Métodos de Passo Múltiplo Linear e Métodos Preditor-corretor

Annanda Dandi de Freitas Sousa [1], **Yuri de Jesus Lopes de Abreu** [1]

[1]Departamento de Ciência da Computação – Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

{annanda.sousa, yuh.lopes}@gmail.com

Resumo. *Este trabalho discorre sobre os métodos numéricos de passo múltiplo e método preditor-corretor.*

1. Método de Passo Múltiplo Linear

Nos métodos de passo único, o valor de y_{k+1} dependia somente de informação do ponto anterior x_k. É razoável pensar que ganha-se maior acurácia se usarmos informações de vários pontos anteriores, $x_k, x_{k-1}, \cdots$, fossem usadas. Métodos de passo múltiplo funcionam assim.

Métodos como o Euler referem-se somente a um ponto anterior e a derivada da função nele para determinar o valor do passo atual. O método de Runge-Kutta, por sua vez, toma passos intermediários para obter um método de ordem maior, mas descarta todas as informações anteriores antes de tomar um próximo passo.

Métodos de passo múltiplo ganham eficiência ao manter e usar informações de passos anteriores ao invés de descartá-las. Consequentemente, esses métodos referem-se a vários pontos anteriores e as derivadas nesses pontos. No caso linear, o método de passo múltiplo usa uma combinação linear dos pontos e derivadas anteriores.

1.1. Ideia Inicial

Métodos para equações diferenciais ordinais (EDO) aproximam problemas de valor inicial da forma

$$y' = f(t, y), \qquad y(t_0) = y_0 \tag{1}$$

O resultado disso é que se tem aproximações para o valor de $y(t)$ em tempos discretos t_i.

$$y_i \approx y(t_i), \text{ onde } t_i = t_0 + ih \tag{2}$$

Onde, h é o intervalo de tempo da malha e i é um inteiro que representa o número do passo.

Métodos de passo múltiplo usam informação de s passos anteriores para calcular o próximo valor. Em particular, um método linear usa uma combinação linear de y_i e $f(t_i, y_i)$ para calcular o valor de y para o passo desejado.

Podemos escrever um método de passo múltiplo linear como:

$$
\begin{aligned}
&y_{n+s} + a_{s-1}y_{n+s-1} + a_{s-2}y_{n+s-2} + \cdots + a_0 y_n \\
&\quad = h\left(b_s f(t_{n+s}, y_{n+s}) + b_{s-1} f(t_{n+s-1}, y_{n+s-1}) + \cdots + b_0 f(t_n, y_n)\right)
\end{aligned}
\tag{3}
$$

Os coeficientes $a_0, \cdots, a_{s-1}$ e $b_0, \cdots, b_s$ determinam o método. Ao construir o método deve-se escolher esses coeficientes balanceando a necessidade de conseguir uma boa aproximação para a solução, contra o desejo de se ter um método de fácil aplicação. Por isso, geralmente muitos dos coeficientes são zeros para simplificar o método.

Pode-se também distinguir entre métodos explícitos e implícitos. Se o coeficiente $b_s = 0$, então o método é dito explícito, pois a fórmula pode calcular diretamente y_{n+s}. Se $b_s \neq 0$ o método é implícito, pois o valor de y_{n+s} depende do valor de $f(t_{n+s}, y_{n+s})$ e, a equação deve ser resolvida para y_{n+s}. Neste caso, pode-se usar um método iterativo, com o Método de Newton, para encontrar a resposta da fórmula implícita.

Podemos também usar um método explícito de passo múltiplo para predizer o valor de y_{n+s}. Após isso, usamos esse valor numa fórmula implícita para corrigi-lo (lembremos do erro numérico). O resultado disso é um método preditor-corretor (essa classe de método será discutida adiante).

1.2. Derivando uma Classe de Métodos

Uma classe importante de métodos de passo múltiplo (MPM) origina-se da seguinte abordagem a seguir. Suponha o problema de valor inicial (PVI):

$$
y' = f(x, y), \qquad a \leq x, \qquad y(a) = \hat{y} \tag{4}
$$

Se integrarmos (4) para a solução de $y(x)$ no intervalo $[x_k, x_{k+1}]$ teremos

$$
y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} y'(x)dx = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))dx \approx \int_{x_k}^{x_{k+1}} p(x)dx \tag{5}
$$

Onde assumimos que o termo $p(x)$ é um polinômio que aproxima $f(x, y(x))$. Para encontrarmos esse polinômio, suponha que $y_k, y_{k-1}, \cdots, y_{k-N}$ são aproximações da solução nos pontos $x_k, x_{k-1}, \cdots, x_{k-N}$. Assumimos aqui que os x_i são igualmente espaçados com espaçamento h, como já estamos habituados neste curso. Então, temos que $f_i \equiv f(x_i, y_i),\ i = k, k-1, \cdots, k-N$, são aproximações de $f(x, y(x))$ nos pontos $x_k, x_{k-1}, \cdots, x_{k-N}$ e, tomamos p para ser a **interpolação polinomial** para o conjunto de dados $(x_i, f_i),\ i = k, k-1, \cdots, k-N$. Então, p é o polinômio de grau N que satisfaz $p(x_i) = f_i,\ i = k, k-1, \cdots, k-N$.

A princípio, podemos integrar este polinômio explicitamente para ter o método

$$
y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} p(x)dx \tag{6}
$$

1.3. Métodos Adams-Bashforth

Partindo de (6), podemos ver que se $N = 0$, então temos o método de Euler. Se $N = 1$, então p é uma função linear que interpola os pontos (x_{k-1}, f_{k-1}) e (x_k, f_k). Podemos obter isso e outras fórmulas usando interpolação polinomial. Assim, obtemos:

Método Adams–Bashforth de passo duplo

$$\text{Para } N = 1: \qquad y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left(3f_k - f_{k-1}\right) \tag{7}$$

Usando a notação da seção 1.1, que estamos mais acostuamados, podemos rescrever esse método também para $N = 2$ e $N = 3$.

Método Adams–Bashforth de passo duplo

$$\text{Para } N = 1: \qquad y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{3}{2}f(t_n, y_n) - \frac{1}{2}f(t_{n-1}, y_{n-1})\right) \tag{8}$$

Método Adams–Bashforth de passo triplo

$$\text{Para } N = 2: \qquad y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{23}{12}f(t_n, y_n) - \frac{4}{3}f(t_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{5}{12}f(t_{n-2}, y_{n-2})\right) \tag{9}$$

Método Adams–Bashforth de passo quádruplo

$$\text{Para } N = 3: \qquad y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{55}{24}f(t_n, y_n) - \frac{59}{24}f(t_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{37}{24}f(t_{n-2}, y_{n-2}) - \frac{3}{8}f(t_{n-3}, y_{n-3})\right) \tag{10}$$

Uma observação interessante é que para $N = 0$ esse método se torna o Método de Euler Explícito.

1.4. Métodos Adams-Moulton

Métodos Adams-Bashforth foram obtidos usando informações já computadas em x_k e pontos anteriores. A princípio, podemos formar o polinômio de interpolação usando pontos adiante também. A maneira mais simples de fazer isso é usar os pontos $x_{k+1}, x_k, \cdots, x_{k-N}$ e, formar o polinômio de interpolação de grau $N + 1$ que satisfaz $p(x_i) = f_i,\ i = k + 1, k, \cdots, k - N$. Isso cria uma classe de métodos chamados de Adams-Moulton. Se $N = 0$, então p é uma função linear que interpola (x_k, f_k) e (x_{k+1}, f_{k+1}) e, o método corresponde é

Método Adams–Moulton de passo duplo

$$\text{Para } N = 0: \\ y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left(f_{k+1} + f_k\right) \tag{11}$$

Da mesma maneira que fizemos os os métodos Adams-Bashforth, podemos rescrever esses métodos com a notação que estamos acostumados.

Método Adams–Moulton de passo duplo

$$\text{Para } N = 0: \\ y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{1}{2}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{1}{2}f(t_n, y_n)\right) \tag{12}$$

Método Adams–Moulton de passo triplo

$$\text{Para } N = 1: \\ y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{5}{12}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{2}{3}f(t_n, y_n) - \frac{1}{12}f(t_{n-1}, y_{n-1})\right) \tag{13}$$

Método Adams–Moulton de passo quádruplo

$$\text{Para } N = 2: \\ y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{3}{8}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{19}{24}f(t_n, y_n) - \frac{5}{24}f(t_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{1}{24}f(t_{n-2}, y_{n-2})\right) \tag{14}$$

Uma observação interessante é que para $N = -1$ esse método se torna o Método de Euler Implícito e, para $N = 0$ esse método se torna a Regra do Trapézio. Além disso, os métodos Adams-Moulton são todos implícitos.

1.5. Problema de Inicialização

Repare que, para os primeiros passos precisamos de dados que não temos, pois temos apenas o valor do ponto inicial quando estamos lidando com um PVI. Se quisermos usar o método Adams-Bashforth quarta ordem (passo quádruplo) em $n = 0$, por exemplo, temos apenas o valor de y_0, mas precisamos de informação em x_{-1}, x_{-2} e x_{-3}. Essas informações, nesse momento, não existem. Com isso, vemos que métodos de passo múltiplo precisam de uma ajuda para se iniciarem. A tática mais comum é usar um método de passo único, como Runge-Kutta, de mesma ordem do método de passo múltiplo que estamos usando, até que se tenha calculados valores para iniciar o método de passo múltiplo. É importante que os valores iniciais obtidos sejam calculados por um método de mesma ordem de acurácia que o de passo múltiplo a ser usado.

2. Métodos Preditor-corretor

Um uso comum de métodos explícitos e implícitos combinados é em algoritmos preditores-corretores para integração de ODEs. Inicialmente, um método explícito é usado para predizer um passo a ser dado aproximadamente. Então, o passo ”corretor”é usado em seguida para refinar (corrigir) a aproximação inicial usando o valor predizido da função e, outro método (geralmente um método implícito) para interpolar o valor desconhecido da função no mesmo ponto subsequente.

2.1. Método de Euler com Regra do Trapézio

Um exemplo de método preditor-corretor é o Método de Euler (preditor) com Regra do Trapézio (corretor). Para entender isso, suponha o PVI descrito em (1) e, denotemos o tamanho do passo por h. A princípio, a etapa de preditor do algoritmo, partindo do valor atual y_i, calcula a aproximação inicial $\tilde{y}_{i+1}$ pelo Método de Euler.

$$\tilde{y}_{i+1} = y_i + hf\left(t_i, y_i\right) \tag{15}$$

Em seguida, a etapa corretora do algorimo melhora o chute inicial usando a Regra do Trapézio.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h\left(f\left(t_i, y_i\right) + f\left(t_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}\right)\right) \tag{16}$$

Finalmente, este valor y_{i+1} é usado como próximo passo.

2.2. Método Adams-Bashforth com Adams-Moulton

Usando os métodos de passo múltiplo que estudamos, podemos escrever um método preditor-corretor da forma usando Adams-Bashforth e Adams-Moulton, ambos com mesma ordem. Primeiro, o método Adams-Bashforth calcula uma aproximação de $\tilde{y}_{n+3}$. Para isso, temos, a princípio, os valores y_{n+2}, y_{n+1} e y_n. Podemos calcular:

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + h\left(\frac{23}{12}f(t_n, y_n) - \frac{4}{3}f(t_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{5}{12}f(t_{n-2}, y_{n-2})\right) \tag{17}$$

Então, usamos o Adams-Moulton de quarta ordem para o passo corretor:

$$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{5}{12}f(t_{n+1}, \tilde{y}_{n+1}) + \frac{2}{3}f(t_n, y_n) - \frac{1}{12}f(t_{n-1}, y_{n-1})\right) \tag{18}$$

2.3. Mais Etapas

Além desses preditores-corretores básicos, podemos adicionar mais etapas para tentar atingir uma aproximação melhor. Tomando o exemplo do Método de Euler com Regra do Trapézio, por exemplo, podemos fazer:

$$\tilde{y}_{i+1} = y_i + hf\left(t_i, y_i\right) \tag{19}$$

$$\hat{y}_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h\left(f\left(t_i, y_i\right) + f\left(t_{i+1}, \tilde{y}_{i+1}\right)\right) \tag{20}$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h\left(f\left(t_i, y_i\right) + f\left(t_{i+1}, \hat{y}_{i+1}\right)\right) \tag{21}$$

3. Bibliografia

Este trabalho foi baseado no livro [Golub and Ortega 1991].

Referências

Golub, G. H. and Ortega, J. M. (1991). *Scientific Computing and Differential Equations: An Introduction to Numerical Methods*. Academic Press, 1st edition.