

Métodos Numéricos Computacionais

Implementações e Análise

Hugo Lispector

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Entendendo o Problema	1
2	Os Métodos: Fórmulas, Gráficos e Análise de Erros	2
2.1	Adams-Bashforth	3
2.2	Adams-Moulton	6
2.3	Runge-Kutta	9

1 Introdução

1.1 Entendendo o Problema

Nem sempre é possível resolver equações diferenciais analiticamente. Os métodos cujas implementações são apresentadas no relatório têm como objetivo resolver equações diferenciais numericamente. Trata-se de um problema de valor inicial, no qual são dados uma equação diferencial do tipo $y'(x) = f(x, y(x))$ e um ponto da função solução y na forma $y(x_0) = y_0$.

Já que estamos tratando de métodos numéricos, não teremos como saída uma função $y(x)$ que seja uma resposta exata satisfazendo as condições iniciais dadas. Teremos, no entanto, uma lista de pontos $y(x_i) = y_i$ estimados. O espaço entre x_i e x_{i+1} pode ser o quão pequeno se queira, desde que seja maior que zero. Torna-se claro que, quanto menor for esse Δx , melhor será a nossa aproximação em relação à suposta solução exata. Em compensação, quanto menor tal valor maior será o custo computacional, pois mais pontos

serão calculados. Dessa forma, o Δx deverá ser definido para cada execução de método.

Também torna-se necessário definir um x_f (x final) para cada execução de método numérico de forma que a execução tenha fim. Nas implementações desse exercício foi escolhido substituir a entrada do Δx pelo número de pontos n (e implicitamente calcular o Δx), já que é mais usual pensarmos em termos do número de pontos do que do intervalo entre eles. Tendo isso em vista, cada método implementado nesse exercício recebe como entrada os valores de: x_0 , y_0 , x_f , n e $y'(x, y(x))$. Respectivamente x e y iniciais, x final, número de pontos a serem calculados e a função y' .

2 Os Métodos: Fórmulas, Gráficos e Análise de Erros

Na parte final desse documento estão as implementações dos Métodos Numéricos das famílias Adams-Bashforth (com ordem de precisão de 1 até 8), Adams-Moulton (com ordem de precisão de 1 até 8) e Runge-Kutta (com ordem de precisão de 1 até 6). Nessa seção, para cada família, traz-se imagens comparativas de seus respectivos gráficos, análise estatística de seus erros e tabelas com seus pontos obtidos.

É importante lembrar que os métodos de Euler, Euler Inverso e Euler Aprimorado são casos particulares dessas famílias listadas. O método de Euler é o caso de ordem 1 tanto da família Adams-Bashforth como Runge-Kutta. O Euler Inverso e o aprimorado são, respectivamente, os casos de ordem 1 e 2 de Adams-Moulton. E uma versão de implementação do método de Euler Aprimorado também pode ser entendida como uma caso de ordem 2 da família Runge-Kutta.

A seguir estão apresentadas as fórmulas dos métodos e uma análise comparativa entre os erros, os gráficos e os pontos (numericamente falando) de cada família de métodos. É importante perceber que estamos comparando métodos com diferentes ordens de precisão. A ordem de precisão n influencia diretamente no erro, de forma que o erro da solução numérica do método é definido como $E(\Delta x) = c\Delta x^n$, sendo c uma constante. Em notação O-grande,

um método de ordem n pode ser dito como $O(\Delta x^n)$. Essa informação será verificada quando analisarmos os erros.

2.1 Adams-Bashforth

Fórmula do Método Adams-Bashforth

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + hf(t_n, y_n), & (\text{This is the Euler method}) \\
y_{n+2} &= y_{n+1} + h \left(\frac{3}{2}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{2}f(t_n, y_n) \right), \\
y_{n+3} &= y_{n+2} + h \left(\frac{23}{12}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{4}{3}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{5}{12}f(t_n, y_n) \right), \\
y_{n+4} &= y_{n+3} + h \left(\frac{55}{24}f(t_{n+3}, y_{n+3}) - \frac{59}{24}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{37}{24}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{3}{8}f(t_n, y_n) \right), \\
y_{n+5} &= y_{n+4} + h \left(\frac{1901}{720}f(t_{n+4}, y_{n+4}) - \frac{1387}{360}f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \frac{109}{30}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{637}{360}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{251}{720}f(t_n, y_n) \right).
\end{aligned}$$

Os coeficientes multiplicativos da fórmula de ordem k podem ser encontrados na seguinte tabela:

k	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7	β_8
1	1							
2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$						
3	$\frac{23}{12}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{5}{12}$					
4	$\frac{55}{24}$	$-\frac{59}{24}$	$\frac{37}{24}$	$-\frac{3}{8}$				
5	$\frac{1901}{720}$	$-\frac{1387}{360}$	$\frac{109}{30}$	$-\frac{637}{360}$	$\frac{251}{720}$			
6	$\frac{4277}{1440}$	$-\frac{2641}{480}$	$\frac{4991}{720}$	$-\frac{3649}{720}$	$\frac{959}{480}$	$-\frac{95}{288}$		
7	$\frac{198721}{60480}$	$-\frac{18637}{2520}$	$\frac{235183}{20160}$	$-\frac{10754}{945}$	$\frac{135713}{20160}$	$-\frac{5603}{2520}$	$\frac{19087}{60480}$	
8	$\frac{16083}{4480}$	$-\frac{1152169}{120960}$	$\frac{242653}{13440}$	$-\frac{296053}{13440}$	$\frac{2102243}{120960}$	$-\frac{115747}{13440}$	$\frac{32863}{13440}$	$-\frac{5257}{17280}$

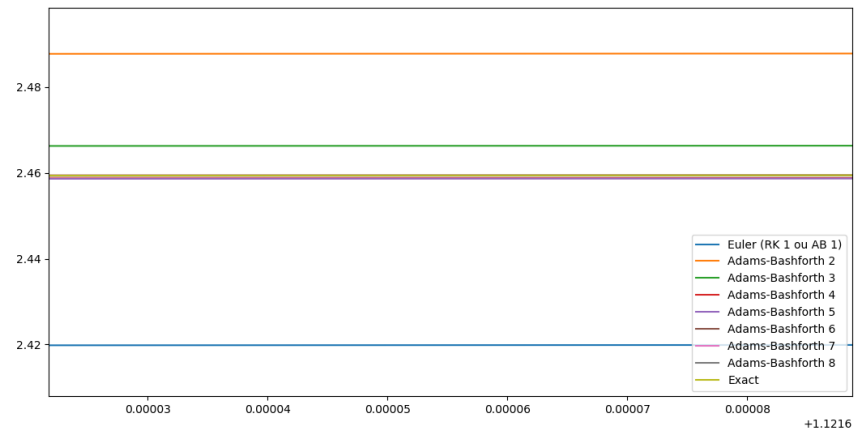
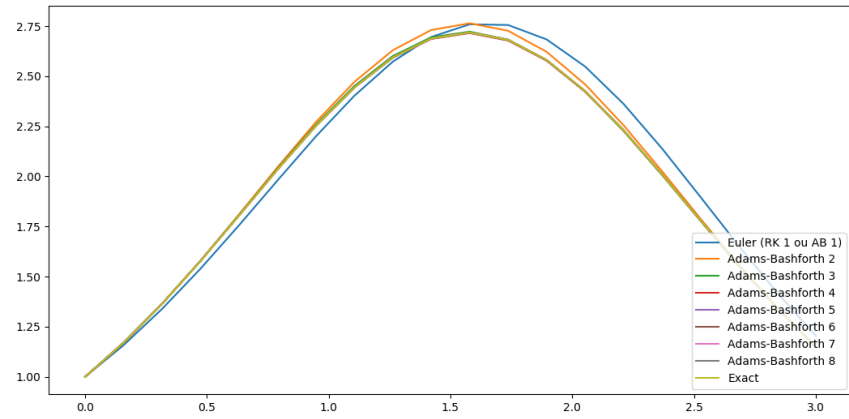
Percebe-se que os primeiros k pontos, sendo k a ordem de precisão do método dessa família, devem ser estimados para executar o algoritmo. Para isso foi escolhido usar o método Runge-Kutta

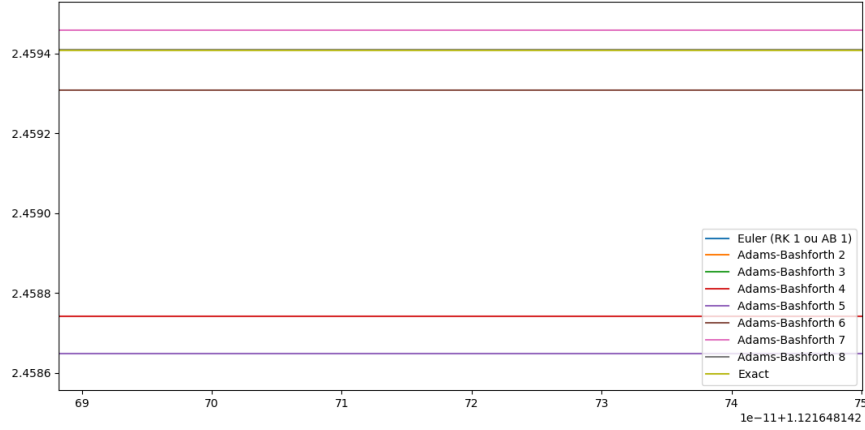
de ordem também k . Assim é preservada a ordem de precisão do método.

Análise comparativa da família Adams-Bashforth para o problema de valor inicial com $x_0 = 0$, $y_0 = 1$, $x_f = 3$, $n = 20$ e $y' = \cos(x) * y$ utilizando as implementações contidas na parte final desse relatório:

Método	Média do Erro	Desvio Padrão do Erro
Euler (RK 1 ou AB 1)	0.0656949116859	0.0392463786245
Adams-Bashforth 2	0.0192732424196	0.0166155612885
Adams-Bashforth 3	0.00292297457209	0.00222625128307
Adams-Bashforth 4	0.00110629204394	0.00117390823434
Adams-Bashforth 5	0.000378925711814	0.000354810962062
Adams-Bashforth 6	0.000150131229731	0.000157295519181
Adams-Bashforth 7	7.69408736258e-05	7.93104830317e-05
Adams-Bashforth 8	3.66289175732e-05	4.26079216891e-05

x	y euler (RK 1 ou AB 1)	y Adams-Bashforth 2	y Adams-Bashforth 3	y Adams-Bashforth 4	y Adams-Bashforth 5	y Adams-Bashforth 6	y Adams-Bashforth 7	y Adams-Bashforth 8	y exato
0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
0.157804736842	1.15780473684	1.1092228219	1.17024764886	1.17027408799	1.17027583627	1.17027583667	1.17027583667	1.17027583667	1.17027583667
0.315780473684	1.33844596438	1.3637520853	1.3641360429	1.36419652059	1.36419845137	1.3641983909	1.3641983909	1.3641983909	1.3641983909
0.4737604219526	1.53932940753	1.57961560879	1.57964922729	1.57961213268	1.57801540768	1.57801530191	1.57801530191	1.57801530191	1.57801530191
0.631737047368	1.75561986463	1.81020140501	1.80773794605	1.80490081005	1.80474632111	1.80474590566	1.80474590566	1.80474590566	1.80474590566
0.78971664211	1.97934048295	2.04525380681	2.03826644682	2.03416531593	2.0337943308	2.03395609862	2.03395609862	2.03395609862	2.03395609862
0.947368421053	2.19943827584	2.27193645284	2.25801170372	2.2521964883	2.25179209978	2.25207687544	2.25214237135	2.25214237135	2.25214237135
1.10526315780	2.40218760693	2.47135228676	2.45874304626	2.44328441822	2.4431355089	2.44376285403	2.44380813876	2.44380813876	2.44380813876
1.26315780474	2.57245196411	2.62942739275	2.60858170476	2.5923374733	2.59262670742	2.5936369673	2.59373829269	2.5936369673	2.5936369673
1.42105263158	2.69545813569	2.73842103966	2.69401856792	2.6857725701	2.68603305661	2.68810953493	2.68822076039	2.6880664611	2.6880664611
1.57804736842	2.7580383332	2.76483662523	2.72248520881	2.71531092293	2.71718324477	2.71842949405	2.71845164042	2.71845164042	2.71845164042
1.73684210526	2.75538760075	2.72654249652	2.68272143853	2.67770708048	2.6804343018	2.68155884623	2.68138931247	2.6811561769	2.6811561769
1.89471664211	2.68347902538	2.62158745568	2.57964398229	2.5772937323	2.58020437543	2.58010601767	2.58067798285	2.580614295483	2.580614295483
2.05263157805	2.54861107613	2.40952910495	2.42389318029	2.42313723351	2.42584712126	2.42622579238	2.42582078435	2.42582078435	2.42582078435
2.21052631579	2.3621387182	2.25546452909	2.22692290521	2.228084251	2.23091354829	2.23080264166	2.23052251939	2.2304408103	2.23052251939
2.36842105263	2.13947670926	2.02654616085	2.0060588996	2.00974093296	2.01095731956	2.01064018344	2.0104530333	2.01048080412	2.0104530333
2.52631578047	1.80770484139	1.780388162	1.77827008716	1.7809085617	1.78130671322	1.78090713931	1.78092607902	1.78100403932	1.78100403932
2.68421052632	1.65301667547	1.5577640635	1.55374113175	1.55565137357	1.55528711594	1.55503827809	1.55516896445	1.55516896445	1.55516896445
2.84210526316	1.41884297891	1.34210030288	1.3430824865	1.34370285923	1.3429788928	1.34280967012	1.3432059489	1.34310566735	1.34310566735
3.0	1.20478633666	1.10872372312	1.135265040953	1.15210637383	1.15318671449	1.15318615085	1.153167008183	1.153167008183	1.153167008183





2.2 Adams-Moulton

Fórmula dos Métodos Adams-Moulton

$$\begin{aligned}
 y_n &= y_{n-1} + hf(t_n, y_n), & (\text{This is the backward Euler method}) \\
 y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}h(f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_n, y_n)), & (\text{This is the trapezoidal rule}) \\
 y_{n+2} &= y_{n+1} + h \left(\frac{5}{12}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{2}{3}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{12}f(t_n, y_n) \right), \\
 y_{n+3} &= y_{n+2} + h \left(\frac{3}{8}f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \frac{19}{24}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{5}{24}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{1}{24}f(t_n, y_n) \right), \\
 y_{n+4} &= y_{n+3} + h \left(\frac{251}{720}f(t_{n+4}, y_{n+4}) + \frac{646}{720}f(t_{n+3}, y_{n+3}) - \frac{264}{720}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{106}{720}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{19}{720}f(t_n, y_n) \right).
 \end{aligned}$$

Os coeficientes multiplicativos da fórmula de ordem $k + 1$ podem ser encontrados na seguinte tabela:

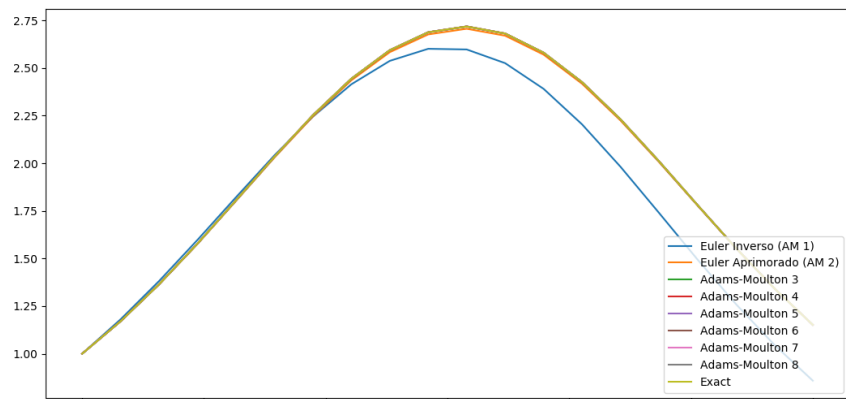
k	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7
0	1							
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						
2	$\frac{5}{12}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{12}$					
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{19}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{1}{24}$				
4	$\frac{251}{720}$	$\frac{323}{360}$	$-\frac{11}{30}$	$\frac{53}{360}$	$-\frac{19}{720}$			
5	$\frac{95}{288}$	$\frac{1427}{1440}$	$-\frac{133}{240}$	$\frac{241}{720}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{3}{160}$		
6	$\frac{19087}{60480}$	$\frac{2713}{2520}$	$-\frac{15487}{20160}$	$\frac{586}{945}$	$-\frac{6737}{20160}$	$\frac{263}{2520}$	$-\frac{863}{60480}$	
7	$\frac{5257}{17280}$	$\frac{139849}{120960}$	$-\frac{4511}{4480}$	$\frac{123133}{120960}$	$-\frac{88547}{120960}$	$\frac{1537}{4480}$	$-\frac{11351}{120960}$	$\frac{275}{24192}$

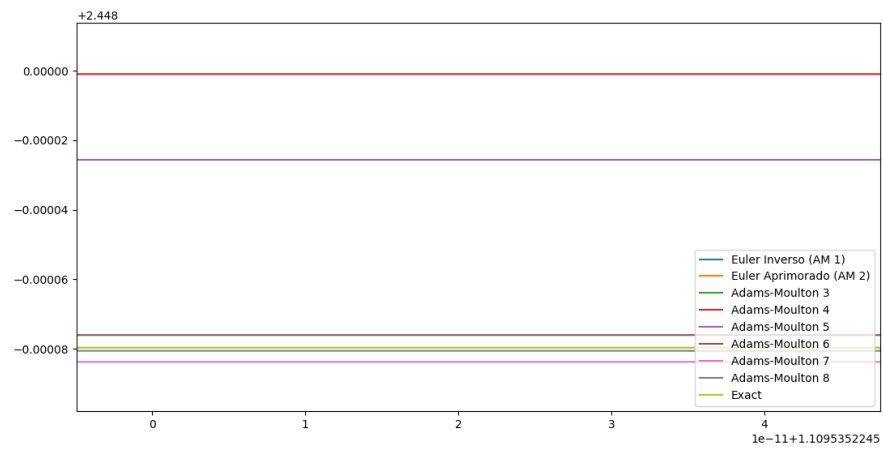
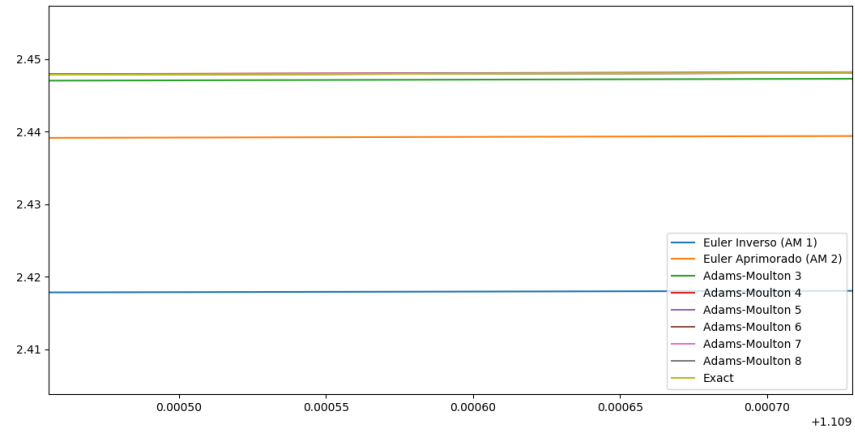
É importante notar que o y_{i+1} nos métodos de Adams-Moulton são definidos, também, em função dos próprios y_{i+1} . Diante dessa situação, para calcular algoritmicamente os pontos torna-se necessário realizar uma estimativa do próprio ponto com antecedência. Para manter a ordem de precisão do método compatível com o esperado, foi escolhido aproximar os pontos através do método Runge-Kutta de respectiva ordem.

Análise comparativa da família Adams-Moulton para o problema de valor inicial com $x_0 = 0$, $y_0 = 1$, $x_f = 3$, $n = 20$ e $y' = \cos(x) * y$ utilizando as implementações contidas na parte final desse relatório:

Método	Média do Erro	Desvio Padrão do Erro
Euler Inverso (AM 1)	0.138340007444	0.114763566621
Euler Aprimorado (AM 2)	0.00543755696108	0.00423500226462
Adams-Moulton 3	0.000357389705101	0.00025002600381
Adams-Moulton 4	8.53927995198e-05	8.79534953476e-05
Adams-Moulton 5	2.32434825008e-05	1.99939367257e-05
Adams-Moulton 6	7.02920263779e-06	7.42493052414e-06
Adams-Moulton 7	3.21871749741e-06	3.1188850292e-06
Adams-Moulton 8	1.1968682765e-06	1.27529333634e-06

x	y Euler Inverso (AM 1)	y Euler Aprimorado (AM 2)	y Adams-Moulton 3	y Adams-Moulton 4	y Adams-Moulton 5	y Adams-Moulton 6	y Adams-Moulton 7	y Adams-Moulton 8	y exato
0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
0.157894736842	1.18055122752	1.17010619227	1.17024764886	1.17021408799	1.17027586123	1.17027583667	1.17027583667	1.17027583667	1.17027583667
0.315789473684	1.363528632	1.36143447069	1.3640492344	1.36419652059	1.36419845137	1.3641983909	1.3641983909	1.3641983909	1.3641983909
0.473684210526	1.59772512778	1.576436014	1.57770744395	1.5779799557	1.57801540768	1.57801530101	1.57801530101	1.57801530101	1.57801530101
0.631578947368	1.8214547461	1.80181731356	1.80423821514	1.80472209393	1.80471542298	1.80474596566	1.80474596566	1.80474596566	1.80474596566
0.789473684211	2.04154353899	2.02928578572	2.0329709132	2.03304480204	2.03307814096	2.03305031736	2.03305069862	2.03305069862	2.03305069862
0.947368421053	2.24429295919	2.24548165038	2.25135935868	2.25216488157	2.25218094823	2.25214745252	2.25214998865	2.25214737135	2.2521424899976
1.10526315789	2.43455722727	2.43520366431	2.44304687992	2.44304570899	2.44302263598	2.44304725546	2.44306477453	2.44306477453	2.44306477453
1.26315789474	2.5375537885	2.58122904806	2.5928600839	2.59373453183	2.59367418068	2.59361035856	2.59360451679	2.59361035856	2.59361035856
1.42105263158	2.60184359636	2.67648117411	2.68745870697	2.68823732979	2.68809264213	2.68802302456	2.68802272193	2.6880242095	2.688023262558
1.57894736842	2.59749286391	2.76626350693	2.71871717403	2.71843711586	2.71823835	2.71817431264	2.71818189637	2.71819243739	2.71819152084382
1.73684210526	2.5258438854	2.65070077734	2.681108656	2.68140181021	2.68117540773	2.68112803575	2.68114316012	2.68115063681	2.68115063681
1.89473684211	2.3907163928	2.5703473545	2.58071189918	2.5807728545	2.58051497403	2.58049085843	2.58051016578	2.5805178756	2.5805178756
2.05263157895	2.20423597336	2.41744019975	2.42611204509	2.42592847534	2.42574624065	2.42574488987	2.42576310251	2.42576663125	2.42576299777492
2.21052631579	1.98158106342	2.22435852987	2.23060131596	2.2306505643	2.23054623066	2.23056022882	2.2305716301	2.23057277963	2.2305659801656282
2.36842105263	1.73981810635	2.00640724109	2.0108799044	2.01058329041	2.01053186584	2.01054990116	2.01055386047	2.0105517873	2.0105506901590773
2.52631578947	1.49512130863	1.77864612919	1.78121359025	1.78100456094	1.781010554	1.78102231612	1.7810184085	1.78101615505	1.781017151080465
2.68421052632	1.26094734207	1.5515978679	1.5552178262	1.5551062481	1.55523084825	1.5550206071	1.55519310196	1.55519311462	1.555194480293936
2.84210526316	1.04689159982	1.34296338861	1.34304339612	1.34313256316	1.34318810609	1.34317307822	1.34316333059	1.34316583376	1.3431672618463457
3.0	0.858565899824	1.15175928181	1.15131393936	1.15154191407	1.15159138933	1.15156527954	1.15155768841	1.15156231921	1.151562863514535





2.3 Runge-Kutta

Fórmula do Método Runge-Kutta 4

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

A generalização da família de métodos Runge-Kutta é dada pela seguinte imagem:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i,$$

onde

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_n, y_n), \\
k_2 &= f(t_n + c_2 h, y_n + a_{21} h k_1), \\
k_3 &= f(t_n + c_3 h, y_n + a_{31} h k_1 + a_{32} h k_2), \\
&\vdots \\
k_s &= f(t_n + c_s h, y_n + a_{s1} h k_1 + a_{s2} h k_2 + \cdots + a_{s,s-1} h k_{s-1}).
\end{aligned}$$

Análise comparativa da família Runge-Kutta para o problema de valor inicial com $x_0 = 0$, $y_0 = 1$, $x_f = 3$, $n = 20$ e $y' = \cos(x) * y$ utilizando as implementações contidas na parte final desse relatório:

Método	Média do Erro	Desvio Padrão do Erro
Euler (RK 1 ou AB 1)	0.0656949116859	0.0392463786245
Euler Aprimorado 2 (RK 2)	0.00796571285262	0.00419391982569
Runge-Kutta 3	0.000137235021532	7.46517798906e-05
Runge-Kutta 4	4.81853370235e-06	2.08649495235e-06
Runge-Kutta 5	1.31486408077e-07	5.50241719002e-08
Runge-Kutta 6	2.77150835147e-08	1.56641320517e-08

x	y Euler (RK 1 ou AB 1)	y Euler Aprimorado 2 (RK 2)	y Runge-Kutta 3	y Runge-Kutta 4	y Runge-Kutta 5	y Runge-Kutta 6	y exato
0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
0.157894736842	1.15789473684	1.16922296219	1.17024764886	1.17027498799	1.17027586123	1.17027583667	1.1702758401819866
0.315789473684	1.33844596438	1.36180619765	1.3641369429	1.36419652059	1.36419845137	1.3641983909	1.3641983999060567
0.473684210526	1.53932940753	1.57403366816	1.57792017433	1.57801233268	1.57801540768	1.57801530191	1.5780153180286305
0.631578947368	1.75561986463	1.79900384347	1.80462296474	1.80474192848	1.80474612111	1.80474596566	1.8047459896551385
0.789473684211	1.97934948295	2.0263967557	2.03381759932	2.03395112118	2.03395630109	2.03395609662	2.033956130181713
0.947368421053	2.19943827584	2.24284109526	2.252060607829	2.25213660179	2.25214261086	2.25214237135	2.252142409209976
1.10526315789	2.40218769603	2.43302838952	2.44375507863	2.44386237383	2.44386900914	2.44386874812	2.443868790475302
1.26315789474	2.57245196411	2.58153995916	2.59354029566	2.59360471575	2.59361178276	2.59361151817	2.5936115631520904
1.42105263158	2.69544581569	2.67511255456	2.68801927158	2.68802495348	2.68803225858	2.68803200725	2.688032053262558
1.57894736842	2.7589383332	2.70485735982	2.718246956	2.71818435461	2.71819170935	2.718191484	2.71819152984382
1.73684210526	2.75538760075	2.6678672862	2.68127597406	2.68114354772	2.68115078471	2.68115059194	2.6811506366812736
1.89473684211	2.68347902538	2.56776290046	2.59070188394	2.59050685596	2.59051384253	2.59051368213	2.5905137247925427
2.05263157895	2.54861107613	2.41401735776	2.42599811975	2.42575606537	2.42576269282	2.42576255844	2.42576259777492
2.21052631579	2.3621307102	2.22025348883	2.23083065018	2.23056353555	2.23056968225	2.23056956365	2.2305695980366282
2.36842105263	2.13947670026	2.00198801625	2.01081266118	2.01054527887	2.01055077623	2.01055066245	2.0105506901590773
2.52631578947	1.89770484319	1.77438863648	1.78125715713	1.78101261288	1.78101725089	1.78101713336	1.7810171531080465
2.68421052632	1.65301667547	1.55051592771	1.5539583922	1.5519137231	1.5519495425	1.5519482878	1.551948402935036
2.84210526316	1.41884207891	1.34029775813	1.34332052608	1.34316497266	1.34316739051	1.34316725757	1.3431672618463457
3.0	1.20478633666	1.1502445616	1.15166812727	1.15156168826	1.15156297397	1.15156283748	1.151562836514935

