GUIDORIZZI, H. L. *Um curso de Cálculo-Volume 1*. [S.l.: s.n.], 2001.

[13] HENRICI, P. Discrete variable methods in ordinary differential equations. Wiley, 1962.

[14] KAPLAN, W. *Cálculo avançado*. [S.l.]: Edgard Blücher, 2006.

[15] KERNIGHAN, B. W.; RITCHIE, D. M. *C - A linguagem de programação*. [S.l.]: Campus, 1986.

[16] LAMBERT, J. D. *Computational methods in ordinary differential equations*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1973.

[17] LIMA, E. L. *Álgebra linear*. Rio de Janeiro: IMPA, 2008.

[18] LIMA, E. L. *Álgebra linear - Exercícios e soluções*. Rio de Janeiro: IMPA, 2009.

[19] MAKROGLOU, A.; LI, J.; KUANG, Y. Mathematical models and software tools for the glucose-insulin regulatory system and diabetes: an overview. *Applied Numerical Mathematics*, v. 56, p. 559–573, 2006.

[20] SCHILDT, H. *C completo e total*. [S.l.]: Makron Books, 1997.

[21] SCHWARZ, H. R. *Numerical analysis - A comprehensive introduction*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1989.

[22] SOTOMAYOR, J. *Lições de equações diferenciais ordinárias*. Rio de Janeiro: IMPA, 1979.

[23] STETTER, H. J. *Analysis of discretization methods for ordinary differential equations*. [S.l.]: Springer Tracts in Natural Philosophy, 1973.

[24] STOER, J.; BULIRSCH, R. *Introduction to numerical analysis*. [S.l.]: Springer, 1992.

[25] VETTERLING, W. T. et al. *Numerical recipes in C - The art of scientific computing*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1992.

[26] VETTERLING, W. T. et al. *Numerical recipes in Fortran - The art of scientific computing*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1992.

Índice