

# Introdução aos Métodos Discretos

Luis Paulo S. Barra

Departamento de Mecânica Aplicada e Computacional  
Universidade Federal de Juiz de Fora

Programa de Pós-Graduação em  
Modelagem Computacional



Universidade Federal de Juiz de Fora



## Parte III

### Problemas de Valor Inicial

# Problemas de Valor Inicial

## Definição do Problema

## Obtenção de Métodos por Aproximação das Derivadas

Método de Euler

## Obtenção de Métodos por Integração Numérica

Métodos de Adams

## Métodos Runge-Kutta

Método de Euler Modificado

## Condicionamento dos Problemas

## Problemas *Stiff*

# Problema de Valor Inicial

## Definição do Problema

Deseja-se determinar uma aproximação para  $\mathbf{y}(t)$  tal que:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} &= \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \text{ para } 0 < t \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{a}\end{aligned}$$

Se assume que as devidas derivadas de  $\mathbf{y}(t)$  são definidas e contínuas.

# Problemas Modelo

## Decaimento Radioativo

A massa de uma substância radioativa decai proporcionalmente a quantidade atual, logo:

$$\frac{dy}{dt} = -ry(t), \text{ para } 0 < t$$

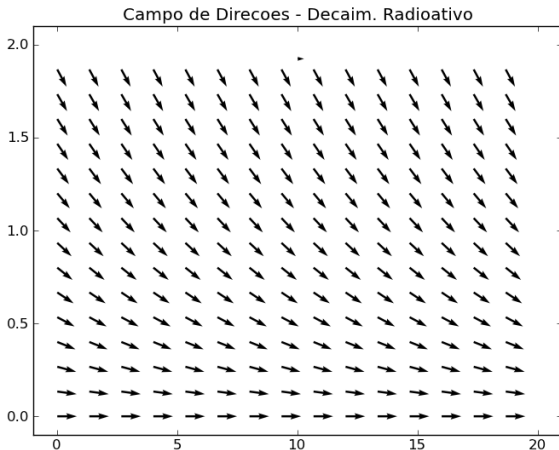
Com uma quantidade inicial  $a$  da substância, a condição inicial fica:

$$y(0) = a$$

Pode-se verificar por substituição que a solução exata é:

$$y(t) = \alpha e^{-rt}$$

# Campo de Direções - Decaimento Radioativo



$$\frac{dy}{dt} = f(y) \text{ com } f(y) = -y$$

O valor  $y(0) = 0$  é um ponto de equilíbrio estável.

# Problemas Modelo

## Crescimento Logístico

Admitindo que a taxa de crescimento líquido da população,  $r$ , diminui linearmente com o aumento da mesma devido à quantidade limitada de alimento disponível, pode se obter:

$$\frac{dy}{dt} = r(t)y(t), \text{ para } 0 < t$$

onde  $r(t) = a - by(t)$ .

# Problemas Modelo

## Crescimento Logístico

Admitindo que a taxa de crescimento líquido da população,  $r$ , diminui linearmente com o aumento da mesma devido à quantidade limitada de alimento disponível, pode se obter:

$$\frac{dy}{dt} = r(t)y(t), \text{ para } 0 < t$$

onde  $r(t) = a - by(t)$ .

De outra forma:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$$



# Problemas Modelo

## Crescimento Logístico

Admitindo que a taxa de crescimento líquido da população,  $r$ , diminui linearmente com o aumento da mesma devido à quantidade limitada de alimento disponível, pode se obter:

$$\frac{dy}{dt} = r(t)y(t), \text{ para } 0 < t$$

onde  $r(t) = a - by(t)$ .

De outra forma:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) = [a - by(t)].y(t)$$

Tomando  $a, b > 0$  constantes e  $y(0) = P_0$  a solução analítica é:

$$y(t) = \frac{P_0 a e^{at}}{a + P_0 b (e^{at} - 1)}$$

# Problemas Modelo

## Crescimento Logístico

Admitindo que a taxa de crescimento líquido da população,  $r$ , diminui linearmente com o aumento da mesma devido à quantidade limitada de alimento disponível, pode se obter:

$$\frac{dy}{dt} = r(t)y(t), \quad \text{para } 0 < t$$

onde  $r(t) = a - by(t)$ .

De outra forma:

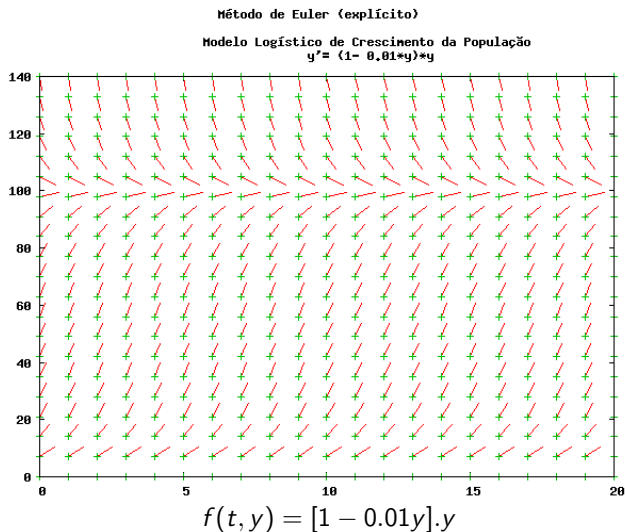
$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) = [a - by(t)].y(t)$$

Tomando  $a, b > 0$  constantes e  $y(0) = P_0$  a solução analítica é:

$$y(t) = \frac{P_0 a e^{at}}{a + P_0 b (e^{at} - 1)}$$

EDO de primeira ordem, não-linear devido a presença de  $y^2$  em  $f(t, y(t))$ .

# Campo de Direções - Crescimento Logístico



$y = 0$  e  $y = 100$  são pontos de equilíbrio, mas só o segundo é assintoticamente estável.

# Problemas Modelo

## Segunda Lei de Newton

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = F(t, y, y'),$$

# Problemas Modelo

## Segunda Lei de Newton

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = F(t, y, y'),$$

Onde a massa  $m > 0$  é constante e  $F$  é a força aplicada.

# Problemas Modelo

## Segunda Lei de Newton

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = F(t, y, y'),$$

Onde a massa  $m > 0$  é constante e  $F$  é a força aplicada.  
Assumindo a posição e a velocidades iniciais conhecidas:

$$y(0) = \alpha \quad \text{e} \quad y'(0) = \beta$$

A EDO de segunda ordem é linear se  $F$  depender linearmente de  $y$  e  $y'$ .

# Problemas Modelo

## Segunda Lei de Newton

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = F(t, y, y'),$$

Onde a massa  $m > 0$  é constante e  $F$  é a força aplicada.  
Assumindo a posição e a velocidades iniciais conhecidas:

$$y(0) = \alpha \quad \text{e} \quad y'(0) = \beta$$

A EDO de segunda ordem é linear se  $F$  depender linearmente de  $y$  e  $y'$ .  
Alternativamente, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} y_1 &= y \\ y_2 &= y' \end{aligned}$$

# Problemas Modelo

## Segunda Lei de Newton

Derivando ambas em relação à  $t$ , obtém-se:

$$\begin{aligned}y_1' &= y_2 \\y_2' &= \frac{1}{m}F(t, y_1, y_2)\end{aligned}$$



# Problemas Modelo

## Segunda Lei de Newton

Derivando ambas em relação à  $t$ , obtém-se:

$$\begin{aligned}y_1' &= y_2 \\ y_2' &= \frac{1}{m}F(t, y_1, y_2)\end{aligned}$$

Matricialmente, pode-se escrever:

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \text{ para } 0 < t \quad \text{e com} \quad \mathbf{y}(0) = \begin{Bmatrix} \alpha \\ \beta \end{Bmatrix}$$

e o vetor  $\mathbf{f}$  é definido como:

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) = \begin{Bmatrix} y_2 \\ \frac{1}{m}F(t, y_1, y_2) \end{Bmatrix}$$

# Problemas Modelo

## Predador-Presa

População da Presa,  $x$ , hipóteses :

- ▶ a população da presa isolada cresce proporcionalmente à sua população.
- ▶ Morte das presas pelos predadores depende do encontro entre os indivíduos sendo proporcional ao produto das populações,  $xy$ .

# Problemas Modelo

## Predador-Presa

População da Presa,  $x$ , hipóteses :

- ▶ a população da presa isolada cresce proporcionalmente à sua população.
- ▶ Morte das presas pelos predadores depende do encontro entre os indivíduos sendo proporcional ao produto das populações,  $xy$ .

Logo:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x + \beta xy \quad \text{com} \quad \alpha > 0 \quad \text{e} \quad \beta < 0$$

# Problemas Modelo

## Predador-Presa

População da Presa,  $x$ , hipóteses :

- ▶ a população da presa isolada cresce proporcionalmente à sua população.
- ▶ Morte das presas pelos predadores depende do encontro entre os indivíduos sendo proporcional ao produto das populações,  $xy$ .

Logo:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x + \beta xy \quad \text{com} \quad \alpha > 0 \quad \text{e} \quad \beta < 0$$

População dos Predadores,  $y$ , hipóteses :

- ▶ Morte por causas naturais, proporcional a população;
- ▶ Crescimento da população proporcional ao encontro de alimento.

# Problemas Modelo

## Predador-Presa

População da Presa,  $x$ , hipóteses :

- ▶ a população da presa isolada cresce proporcionalmente à sua população.
- ▶ Morte das presas pelos predadores depende do encontro entre os indivíduos sendo proporcional ao produto das populações,  $xy$ .

Logo:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x + \beta xy \quad \text{com} \quad \alpha > 0 \quad \text{e} \quad \beta < 0$$

População dos Predadores,  $y$ , hipóteses :

- ▶ Morte por causas naturais, proporcional a população;
- ▶ Crescimento da população proporcional ao encontro de alimento.

Logo:

$$\frac{dy}{dt} = \gamma y + \delta xy \quad \text{com} \quad \gamma < 0 \quad \text{e} \quad \delta > 0$$

# Problemas Modelo

O modelo descrito pelo sistema de duas EDO's não-lineares resultante é conhecido como equações de *Lotka-Volterra*.

## Predador-Presa

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \alpha x + \beta xy \\ \frac{dy}{dt} &= \gamma y + \delta xy\end{aligned}$$

# Problemas Modelo

O modelo descrito pelo sistema de duas EDO's não-lineares resultante é conhecido como equações de *Lotka-Volterra*.

## Predador-Presa

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \alpha x + \beta xy \\ \frac{dy}{dt} &= \gamma y + \delta xy\end{aligned}$$

A definição do problema se completa com o estabelecimento de valores para os parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$  e  $\gamma$  além da imposição das duas condições iniciais:

$$x(0) = x_0 \quad \text{e} \quad y(0) = y_0$$

# Problemas Modelo

O modelo descrito pelo sistema de duas EDO's não-lineares resultante é conhecido como equações de *Lotka-Volterra*.

## Predador-Presa

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \alpha x + \beta xy \\ \frac{dy}{dt} &= \gamma y + \delta xy\end{aligned}$$

A definição do problema se completa com o estabelecimento de valores para os parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$  e  $\gamma$  além da imposição das duas condições iniciais:

$$x(0) = x_0 \quad \text{e} \quad y(0) = y_0$$

Não existe solução analítica (não nula) conhecida para este problema.



# Problemas de Valor Inicial

Definição do Problema

Obtenção de Métodos por Aproximação das Derivadas  
Método de Euler

Obtenção de Métodos por Integração Numérica  
Métodos de Adams

Métodos Runge-Kutta  
Método de Euler Modificado

Condicionamento dos Problemas

Problemas *Stiff*

# Aproximação de Derivadas

Inicialmente considera-se a solução do problema escalar, na forma:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= f(t, y), \text{ para } 0 < t \\ y(0) &= \alpha\end{aligned}\tag{1}$$

# Aproximação de Derivadas

Inicialmente considera-se a solução do problema escalar, na forma:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= f(t, y), \text{ para } 0 < t \\ y(0) &= \alpha\end{aligned}\tag{1}$$

## Primeiro Passo

Definição da malha (uniforme) de pontos,  $0 \leq t \leq T$ :

$$t_j = jk, \quad \text{para } j = 0, 1, 2, \dots, M$$

Como  $t_M = T$  tem-se:

$$k = \frac{T}{M}$$

# Aproximação de Derivadas

Inicialmente considera-se a solução do problema escalar, na forma:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= f(t, y), \text{ para } 0 < t \\ y(0) &= \alpha\end{aligned}\tag{1}$$

## Primeiro Passo

Definição da malha (uniforme) de pontos,  $0 \leq t \leq T$ :

$$t_j = jk, \quad \text{para } j = 0, 1, 2, \dots, M$$

Como  $t_M = T$  tem-se:

$$k = \frac{T}{M}$$

## Segundo Passo

Avaliação da equação diferencial em  $t = t_j$ :

$$y'(t_j) = f(t_j, y(t_j))$$

# Passos para a Obtenção

## Terceiro Passo

Substituição da derivada por uma expressão de diferenças finitas.

Por exemplo, a expansão de primeira ordem em diferenças progressivas:

$$y'(t_j) = \frac{y(t_{j+1}) - y(t_j)}{k} + \tau_j,$$

onde

$$\tau_j = -\frac{k}{2}y''(\eta_j)$$

e  $t_j < \eta_j < t_{j+1}$ .

# Passos para a Obtenção

## Terceiro Passo

Substituição da derivada por uma expressão de diferenças finitas.

Por exemplo, a expansão de primeira ordem em diferenças progressivas:

$$y'(t_j) = \frac{y(t_{j+1}) - y(t_j)}{k} + \tau_j,$$

onde

$$\tau_j = -\frac{k}{2}y''(\eta_j)$$

e  $t_j < \eta_j < t_{j+1}$ . Substituindo na equação 1:

$$y(t_{j+1}) - y(t_j) + k\tau_j = kf(t_j, y(t_j))$$

# Passos para a Obtenção

**Consistência** A aproximação é dita *consistente* se o erro de truncamento tende a zero a medida que o passo decresce.

Apenas a consistência não implica precisão na solução do método !

# Passos para a Obtenção

**Consistência** A aproximação é dita *consistente* se o erro de truncamento tende a zero a medida que o passo decresce.

Apenas a consistência não implica precisão na solução do método !

## Quarto Passo

Descartar o erro de truncamento ( $k\tau_j$ ):

$$y_{j+1} = y_j + kf(t_j, y_j), \quad \text{para} \quad j = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

e com a condição inicial, tem-se:

$$y_0 = \alpha$$



# Passos para a Obtenção

**Consistência** A aproximação é dita *consistente* se o erro de truncamento tende a zero a medida que o passo decresce.

Apenas a consistência não implica precisão na solução do método !

## Quarto Passo

Descartar o erro de truncamento ( $k\tau_j$ ):

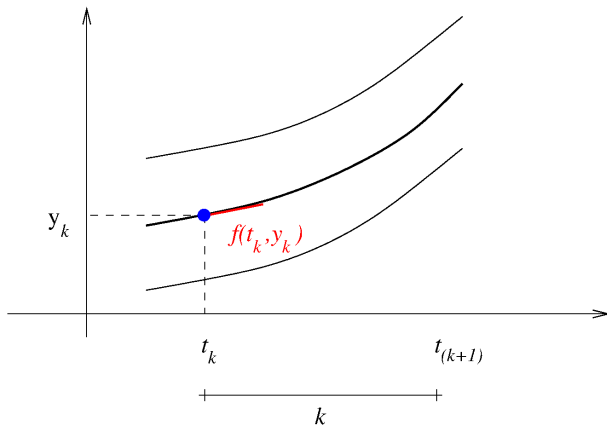
$$y_{j+1} = y_j + kf(t_j, y_j), \quad \text{para} \quad j = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

e com a condição inicial, tem-se:

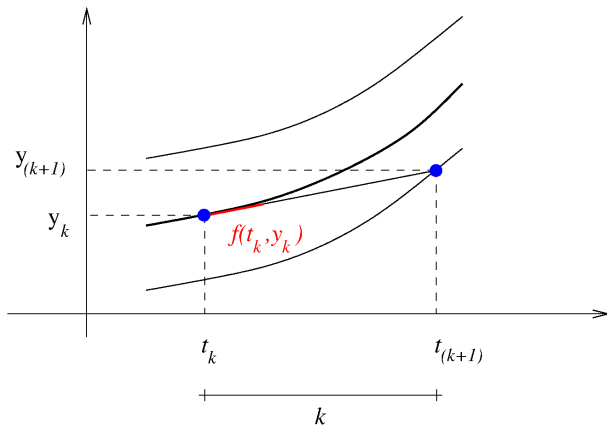
$$y_0 = \alpha$$

A partir da escolha feita obteve-se o método de Euler (explícito).

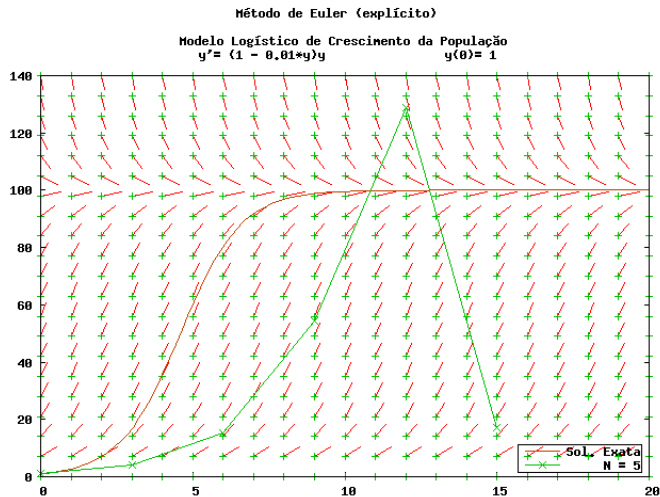
# Método de Euler - Interpretação Geométrica



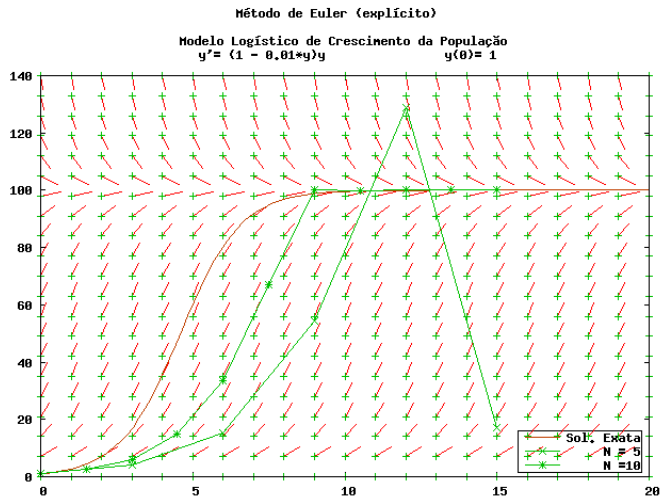
# Método de Euler - Interpretação Geométrica



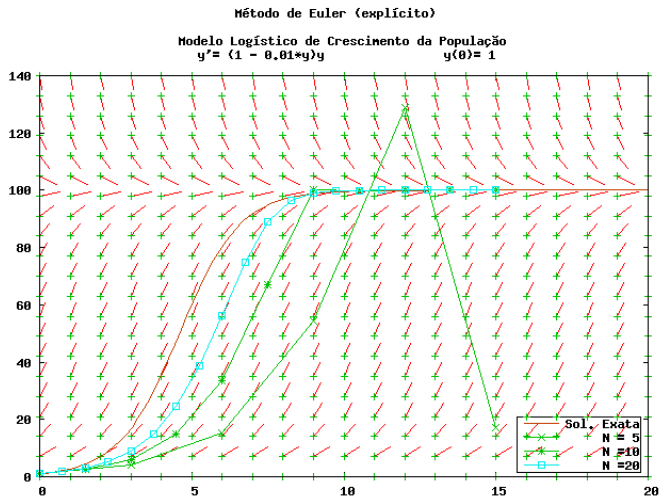
# Euler - Cresc. Logístico



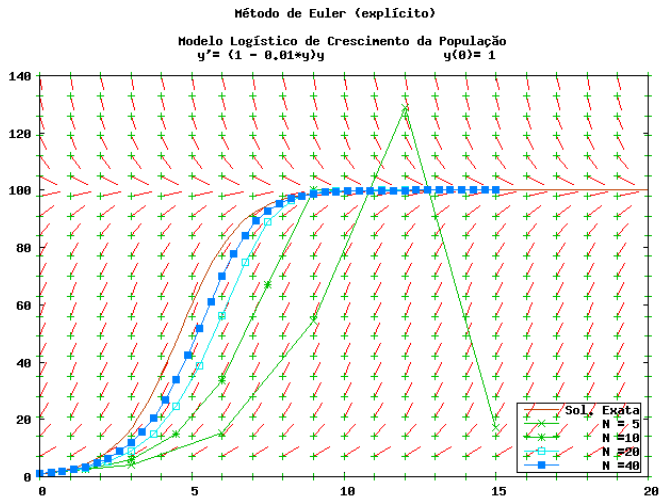
# Euler - Cresc. Logístico



# Euler - Cresc. Logístico



# Euler - Cresc. Logístico



# Euler - Cresc. Logístico

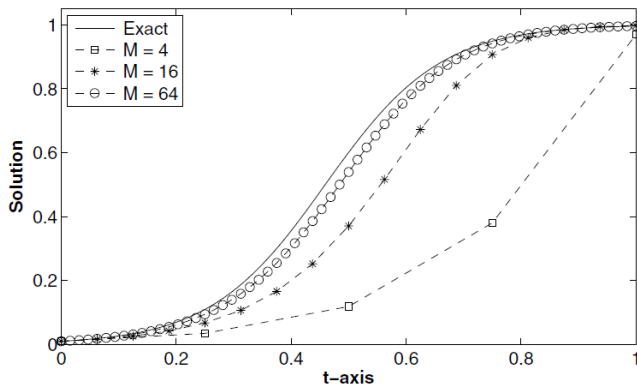


Figure 1.3. Solution of the logistic equation (1.30) using the Euler method (1.33) for three values of  $M$ . Also shown is the exact solution. The symbols are the computed values, and the dashed lines are drawn by the plotting program simply to connect the values.

1



# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);

# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);
- ▶ Decorrentes da precisão finita (arredondamento).

# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);
- ▶ Decorrentes da precisão finita (arredondamento).

Mais especificamente, no ponto  $M$ :

$$e_M = |y(T) - \bar{y}_M|$$

# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);
- ▶ Decorrentes da precisão finita (arredondamento).

Mais especificamente, no ponto  $M$ :

$$\begin{aligned}e_M &= |y(T) - \bar{y}_M| \\ &= |y(T) - y_M| + |y_M - \bar{y}_M|\end{aligned}$$

# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);
- ▶ Decorrentes da precisão finita (arredondamento).

Mais especificamente, no ponto  $M$ :

$$\begin{aligned}e_M &= |y(T) - \bar{y}_M| \\&= |y(T) - y_M| + |y_M - \bar{y}_M| \\&= e_M^{trunc} + e_M^{arred}\end{aligned}$$

O erro de truncamento em um passo:

$$(k\tau_j) = k \frac{k}{2} y''(\eta_j)$$

# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);
- ▶ Decorrentes da precisão finita (arredondamento).

Mais especificamente, no ponto  $M$ :

$$\begin{aligned}e_M &= |y(T) - \bar{y}_M| \\&= |y(T) - y_M| + |y_M - \bar{y}_M| \\&= e_M^{trunc} + e_M^{arred}\end{aligned}$$

O erro de truncamento em um passo:

$$(k\tau_j) = k \frac{k}{2} y''(\eta_j) = O(k^2)$$

# Erros

O erro obtido na implementação do método tem duas origens distintas:

- ▶ Aproximação intrínseca ao método (truncamento);
- ▶ Decorrentes da precisão finita (arredondamento).

Mais especificamente, no ponto  $M$ :

$$\begin{aligned}e_M &= |y(T) - \bar{y}_M| \\&= |y(T) - y_M| + |y_M - \bar{y}_M| \\&= e_M^{trunc} + e_M^{arred}\end{aligned}$$

O erro de truncamento em um passo:

$$(k\tau_j) = k \frac{k}{2} y''(\eta_j) = O(k^2)$$

Logo em  $t_M$ , somam-se os erros para os  $M = \frac{T}{k}$  passos tem-se que:

$$e_M^{trunc} = O(k)$$

# Erros

Para quantificar o erro ao longo do intervalo  $0 < t < T$  podem ser mais convenientes outras medidas de erro, por exemplo:

$$e_{\infty} = \max_{j=0,1,\dots,M} |y(t_j) - \bar{y}_j|$$



# Euler - Cresc. Logístico

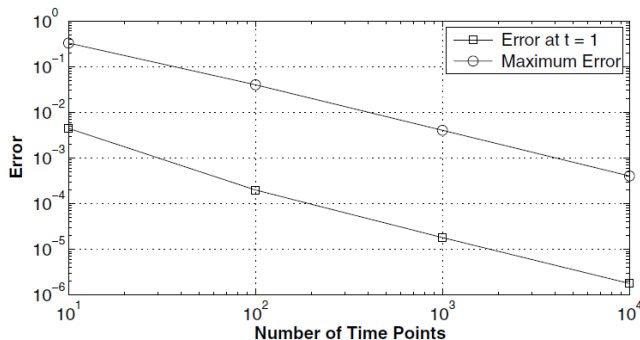


Figure 1.4. The difference between the exact and computed solutions, as a function of the number of time steps,  $M$ , used in solving the logistic equation (1.30) with the Euler method (1.33). Shown is the error  $|y(T) - \bar{y}_M|$  at  $t = 1$  as well as the maximum error as determined using (1.38).

2

# Erros

No gráfico anterior, na escala  $\log \times \log$ , a inclinação indica:

$$\tan(\alpha) = \frac{\log(e_f) - \log(e_i)}{\log(M_f) - \log(M_i)}$$

# Erros

No gráfico anterior, na escala  $\log \times \log$ , a inclinação indica:

$$\tan(\alpha) = \frac{\log(e_f) - \log(e_i)}{\log(M_f) - \log(M_i)}$$

ou seja:

$$\log\left(\frac{e_f}{e_i}\right) = \tan(\alpha) \log\left(\frac{M_f}{M_i}\right)$$

# Erros

No gráfico anterior, na escala  $\log \times \log$ , a inclinação indica:

$$\tan(\alpha) = \frac{\log(e_f) - \log(e_i)}{\log(M_f) - \log(M_i)}$$

ou seja:

$$\begin{aligned}\log\left(\frac{e_f}{e_i}\right) &= \tan(\alpha) \log\left(\frac{M_f}{M_i}\right) \\ &= \log\left(\left(\frac{M_f}{M_i}\right)^{\tan(\alpha)}\right)\end{aligned}$$

Logo, se a discretização temporal é refinada de modo que  $M_f = NM_i$ , tem-se:

$$\frac{e_f}{e_i} = N^{\tan(\alpha)}$$

# Erros

No gráfico anterior, na escala  $\log \times \log$ , a inclinação indica:

$$\tan(\alpha) = \frac{\log(e_f) - \log(e_i)}{\log(M_f) - \log(M_i)}$$

ou seja:

$$\begin{aligned}\log\left(\frac{e_f}{e_i}\right) &= \tan(\alpha) \log\left(\frac{M_f}{M_i}\right) \\ &= \log\left(\left(\frac{M_f}{M_i}\right)^{\tan(\alpha)}\right)\end{aligned}$$

Logo, se a discretização temporal é refinada de modo que  $M_f = NM_i$ , tem-se:

$$\frac{e_f}{e_i} = N^{\tan(\alpha)}$$

ou ainda:

$$e_f = N^{\tan(\alpha)} e_i$$

# Erros - Ordem do Método e Erro de Arredondamento

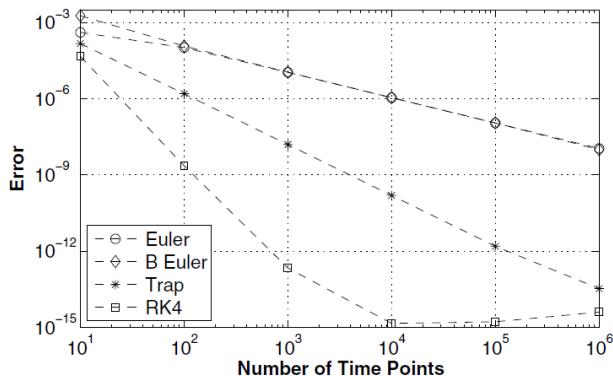


Figure 1.7. Error at  $t = 1$  as a function of the number of time steps used to solve the logistic equation (1.61). Each curve decreases as  $O(k^n)$ , where  $n$  is determined from the truncation error for the method.

3

# Estabilidade

## Quinto Passo - Análise da Estabilidade

A ideia de estabilidade do método está associada a propagação do erro de truncamento local (em um passo) nos passos seguintes.

# Estabilidade

## Quinto Passo - Análise da Estabilidade

A ideia de estabilidade do método está associada a propagação do erro de truncamento local (em um passo) nos passos seguintes.

Existem diversos conceitos e definições formais associados a esta ideia, é usado aqui o conceito de A-Estabilidade, que é associado ao problema modelo do decaimento radioativo.

$$\frac{dy}{dt} = -ry(t), \text{ com } r > 0 \quad (2)$$

Para esta equação o método de Euler fornece:

$$y_{j+1} = y_j + kf(t_j, y_j)$$



# Estabilidade

## Quinto Passo - Análise da Estabilidade

A ideia de estabilidade do método está associada a propagação do erro de truncamento local (em um passo) nos passos seguintes.

Existem diversos conceitos e definições formais associados a esta ideia, é usado aqui o conceito de A-Estabilidade, que é associado ao problema modelo do decaimento radioativo.

$$\frac{dy}{dt} = -ry(t), \text{ com } r > 0 \quad (2)$$

Para esta equação o método de Euler fornece:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + kf(t_j, y_j) \\ &= y_j + k(-ry_j) \end{aligned}$$

# Estabilidade

## Quinto Passo - Análise da Estabilidade

A ideia de estabilidade do método está associada a propagação do erro de truncamento local (em um passo) nos passos seguintes.

Existem diversos conceitos e definições formais associados a esta ideia, é usado aqui o conceito de A-Estabilidade, que é associado ao problema modelo do decaimento radioativo.

$$\frac{dy}{dt} = -ry(t), \text{ com } r > 0 \quad (2)$$

Para esta equação o método de Euler fornece:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + kf(t_j, y_j) \\ &= y_j + k(-ry_j) \\ &= (1 - rk)y_j \end{aligned}$$

# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

$$y_1 = (1 - rk)y_0$$

# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

$$y_1 = (1 - rk)y_0 = (1 - rk)\alpha$$

# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

$$y_1 = (1 - rk)y_0 = (1 - rk)\alpha$$

$$y_2 = (1 - rk)y_1$$

# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

$$y_1 = (1 - rk)y_0 = (1 - rk)\alpha$$

$$y_2 = (1 - rk)y_1 = (1 - rk)^2\alpha$$

$$\vdots$$

# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

$$y_1 = (1 - rk)y_0 = (1 - rk)\alpha$$

$$y_2 = (1 - rk)y_1 = (1 - rk)^2\alpha$$

$$\vdots$$

$$y_j = (1 - rk)y_{j-1}$$



# Estabilidade

Assumindo  $y(0) = \alpha$  tem-se:

$$y_0 = \alpha$$

$$y_1 = (1 - rk)y_0 = (1 - rk)\alpha$$

$$y_2 = (1 - rk)y_1 = (1 - rk)^2\alpha$$

$$\vdots$$

$$y_j = (1 - rk)y_{j-1} = (1 - rk)^j\alpha$$

A solução exata é  $y(t) = \alpha \exp(-rt)$ , que tende a zero a medida que  $t$  cresce, então se exige que a solução aproximada tenha o mesmo comportamento.

# Estabilidade

## A-Estabilidade

*Se o método, quando aplicado ao problema (2), produz uma solução limitada independentemente dos valores de  $r > 0$  e  $k$ , então o método é dito A-Estável. Se a solução é limitada apenas quando  $k$  é pequeno, então o método é condicionalmente estável. De outra forma o método é instável.*

# Estabilidade

## A-Estabilidade

*Se o método, quando aplicado ao problema (2), produz uma solução limitada independentemente dos valores de  $r > 0$  e  $k$ , então o método é dito A-Estável. Se a solução é limitada apenas quando  $k$  é pequeno, então o método é condicionalmente estável. De outra forma o método é instável.*

A solução do método de Euler só é limitada se  $|1 - rk| < 1$ , logo:

# Estabilidade

## A-Estabilidade

*Se o método, quando aplicado ao problema (2), produz uma solução limitada independentemente dos valores de  $r > 0$  e  $k$ , então o método é dito A-Estável. Se a solução é limitada apenas quando  $k$  é pequeno, então o método é condicionalmente estável. De outra forma o método é instável.*

A solução do método de Euler só é limitada se  $|1 - rk| < 1$ , logo:

$$-1 < 1 - rk < 1$$

# Estabilidade

## A-Estabilidade

*Se o método, quando aplicado ao problema (2), produz uma solução limitada independentemente dos valores de  $r > 0$  e  $k$ , então o método é dito A-Estável. Se a solução é limitada apenas quando  $k$  é pequeno, então o método é condicionalmente estável. De outra forma o método é instável.*

A solução do método de Euler só é limitada se  $|1 - rk| < 1$ , logo:

$$-1 < 1 - rk < 1$$

$$-2 < -rk < 0$$

# Estabilidade

## A-Estabilidade

*Se o método, quando aplicado ao problema (2), produz uma solução limitada independentemente dos valores de  $r > 0$  e  $k$ , então o método é dito A-Estável. Se a solução é limitada apenas quando  $k$  é pequeno, então o método é condicionalmente estável. De outra forma o método é instável.*

A solução do método de Euler só é limitada se  $|1 - rk| < 1$ , logo:

$$-1 < 1 - rk < 1$$

$$-2 < -rk < 0$$

$$2 > rk > 0$$

# Estabilidade

## A-Estabilidade

*Se o método, quando aplicado ao problema (2), produz uma solução limitada independentemente dos valores de  $r > 0$  e  $k$ , então o método é dito A-Estável. Se a solução é limitada apenas quando  $k$  é pequeno, então o método é condicionalmente estável. De outra forma o método é instável.*

A solução do método de Euler só é limitada se  $|1 - rk| < 1$ , logo:

$$-1 < 1 - rk < 1$$

$$-2 < -rk < 0$$

$$2 > rk > 0$$

Isto é se:

$$0 < k < \frac{2}{r}$$

Logo o Método de Euler é condicionalmente estável.

# Monotonicidade

Tendo em vista que:

$$y_j = (1 - rk)^j \alpha$$

Pode-se perceber que se

$$-1 < (1 - rk) < 0$$

o resultado do método de Euler decresce mas o faz oscilando entre valores positivos e negativos, diferentemente da solução do PVI.

Diz-se, então, que o método é não-monotônico.



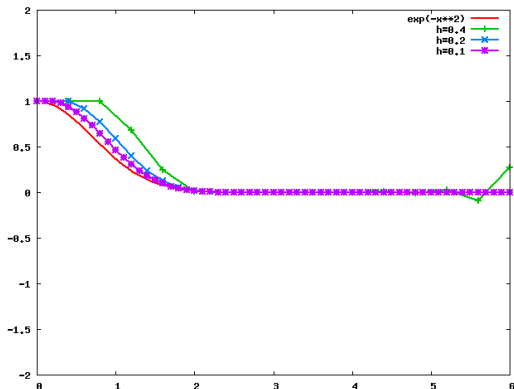
# Estabilidade do Método de Euler

Considere a utilização do Método de Euler para o PVI:

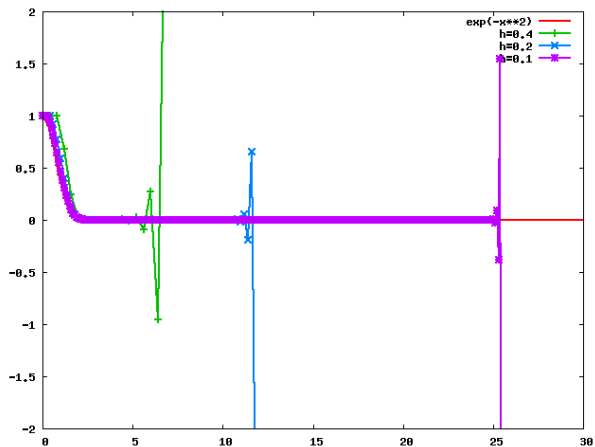
$$y'(t) = -2ty \quad \text{com} \quad y(0) = 1$$

cuja solução é:

$$y(t) = e^{-t^2}$$



# Estabilidade do Método de Euler



# Estabilidade

## Justificativa

Seja a equação diferencial, mais simples ( $f$  não depende diretamente de  $t$ ):

$$y' = f(y)$$

Admitindo  $y = Y$  como um ponto de equilíbrio estável, um PVI com  $y(0) = \alpha$ , próximo de  $Y$  irá convergir para  $Y$ .

# Estabilidade

## Justificativa

Seja a equação diferencial, mais simples ( $f$  não depende diretamente de  $t$ ):

$$y' = f(y)$$

Admitindo  $y = Y$  como um ponto de equilíbrio estável, um PVI com  $y(0) = \alpha$ , próximo de  $Y$  irá convergir para  $Y$ .

Seja

$$y(t) = Y + v(t)$$

Derivando membro a membro obtém-se

$$y' = v'(t)$$

# Estabilidade

## Justificativa

Seja a equação diferencial, mais simples ( $f$  não depende diretamente de  $t$ ):

$$y' = f(y)$$

Admitindo  $y = Y$  como um ponto de equilíbrio estável, um PVI com  $y(0) = \alpha$ , próximo de  $Y$  irá convergir para  $Y$ .

Seja

$$y(t) = Y + v(t)$$

Derivando membro a membro obtém-se

$$y' = v'(t)$$

Substituindo as duas últimas expressões na definição do PVI:

$$v' = f(Y + v(t))$$

# Estabilidade

## Justificativa

Se  $\alpha \approx Y$ , então  $v(0) \approx 0$ , logo a série de Taylor fornece:

$$f(Y + v) \approx f(Y) + vf'(Y)$$

Como  $f(Y) = 0$ , pode-se concluir que

$$v' = -rv \quad \text{com} \quad r = -f'(Y)$$

Logo a solução nas proximidades de  $Y$  se comporta como a do decaimento radioativo.

# Extensão para sistemas de equações

Seja  $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$

A extensão se dá de maneira inteiramente análoga:

$$\mathbf{y}'(t_j) = \frac{\mathbf{y}(t_{j+1}) - \mathbf{y}(t_j)}{k} + O(k)$$

# Extensão para sistemas de equações

Seja  $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$

A extensão se dá de maneira inteiramente análoga:

$$\mathbf{y}'(t_j) = \frac{\mathbf{y}(t_{j+1}) - \mathbf{y}(t_j)}{k} + O(k)$$

E o método de Euler se escreve:

$$\mathbf{y}_{t_{j+1}} = \mathbf{y}_{t_j} + k\mathbf{f}(t_j, \mathbf{y}_{t_j})$$



# Extensão para sistemas de equações

Seja  $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$

A extensão se dá de maneira inteiramente análoga:

$$\mathbf{y}'(t_j) = \frac{\mathbf{y}(t_{j+1}) - \mathbf{y}(t_j)}{k} + O(k)$$

E o método de Euler se escreve:

$$\mathbf{y}_{t_{j+1}} = \mathbf{y}_{t_j} + k\mathbf{f}(t_j, \mathbf{y}_{t_j})$$

## Extensão para sistemas de equações

O caso análogo ao problema do decaimento radioativo se escreve como:

$$\mathbf{y}'(t) = -\mathbf{A}\mathbf{y} \text{ onde } \mathbf{A} \text{ tem coeficientes constantes.}$$

## Extensão para sistemas de equações

O caso análogo ao problema do decaimento radioativo se escreve como:

$$\mathbf{y}'(t) = -\mathbf{A}\mathbf{y} \text{ onde } \mathbf{A} \text{ tem coeficientes constantes.}$$

Se  $\mathbf{A}$  é diagonalizável, isto é, tem autovalores  $\lambda_i$ , e correspondentes autovetores,  $\mathbf{v}_i$  linearmente independentes, pode-se escrever a matriz  $\mathbf{V}$ :

$$\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n]$$

## Extensão para sistemas de equações

O caso análogo ao problema do decaimento radioativo se escreve como:

$$\mathbf{y}'(t) = -\mathbf{A}\mathbf{y} \text{ onde } \mathbf{A} \text{ tem coeficientes constantes.}$$

Se  $\mathbf{A}$  é diagonalizável, isto é, tem autovalores  $\lambda_i$ , e correspondentes autovetores,  $\mathbf{v}_i$  linearmente independentes, pode-se escrever a matriz  $\mathbf{V}$ :

$$\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n]$$

Logo:

$$\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda} \quad \text{ou ainda} \quad \mathbf{\Lambda} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V}$$

onde:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & & \dots & \lambda_m \end{bmatrix}$$

## Extensão para sistemas de equações

Pré multiplicando o sistema de EDO's original por  $\mathbf{V}^{-1}$ :

$$\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}'(t) = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}$$

Fazendo  $\mathbf{z}(t) = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}(t)$  o sistema de EDO's original é então equivalente a:

$$\mathbf{z}'(t) = -\Lambda\mathbf{z}(t) \text{ com } \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0$$

O sistema acima fica então desacoplado, isto é :

$$z_1'(t) = \lambda_1 z_1(t)$$

$$z_2'(t) = \lambda_2 z_2(t)$$

$$z_3'(t) = \lambda_3 z_3(t)$$

$$\vdots$$

$$z_n'(t) = \lambda_n z_n(t)$$

## Extensão para sistemas de equações

Pré multiplicando o sistema de EDO's original por  $\mathbf{V}^{-1}$ :

$$\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}'(t) = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}$$

Fazendo  $\mathbf{z}(t) = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}(t)$  o sistema de EDO's original é então equivalente a:

$$\mathbf{z}'(t) = -\Lambda\mathbf{z}(t) \text{ com } \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0$$

O sistema acima fica então desacoplado, isto é :

$$\begin{aligned} z_1'(t) &= \lambda_1 z_1(t) \\ z_2'(t) &= \lambda_2 z_2(t) \\ z_3'(t) &= \lambda_3 z_3(t) \\ &\vdots \\ z_n'(t) &= \lambda_n z_n(t) \end{aligned}$$

Neste caso  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$  é uma solução assintoticamente estável se  $\text{Re}(\lambda_i) > 0, \forall i$ .

# Extensão para sistemas de equações

A aplicação do método de Euler ao sistema original é então equivalente a aplicação cada uma das equações sistema desacoplado.

$$z_{i_{j+1}} = (1 - k\lambda_i)z_{i_j}$$

# Extensão para sistemas de equações

A aplicação do método de Euler ao sistema original é então equivalente a aplicação cada uma das equações sistema desacoplado.

$$z_{i_{j+1}} = (1 - k\lambda_i)z_{i_j}$$

Pode-se concluir, da mesma forma, que anteriormente que o método de Euler é condicionalmente estável.



# Outros Métodos

## Euler Implícito

Adotando, no Terceiro Passo, a expressão:

$$y'(t_j) = \frac{y(t_j) - y(t_{j-1})}{k} + \tau_j,$$

# Outros Métodos

## Euler Implícito

Adotando, no Terceiro Passo, a expressão:

$$y'(t_j) = \frac{y(t_j) - y(t_{j-1})}{k} + \tau_j,$$

Seguindo o mesmo procedimento:

$$y_j = y_{j-1} + kf(t_j, y_j), \quad \text{para} \quad j = 1, 2, \dots, M$$

com valor inicial  $y_0 = \alpha$

# Estabilidade do Método de Euler Implícito

Da mesma forma, utilizando o problema do decaimento radioativo, tem-se  $y_j = y_{j-1} + k(ry_j)$ . Logo:

$$\begin{aligned}(1 + rk)y_j &= y_{j-1} \\ y_j &= (1 + rk)^{-1}y_{j-1}\end{aligned}$$

# Estabilidade do Método de Euler Implícito

Da mesma forma, utilizando o problema do decaimento radioativo, tem-se  $y_j = y_{j-1} + k(ry_j)$ . Logo:

$$\begin{aligned}(1 + rk)y_j &= y_{j-1} \\ y_j &= (1 + rk)^{-1}y_{j-1}\end{aligned}$$

E portanto, assumindo  $y(0) = \alpha$ :

$$y_j = \alpha(1 + rk)^{-j}$$

Tende a zero, monotonicamente, para qualquer valor de  $r > 0$ , logo é incondicionalmente estável e monotônico.

# Métodos BDF

Os métodos *Backward Differentiation Formulae* (BDF) formam uma família de métodos implícitos obtidos a partir da utilização direta de aproximações da derivada por expressões de diferenças finitas regressivas.

# Métodos BDF

Os métodos *Backward Differentiation Formulae* (BDF) formam uma família de métodos implícitos obtidos a partir da utilização direta de aproximações da derivada por expressões de diferenças finitas regressivas.

O método de ordem 1 desta família é o Método de Euler Implícito e os de ordem 2 a 5 são apresentados abaixo<sup>4</sup>:

$$y_{j+1} = (4y_j - y_{j-1} + 2kf_{j+1})/3$$

$$y_{j+1} = (18y_j - 9y_{j-1} + 2y_{j-2} + 6kf_{j+1})/11$$

$$y_{j+1} = (48y_j - 36y_{j-1} + 16y_{j-2} - 3y_{j-3} + 12kf_{j+1})/25$$

$$y_{j+1} = (300y_j - 300y_{j-1} + 200y_{j-2} - 75y_{j-3} + 12y_{j-4} + 12kf_{j+1})/137$$

---

<sup>4</sup>Süli & Mayers, pag. 349.

# Exemplo de Método Instável

## Método *Leapfrog*

Utilizando a aproximação de diferenças centrais (de segunda ordem):

$$y_{j+1} = y_{j-1} + 2kf(t_j, y_j)$$

# Exemplo de Método Instável

## Método *Leapfrog*

Utilizando a aproximação de diferenças centrais (de segunda ordem):

$$y_{j+1} = y_{j-1} + 2kf(t_j, y_j)$$

Aplicando mais uma vez ao problema do decaimento radioativo conclui-se que:

$$y_{j+1} = y_{j-1} - 2rky_j$$

Pode-se mostrar que não existe valor de  $k$  que faz com que a condição de estabilidade seja satisfeita.



# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Solução de uma equação de diferenças de ordem  $m$  e coeficientes constantes:

$$y_{n+1} = a_m y_n + \cdots + a_1 y_{n-(m-1)} + a_0, \quad n = m-1, m, m+1, \dots$$

com  $a_0, a_1, \dots, a_m$ .

A parte homogênea é:

$$y_{n+1} = a_m y_n + \cdots + a_1 y_{n-(m-1)}$$

Para a parte homogênea pode-se achar uma solução do tipo  $y_j = \lambda^j$ , para  $\lambda$  constante.

# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Solução de uma equação de diferenças de ordem  $m$  e coeficientes constantes:

$$y_{n+1} = a_m y_n + \cdots + a_1 y_{n-(m-1)} + a_0, \quad n = m-1, m, m+1, \cdots$$

com  $a_0, a_1, \dots, a_m$ .

A parte homogênea é:

$$y_{n+1} = a_m y_n + \cdots + a_1 y_{n-(m-1)}$$

Para a parte homogênea pode-se achar uma solução do tipo  $y_j = \lambda^j$ , para  $\lambda$  constante.

Substituindo a expressão acima na equação homogênea obtém-se a *equação característica*

$$\lambda^m - a_m \lambda^{m-1} - \cdots - a_1 = 0$$

# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Assumindo que as  $m$  raízes  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$  são distintas, pode-se escrever a solução geral como:

$$y_j = \sum_{i=1}^m c_j \lambda_i^j, \quad j = 0, 1, \dots$$

Uma solução particular pode ser dada por:

$$y_j = \frac{a_0}{1 - a_1 - \dots - a_m}, \quad j = 0, 1, \text{dots}$$

# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Para o caso particular do método Leapfrog aplicado ao decaimento radioativo a equação característica fica:

$$\lambda^2 + 2kr\lambda - 1 = 0$$

Cujas solução são dadas por:

$$\lambda = \frac{-2kr \pm \sqrt{4k^2r^2 + 4}}{2}$$

# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Para o caso particular do método Leapfrog aplicado ao decaimento radioativo a equação característica fica:

$$\lambda^2 + 2kr\lambda - 1 = 0$$

Cujas solução são dadas por:

$$\lambda = \frac{-2kr \pm \sqrt{4k^2r^2 + 4}}{2} = -kr \pm \sqrt{k^2r^2 + 1}$$

# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Para o caso particular do método Leapfrog aplicado ao decaimento radioativo a equação característica fica:

$$\lambda^2 + 2kr\lambda - 1 = 0$$

Cujas solução são dadas por:

$$\lambda = \frac{-2kr \pm \sqrt{4k^2r^2 + 4}}{2} = -kr \pm \sqrt{k^2r^2 + 1}$$

Logo a solução geral é dada por:

$$y_j = c_1 \left(-kr + \sqrt{k^2r^2 + 1}\right)^j + c_2 \left(-kr - \sqrt{k^2r^2 + 1}\right)^j + c_0$$

onde  $c_0$  é a solução particular.

# Análise da Estabilidade do Método Leapfrog

Para o caso particular do método Leapfrog aplicado ao decaimento radioativo a equação característica fica:

$$\lambda^2 + 2kr\lambda - 1 = 0$$

Cujas solução são dadas por:

$$\lambda = \frac{-2kr \pm \sqrt{4k^2r^2 + 4}}{2} = -kr \pm \sqrt{k^2r^2 + 1}$$

Logo a solução geral é dada por:

$$y_j = c_1 \left(-kr + \sqrt{k^2r^2 + 1}\right)^j + c_2 \left(-kr - \sqrt{k^2r^2 + 1}\right)^j + c_0$$

onde  $c_0$  é a solução particular.

Tendo em vista que o termo destacado é sempre negativo com módulo maior que 1, a solução irá aumentar em módulo oscilando.

# Método *Leapfrog*

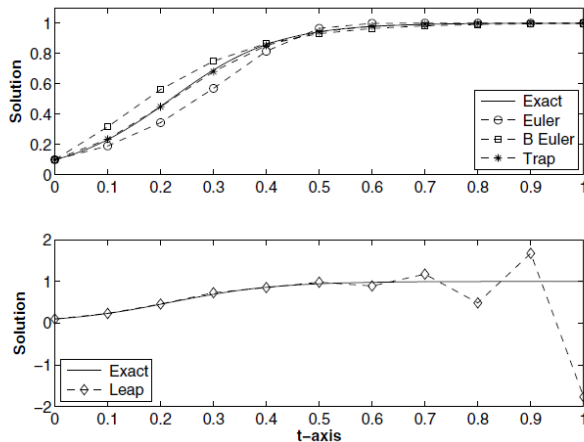


Figure 1.6. Solution of the logistic equation (1.61) using different numerical schemes. The leapfrog method is shown in the lower plot, and the two Euler schemes and the trapezoidal method are in the upper graph.



# Problemas de Valor Inicial

Definição do Problema

Obtenção de Métodos por Aproximação das Derivadas

Método de Euler

Obtenção de Métodos por Integração Numérica

Métodos de Adams

Métodos Runge-Kutta

Método de Euler Modificado

Condicionamento dos Problemas

Problemas *Stiff*

# Obtenção de Métodos por Integração Numérica

## Primeiro Passo

Definição da malha, da mesma forma.

# Obtenção de Métodos por Integração Numérica

## Primeiro Passo

Definição da malha, da mesma forma.

## Segundo Passo

Integração da Equação diferencial entre dois pontos:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{dy}{dt} dt = \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(t, y(t)) dt.$$

# Obtenção de Métodos por Integração Numérica

## Primeiro Passo

Definição da malha, da mesma forma.

## Segundo Passo

Integração da Equação diferencial entre dois pontos:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{dy}{dt} dt = \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(t, y(t)) dt.$$

e usando o Teorema Fundamental do Cálculo:

$$y_{t_{j+1}} - y_{t_j} = \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(t, y(t)) dt.$$

# Obtenção

## Terceiro Passo

Substituir a integral do passo anterior por uma aproximação numérica.

# Obtenção

## Terceiro Passo

Substituir a integral do passo anterior por uma aproximação numérica.

Usando a Regra dos Trapézios:

$$y(t_{j+1}) - y(t_j) = \frac{k}{2} [f(t_{j+1}, y(t_{j+1})) + f(t_j, y(t_j))] + O(k^3)$$

## Quarto Passo

Escrever a expressão em termos das aproximações da solução:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{k}{2} (f_{j+1} + f_j) \quad \text{para} \quad j = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

O método acima é implícito e A-Estável.

# Obtenção

## Terceiro Passo

Substituir a integral do passo anterior por uma aproximação numérica.

Usando a Regra dos Trapézios:

$$y(t_{j+1}) - y(t_j) = \frac{k}{2} [f(t_{j+1}, y(t_{j+1})) + f(t_j, y(t_j))] + O(k^3)$$

## Quarto Passo

Escrever a expressão em termos das aproximações da solução:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{k}{2} (f_{j+1} + f_j) \quad \text{para} \quad j = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

O método acima é implícito e A-Estável.

Uma vez que em um passo de tempo a ordem do erro de truncamento é  $O(k^3)$ , tomando  $M = T/k$  passos, o erro de truncamento global diminui com  $O(k^2)$ .

# Obtenção Alternativa - Métodos de Adams

O Terceiro passo pode ser modificado da seguinte forma:

## Terceiro Passo

A partir dos resultados dos passos anteriores, interpolar  $f$  por um polinômio em  $t$  e usá-lo na integração.



# Obtenção Alternativa - Métodos de Adams

O Terceiro passo pode ser modificado da seguinte forma:

## Terceiro Passo

A partir dos resultados dos passos anteriores, interpolar  $f$  por um polinômio em  $t$  e usá-lo na integração.

Usando, por exemplo, uma função linear entre  $t_j$  e  $t_{j+1}$ :

$$f(t, y(t)) = \frac{t_{j+1} - t}{k} f(t_j, y(t_j)) + \frac{t - t_j}{k} f(t_{j+1}, y(t_{j+1})) + O(k^2)$$

Obtém-se neste caso, novamente, o método Trapezoidal Implícito.

# Obtenção Alternativa - Métodos de Adams

O Terceiro passo pode ser modificado da seguinte forma:

## Terceiro Passo

A partir dos resultados dos passos anteriores, interpolar  $f$  por um polinômio em  $t$  e usá-lo na integração.

Usando, por exemplo, uma função linear entre  $t_j$  e  $t_{j+1}$ :

$$f(t, y(t)) = \frac{t_{j+1} - t}{k} f(t_j, y(t_j)) + \frac{t - t_j}{k} f(t_{j+1}, y(t_{j+1})) + O(k^2)$$

Obtém-se neste caso, novamente, o método Trapezoidal Implícito.

Quando o valor  $f(t_{j+1}, y(t_{j+1}))$  for usado na interpolação o método é chamado de Adams-Moulton e é implícito.

# Métodos de Adams

## Adams-Bashforth

Se na formulação acima se usa para a aproximação de  $f$  um intervalo que não contém  $t_{j+1}$  o método fica explícito e passa a se chamar de Adams-Bashforth.

Usando uma aproximação linear entre  $t_{j-1}$  e  $t_j$  obtém-se:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{k}{2} (3f_j - f_{j-1}) \quad \text{para} \quad j = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

Por usar valores da função em passos de tempo anteriores ao atual, é classificado como método de passo múltiplo.

# Métodos de Adams

## Adams-Bashforth

Expressão	Erro
$y_{j+1} = y_j + k(3f_j - f_{j-1})/2$	$5k^3 y'''(\eta)/12$
$y_{j+1} = y_j + k(23f_j - 16f_{j-1} + 5f_{j-2})/12$	$3k^4 y^{(4)}(\eta)/8$
$y_{j+1} = y_j + k(55f_j - 59f_{j-1} + 37f_{j-2} - 9f_{j-3})/24$	$251k^5 y^{(5)}(\eta)/720$

## Adams-Moulton

Expressão	Erro
$y_{j+1} = y_j + k(f_{j+1} - f_j)/2$	$k^3 y'''(\eta)/12$
$y_{j+1} = y_j + k(5f_{j+1} + 8f_j - 1f_{j-1})/12$	$-1k^4 y^{(4)}(\eta)/8$
$y_{j+1} = y_j + k(9f_{j+1} + 19f_j - 5f_{j-1} + f_{j-2})/24$	$-19k^5 y^{(5)}(\eta)/720$

# Métodos Preditor-Corretor

Os métodos de Adams-Bashforth podem ser acoplados com os de Adams-Moulton de modo a obter um método explícito de alta ordem com esforço computacional reduzido.

# Métodos Preditor-Corretor

Utilizando os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de quarta ordem (obtidos com  $N=4$ ):

$$y_0 = y(t_0)$$

$y_1, y_2, y_3 \Leftarrow$  Inicialização: Runge-Kutta Clássico

# Métodos Preditor-Corretor

Utilizando os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de quarta ordem (obtidos com  $N=4$ ):

$$y_0 = y(t_0)$$

$y_1, y_2, y_3 \Leftarrow$  Inicialização: Runge-Kutta Clássico

$$y_{k+1}^{pred} = y_k + h \left( \frac{55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3}}{24} \right)$$

# Métodos Preditor-Corretor

Utilizando os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de quarta ordem (obtidos com  $N=4$ ):

$$y_0 = y(t_0)$$

$y_1, y_2, y_3 \Leftarrow$  Inicialização: Runge-Kutta Clássico

$$y_{k+1}^{pred} = y_k + h \left( \frac{55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3}}{24} \right)$$

$$y_{k+1} = y_k + h \left( \frac{9f(t_{k+1}, y_{k+1}^{pred}) + 19f_k - 5f_{k-1} + f_{k-2}}{24} \right)$$



# Métodos Preditor-Corretor

Utilizando os métodos de Adams-Bashforth e Adams-Moulton de quarta ordem (obtidos com  $N=4$ ):

$$y_0 = y(t_0)$$

$y_1, y_2, y_3 \Leftarrow$  Inicialização: Runge-Kutta Clássico

$$y_{k+1}^{pred} = y_k + h \left( \frac{55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3}}{24} \right)$$

$$y_{k+1} = y_k + h \left( \frac{9f(t_{k+1}, y_{k+1}^{pred}) + 19f_k - 5f_{k-1} + f_{k-2}}{24} \right)$$

Duas avaliações da função  $f$  por iteração:  $f_k = f(t_k, y(t_k))$  e  $f(t_{k+1}, y_{k+1}^{pred})$ .

# Problemas de Valor Inicial

Definição do Problema

Obtenção de Métodos por Aproximação das Derivadas

Método de Euler

Obtenção de Métodos por Integração Numérica

Métodos de Adams

Métodos Runge-Kutta

Método de Euler Modificado

Condicionamento dos Problemas

Problemas *Stiff*

# Método Euler Modificado ou Método de Heun

O método de Euler Modificado

$$y_{j+1} = y_j + k \left( \frac{f_j + \tilde{f}_{j+1}}{2} \right) \quad \text{onde} \quad \begin{cases} f_j = f(t_j, y_j) \\ \tilde{f}_{j+1} = f(t_j + k, y_j + kf_j) \end{cases}$$

# Método Euler Modificado ou Método de Heun

O método de Euler Modificado

$$y_{j+1} = y_j + k \left( \frac{f_j + \tilde{f}_{j+1}}{2} \right) \quad \text{onde} \quad \begin{cases} f_j = f(t_j, y_j) \\ \tilde{f}_{j+1} = f(t_j + k, y_j + kf_j) \end{cases}$$

pode ser encarado como uma aproximação do método *Implicit Trapezoid* na qual o valor de  $y_{j+1}$  no lado direito é substituído por estimativa obtida pelo método de Euler:  $y_j + kf(t_j, y_j)$ .

# Método Euler Modificado ou Método de Heun

O método de Euler Modificado

$$y_{j+1} = y_j + k \left( \frac{f_j + \tilde{f}_{j+1}}{2} \right) \quad \text{onde} \quad \begin{cases} f_j = f(t_j, y_j) \\ \tilde{f}_{j+1} = f(t_j + k, y_j + kf_j) \end{cases}$$

pode ser encarado como uma aproximação do método *Implicit Trapezoid* na qual o valor de  $y_{j+1}$  no lado direito é substituído por estimativa obtida pelo método de Euler:  $y_j + kf(t_j, y_j)$ . Neste sentido pode ser visto como um método tipo *Preditor-Corretor*

# Método Euler Modificado ou Método de Heun

O método de Euler Modificado

$$y_{j+1} = y_j + k \left( \frac{f_j + \tilde{f}_{j+1}}{2} \right) \quad \text{onde} \quad \begin{cases} f_j = f(t_j, y_j) \\ \tilde{f}_{j+1} = f(t_j + k, y_j + kf_j) \end{cases}$$

pode ser encarado como uma aproximação do método *Implicit Trapezoid* na qual o valor de  $y_{j+1}$  no lado direito é substituído por estimativa obtida pelo método de Euler:  $y_j + kf(t_j, y_j)$ . Neste sentido pode ser visto como um método tipo *Preditor-Corretor*

Este procedimento pode ser encarado também como uma forma para *melhorar* a direção do passo, obtendo métodos de passo-único explícitos de ordem superior.

# Método Euler Modificado ou Método de Heun

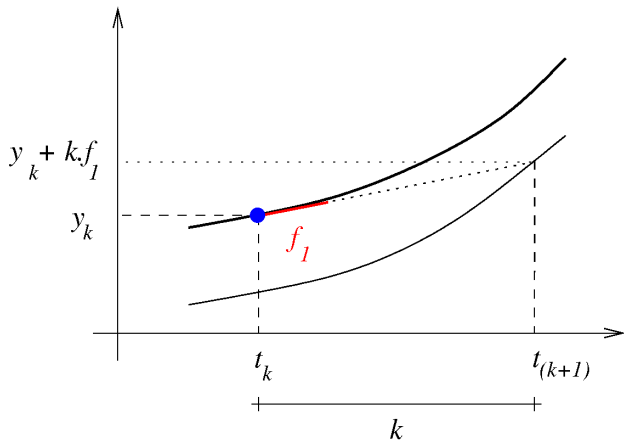
O método de Euler Modificado

$$y_{j+1} = y_j + k \left( \frac{f_j + \tilde{f}_{j+1}}{2} \right) \quad \text{onde} \quad \begin{cases} f_j = f(t_j, y_j) \\ \tilde{f}_{j+1} = f(t_j + k, y_j + kf_j) \end{cases}$$

pode ser encarado como uma aproximação do método *Implicit Trapezoid* na qual o valor de  $y_{j+1}$  no lado direito é substituído por estimativa obtida pelo método de Euler:  $y_j + kf(t_j, y_j)$ . Neste sentido pode ser visto como um método tipo *Preditor-Corretor*

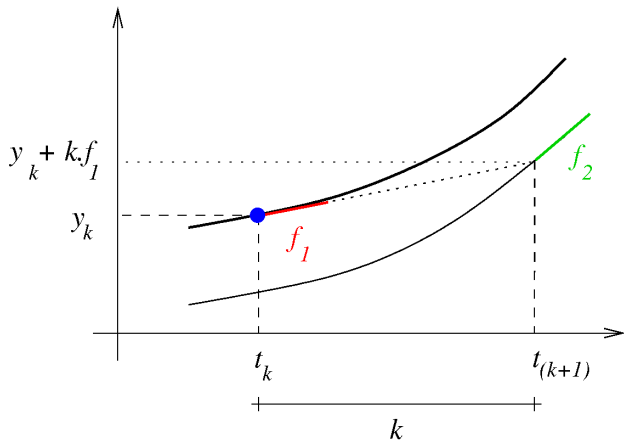
Este procedimento pode ser encarado também como uma forma para *melhorar* a direção do passo, obtendo métodos de passo-único explícitos de ordem superior. Neste sentido pode ser visto como um método tipo *Runge-Kutta*: RK2.

# Método de Euler Modificado - Interpretação Geométrica

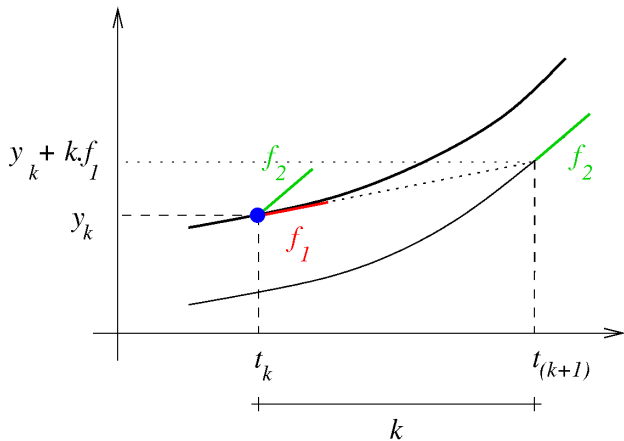




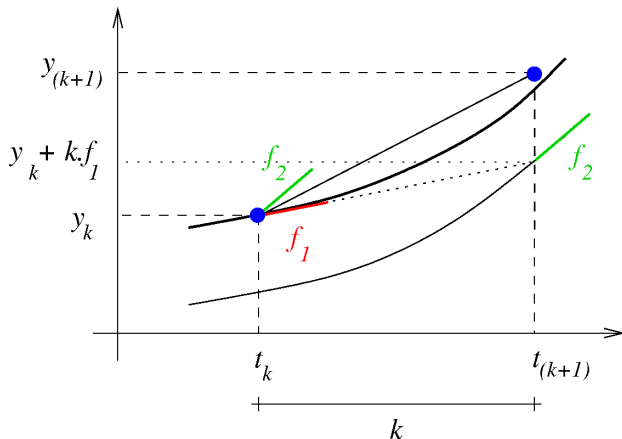
# Método de Euler Modificado - Interpretação Geométrica



# Método de Euler Modificado - Interpretação Geométrica



# Método de Euler Modificado - Interpretação Geométrica



# Métodos Runge-Kutta

- ▶ Muito utilizados;
- ▶ Passo Único;
- ▶ Ordem elevada a custo de avaliações de  $f$  entre  $t_j$  e  $t_{j+1}$ .

# Métodos Runge-Kutta

- ▶ Muito utilizados;
- ▶ Passo Único;
- ▶ Ordem elevada a custo de avaliações de  $f$  entre  $t_j$  e  $t_{j+1}$ .

Os métodos de ordem 2 têm a seguinte forma:

$$y_{j+1} = y_j + k [af(t_j, y_j) + bf(t_{j+\alpha k}, y_j + \beta kf_j)]$$

onde as constantes  $a$ ,  $b$ ,  $\alpha$  e  $\beta$  são determinadas de modo a garantir o desejado erro de truncamento.

# Métodos Runge-Kutta

Desta forma são obtidas as relações, que devem ser satisfeitas:

$$a + b = 1$$

$$\alpha = \beta$$

$$2b\alpha = 1$$

# Métodos Runge-Kutta

Desta forma são obtidas as relações, que devem ser satisfeitas:

$$a + b = 1$$

$$\alpha = \beta$$

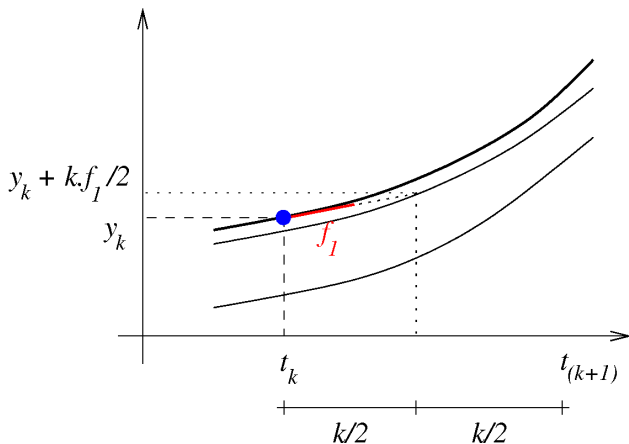
$$2b\alpha = 1$$

Desta forma, a escolha dos parâmetros não é única e um outro método Runge-Kutta de ordem 2 é o *Midpoint Method*, com  $\alpha = \beta = 0.5$ ,  $a = 0$  e  $b = 1$ .

O método de Euler Modificado

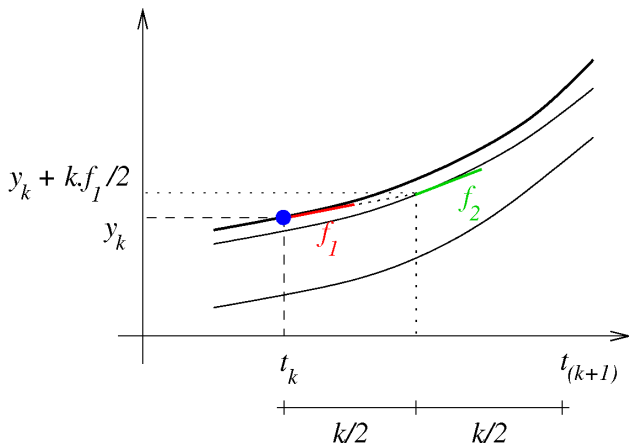
$$y_{j+1} = y_j + kf_2 \quad \text{onde} \quad \begin{cases} f_2 = f(t_j + k/2, y_j + (kf_1)/2) \\ f_1 = f(t_j, y_j) \end{cases}$$

## Método *Midpoint* - Interpretação Geométrica

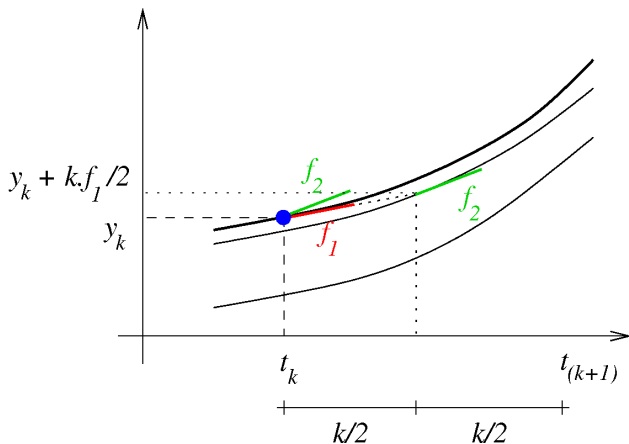




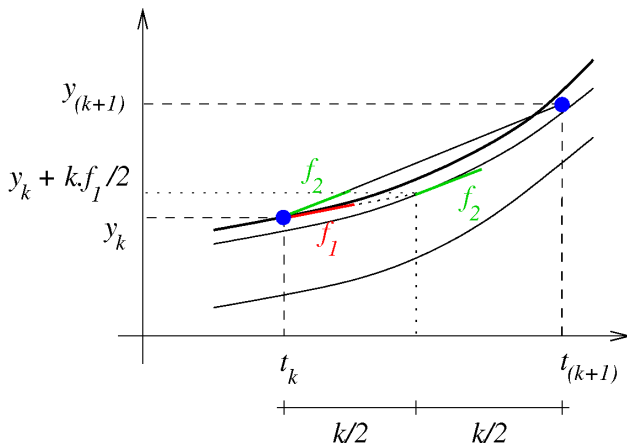
## Método *Midpoint* - Interpretação Geométrica



## Método *Midpoint* - Interpretação Geométrica



## Método *Midpoint* - Interpretação Geométrica



# Relações Necessárias para RK2

## Erro de Truncamento Local

$$\epsilon_j(h) = y(t_{j+1}) - \{y(t_j) + k[af(t_j, y_j) + bf(t_j + \alpha k, y_j + \beta kf_j)]\}$$

# Relações Necessárias para RK2

## Erro de Truncamento Local

$$\epsilon_j(h) = y(t_{j+1}) - \{y(t_j) + k[af(t_j, y_j) + bf(t_j + \alpha k, y_j + \beta k f_j)]\}$$

A expansão em série de Taylor:

$$f(t + k, y + \delta) = f(t, y) + k \frac{\partial f(t, y)}{\partial t} + \delta \frac{\partial f(t, y)}{\partial y} + O(k^2)$$

E simplificando a notação:

$$\frac{\partial f(t_j)}{\partial t} = f_{j,t} \quad \text{e} \quad \frac{\partial f(t_j)}{\partial y} = f_{j,y}$$

Chega-se a:

$$bf(t_j + \alpha k, y_j + \beta k f_j) = bf(t_j, y_j) + \alpha b k f_{j,t} + \beta b k f_j f_{j,y} + O(k^2)$$

# Relações Necessárias para RK2

## Erro de Truncamento Local

A série de Taylor fornece ainda:

$$y(t_{j+1}) - y(t_j) = y'_j k + \frac{1}{2} y''_j k^2 + O(k^3)$$

# Relações Necessárias para RK2

## Erro de Truncamento Local

A série de Taylor fornece ainda:

$$\begin{aligned}y(t_{j+1}) - y(t_j) &= y'_j k + \frac{1}{2} y''_j k^2 + O(k^3) \\ &= f_j k + \frac{1}{2} f'_j k^2 + O(k^3)\end{aligned}$$

# Relações Necessárias para RK2

## Erro de Truncamento Local

A série de Taylor fornece ainda:

$$\begin{aligned}y(t_{j+1}) - y(t_j) &= y'_j k + \frac{1}{2} y''_j k^2 + O(k^3) \\&= f_j k + \frac{1}{2} f'_j k^2 + O(k^3) \\&= f_j k + \frac{1}{2} (f_{j,t} + f_{j,y} f_j) k^2 + O(k^3)\end{aligned}$$



# Relações Necessárias para RK2

## Erro de Truncamento Local

A série de Taylor fornece ainda:

$$\begin{aligned}y(t_{j+1}) - y(t_j) &= y'_j k + \frac{1}{2} y''_j k^2 + O(k^3) \\&= f_j k + \frac{1}{2} f'_j k^2 + O(k^3) \\&= f_j k + \frac{1}{2} (f_{j,t} + f_{j,y} f_j) k^2 + O(k^3) \\&= f_j k + \frac{1}{2} k^2 f_{j,t} + \frac{1}{2} k^2 f_{j,y} f_j + O(k^3)\end{aligned}$$

Substituindo as duas expansões acima na expressão do erro de truncamento local chega-se a:

$$\epsilon_j(k) = (1 - a - b) k f_j + \left(\frac{1}{2} - \alpha b\right) f_{j,t} k^2 + \left(\frac{1}{2} - \beta b\right) f_{j,y} f_j k^2 + O(k^3)$$

# Relações Necessárias para RK2

Logo, como o erro local de truncamento é uma ordem maior que o erro global de truncamento, para que a ordem deste seja  $O(k^2)$ , deve-se ter, como já antecipado:

$$\begin{aligned} (1 - a - b) &= 0 \\ \left(\frac{1}{2} - \alpha b\right) &= 0 \\ \left(\frac{1}{2} - \beta b\right) &= 0 \end{aligned} \Rightarrow \begin{cases} a + b = 1 \\ 2\alpha b = 1 \\ \alpha = \beta \end{cases}$$

# Método de Runge-Kutta Clássico

O método de Runge-Kutta Clássico é um método de ordem 4, dado por:

$$f_1 = f(t_j, y_j)$$

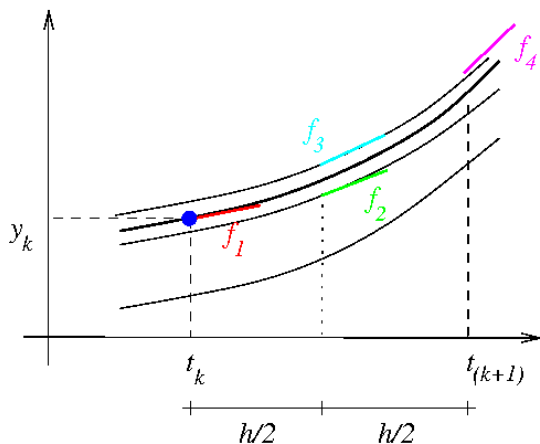
$$f_2 = f\left(t_j + \frac{k}{2}, y_j + \frac{k}{2}f_1\right)$$

$$f_3 = f\left(t_j + \frac{k}{2}, y_j + \frac{k}{2}f_2\right)$$

$$f_4 = f(t_j + k, y_j + kf_3)$$

$$y_{j+1} = y_j + k \left( \frac{f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4}{6} \right)$$

# Runge-Kutta Clássico - Interpretação Geométrica



## *Ghost Points*

Tomando como ponto de partida a equação:

$$Mu''(t) + Cu'(t) + Ku(t) = F(t)$$

## *Ghost Points*

Tomando como ponto de partida a equação:

$$Mu''(t) + Cu'(t) + Ku(t) = F(t)$$

Uma alternativa para a sua solução numérica é utilizar aproximações em diferenças para as derivadas:

$$M \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{k^2} + C \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2k} + Ku_j = F_j$$

## Ghost Points

Tomando como ponto de partida a equação:

$$Mu''(t) + Cu'(t) + Ku(t) = F(t)$$

Uma alternativa para a sua solução numérica é utilizar aproximações em diferenças para as derivadas:

$$M \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{k^2} + C \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2k} + Ku_j = F_j$$

Pode-se ser reescrita como:

$$u_{j+1} = \left\{ \frac{M}{k^2} + \frac{C}{2k} \right\}^{-1} \left( F_j - \left( K - \frac{2M}{k^2} \right) u_j - \left( \frac{M}{k^2} - \frac{C}{2k} \right) u_{j-1} \right)$$

## *Ghost Points*

A expressão acima pode ser simplificada:

$$u_{j+1} = aF_j + bu_j + cu_{j-1}$$



## *Ghost Points*

A expressão acima pode ser simplificada:

$$u_{j+1} = aF_j + bu_j + cu_{j-1}$$

Para se completar a definição do PVI e utilizar a expressão acima, devem ser incluídas as condições iniciais:

$$u(0) = \bar{u}_0 \quad \text{e} \quad u'(0) = \bar{u}'_0$$

## Ghost Points

A expressão acima pode ser simplificada:

$$u_{j+1} = aF_j + bu_j + cu_{j-1}$$

Para se completar a definição do PVI e utilizar a expressão acima, devem ser incluídas as condições iniciais:

$$u(0) = \bar{u}_0 \quad \text{e} \quad u'(0) = \bar{u}'_0$$

Para inserir a segunda condição de contorno e iniciar o processo de solução uma alternativa é utilizar:

$$u'(0) = \frac{u(t_1) - u(t_{-1})}{2k} + O(k^2)$$

# *Ghost Points*

Logo :

$$u_1 = 2k\bar{u}'_0 + u_{-1}$$

## *Ghost Points*

Logo :

$$u_1 = 2k\bar{u}'_0 + u_{-1}$$

Utilizando a expressão simplificada acima para  $j = 0$ :

$$u_1 = aF_0 + bu_0 + cu_{-1}$$

## Ghost Points

Logo :

$$u_1 = 2k\bar{u}'_0 + u_{-1}$$

Utilizando a expressão simplificada acima para  $j = 0$ :

$$u_1 = aF_0 + bu_0 + cu_{-1}$$

Pode-se determinar  $u_{-1}$  como:

$$u_{-1} = (1 - c)^{-1}(aF_0 + bu_0 - 2k\bar{u}'_0)$$

Além do *ghost point*,  $t = t_{-1}$ , houve a necessidade de se introduzir uma aproximação nas condições de contorno.

## Ghost Points

Logo :

$$u_1 = 2k\bar{u}'_0 + u_{-1}$$

Utilizando a expressão simplificada acima para  $j = 0$ :

$$u_1 = aF_0 + bu_0 + cu_{-1}$$

Pode-se determinar  $u_{-1}$  como:

$$u_{-1} = (1 - c)^{-1}(aF_0 + bu_0 - 2k\bar{u}'_0)$$

Além do *ghost point*,  $t = t_{-1}$ , houve a necessidade de se introduzir uma aproximação nas condições de contorno.

Para se obter um método  $O(k^2)$  é necessário que a aproximação nas condições de contorno sejam de mesma ordem.

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

No caso mais simples, da força externa só depender do deslocamento  $y$ , tem-se:

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} - F(y) = 0$$

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

No caso mais simples, da força externa só depender do deslocamento  $y$ , tem-se:

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} - F(y) = 0$$

Logo, o trabalho total realizado ao longo de um determinado tempo pode ser escrito como:

$$\int_0^t (my'' - F(y)) y' dt = 0$$



# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

No caso mais simples, da força externa só depender do deslocamento  $y$ , tem-se:

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} - F(y) = 0$$

Logo, o trabalho total realizado ao longo de um determinado tempo pode ser escrito como:

$$\int_0^t (my'' - F(y)) y' dt = 0$$

A fazendo  $dy' = y'' dt$ , a primeira parcela pode ser escrita como:

$$m \int_0^t y' dy' = m \frac{(y')^2}{2} - m \frac{(y'(0))^2}{2}$$

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

Assumindo que a força externa, deriva de um potencial, isto é:

$$\frac{dV}{dy} = -F(y)$$

Então a segunda parcela pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\int_0^t \frac{dV}{dy} y' dt &= \int_0^t \frac{dV}{dt} dt \\ &= V(t) - V(0)\end{aligned}$$

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

Assumindo que a força externa, deriva de um potencial, isto é:

$$\frac{dV}{dy} = -F(y)$$

Então a segunda parcela pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\int_0^t \frac{dV}{dy} y' dt &= \int_0^t \frac{dV}{dt} dt \\ &= V(t) - V(0)\end{aligned}$$

Logo:

$$\int_0^t (my'' - F(y)) y' dt = m \frac{(y')^2}{2} + V(t) - \left( m \frac{(y'(0))^2}{2} + V(0) \right) = 0$$

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

Pode-se também definir a função  $H(t)$ , o Hamiltoniano do sistema, como:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V$$

onde a primeira parcela é a energia cinética e a segunda a energia potencial.

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

Pode-se também definir a função  $H(t)$ , o Hamiltoniano do sistema, como:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V$$

onde a primeira parcela é a energia cinética e a segunda a energia potencial.

Para o caso acima:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V = \frac{m}{2}(y'(0))^2 + V(0)$$

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

Pode-se também definir a função  $H(t)$ , o Hamiltoniano do sistema, como:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V$$

onde a primeira parcela é a energia cinética e a segunda a energia potencial.

Para o caso acima:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V = \frac{m}{2}(y'(0))^2 + V(0)$$

logo os sistemas cuja força externa deriva de um potencial são ditos conservativos, pois a energia total do sistema é conservada.

# Métodos Conservativos

## Segunda Lei de Newton

Pode-se também definir a função  $H(t)$ , o Hamiltoniano do sistema, como:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V$$

onde a primeira parcela é a energia cinética e a segunda a energia potencial.

Para o caso acima:

$$H(t) = \frac{m}{2}(y')^2 + V = \frac{m}{2}(y'(0))^2 + V(0)$$

logo os sistemas cuja força externa deriva de um potencial são ditos conservativos, pois a energia total do sistema é conservada.

Em tais situações se deseja que os métodos aproximados também tenham esta característica.

# Métodos Conservativos

Diferentemente do que foi feito anteriormente, reescreve-se a EDO original, de segunda ordem, como um sistema de primeira ordem:

$$\begin{aligned}y' &= v, \\v' &= \frac{1}{m}F(y)\end{aligned}$$

Pode-se utilizar o Método Trapezoidal (implícito) pois este conserva a energia:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + \frac{k}{2}(v_{j+1} + v_j), \\v_{j+1} &= v_j + \frac{k}{2}(F(y_{j+1}) + F(y_j)).\end{aligned}$$



# Métodos Conservativos

Diferentemente do que foi feito anteriormente, reescreve-se a EDO original, de segunda ordem, como um sistema de primeira ordem:

$$\begin{aligned}y' &= v, \\v' &= \frac{1}{m}F(y)\end{aligned}$$

Pode-se utilizar o Método Trapezoidal (implícito) pois este conserva a energia:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + \frac{k}{2}(v_{j+1} + v_j), \\v_{j+1} &= v_j + \frac{k}{2}(F(y_{j+1}) + F(y_j)).\end{aligned}$$

É possível obter um método explícito que conserva a energia ?

# Métodos Conservativos

Solução: aproximar  $v_{j+1}$  na primeira aproximação utilizando o método de Euler (Euler Modificado):

$$v_{j+1} = v_j + \frac{k}{m} F(y_j)$$

Assim chega-se ao método *velocity Verlet*:

$$y_{j+1} = y_j + kv_j + \frac{k^2}{2m} F(y_j),$$

$$v_{j+1} = v_j + \frac{k}{2}(F(y_{j+1}) + F(y_j)).$$

Explícito, precisão  $O(k^2)$ , e com uma avaliação de  $F$  por passo, e também aproxima bem a energia por longos períodos de tempo.

## Exemplo: Oscilador Harmônico Linear

Neste caso  $F = -y$  e  $H = (y')^2/2 + y^2/2$ .

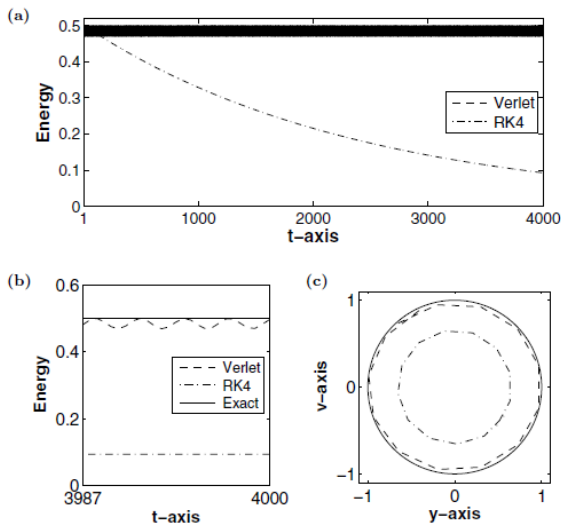
Tomando como condições iniciais:  $y(0) = 1$  e  $y'(0) = 0$ , a solução exata é

$$y(t) = \cos(t)$$

$$v(t) = \sin(t)$$

e portanto  $H = 1/2$  e os pontos da solução estão em uma circunferência de raio unitário  $y^2 + v^2 = 1$ .

# Exemplo: Oscilador Harmônico Linear



**Figure 1.9.** In (a) the energy, or Hamiltonian,  $H$  computed for the linear harmonic oscillator using the velocity Verlet and RK4 methods are shown. The energy over the smaller time interval  $3987 \leq t \leq 4000$  is shown in (b). The corresponding values of  $(y, v)$ , for  $3987 \leq t \leq 4000$ , are shown in (c).

# Método do Trapézio é conservativo

## Método $\theta$

$$y_{j+1} = y_j + k\theta f_{j+1} + k(1 - \theta)f_j \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

Implícito se  $\theta \neq 0$ .

# Método do Trapézio é conservativo

## Método $\theta$

$$y_{j+1} = y_j + k\theta f_{j+1} + k(1 - \theta)f_j \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

Implícito se  $\theta \neq 0$ .

Aplicado ao problema do oscilador harmônico:

$$y_{j+1} = y_j + k\theta v_{j+1} + k(1 - \theta)v_j$$

$$v_{j+1} = v_j + k\theta(-y_{j+1}) + k(1 - \theta)(-y_j)$$

# Método do Trapézio é conservativo

## Método $\theta$

$$y_{j+1} = y_j + k\theta f_{j+1} + k(1 - \theta)f_j \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

Implícito se  $\theta \neq 0$ .

Aplicado ao problema do oscilador harmônico:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + k\theta v_{j+1} + k(1 - \theta)v_j \\ v_{j+1} &= v_j + k\theta(-y_{j+1}) + k(1 - \theta)(-y_j) \end{aligned}$$

Pode ser re-escrito matricialmente como:

$$\begin{bmatrix} 1 & -k\theta \\ k\theta & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} y_{j+1} \\ v_{j+1} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & k(1 - \theta) \\ -k(1 - \theta) & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} y_j \\ v_j \end{Bmatrix}$$

# Método do Trapézio é conservativo

Explicitando os valores no passo  $j + 1$ :

$$\begin{Bmatrix} y_{j+1} \\ v_{j+1} \end{Bmatrix} = \frac{1}{(1 + k^2\theta^2)} \begin{bmatrix} 1 & k\theta \\ -k\theta & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & k(1 - \theta) \\ -k(1 - \theta) & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} y_j \\ v_j \end{Bmatrix}$$

Efetuando o produto matricial:

$$\begin{Bmatrix} y_{j+1} \\ v_{j+1} \end{Bmatrix} = \frac{1}{(1 + k^2\theta^2)} \begin{bmatrix} 1 - k^2\theta + k^2\theta^2 & k \\ -k & 1 - k^2\theta + k^2\theta^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} y_j \\ v_j \end{Bmatrix}$$

Que pode ser escrita simplificadamente como:

$$\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{A}\mathbf{y}_j$$



# Método do Trapézio é conservativo

Logo  $H_{j+1}$  pode ser escrito como:

$$H_{j+1} = \frac{1}{2} \mathbf{y}_{j+1}^T \mathbf{y}_{j+1}$$

# Método do Trapézio é conservativo

Logo  $H_{j+1}$  pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} H_{j+1} &= \frac{1}{2} \mathbf{y}_{j+1}^T \mathbf{y}_{j+1} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{y}_j^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y}_j \end{aligned}$$

# Método do Trapézio é conservativo

Logo  $H_{j+1}$  pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} H_{j+1} &= \frac{1}{2} \mathbf{y}_{j+1}^T \mathbf{y}_{j+1} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{y}_j^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y}_j \end{aligned}$$

E efetuando o produto matricial obtem-se:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \frac{1 + k^2 + k^2 \theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2 \theta^2} \mathbf{I}$$

# Método do Trapézio é conservativo

Logo  $H_{j+1}$  pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} H_{j+1} &= \frac{1}{2} \mathbf{y}_{j+1}^T \mathbf{y}_{j+1} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{y}_j^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y}_j \end{aligned}$$

E efetuando o produto matricial obtem-se:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \frac{1 + k^2 + k^2 \theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2 \theta^2} \mathbf{I}$$

Logo,

$$\begin{aligned} H_{j+1} &= \frac{1 + k^2 + k^2 \theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2 \theta^2} \frac{1}{2} \mathbf{y}_j^T \mathbf{y}_j \\ &= \frac{1 + k^2 + k^2 \theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2 \theta^2} H_j \end{aligned}$$

# Método do Trapézio é conservativo

E para que H seja constante, deve-se satisfazer:

$$\frac{1 + k^2 + k^2\theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2\theta^2} = 1$$

ou seja :

$$1 + k^2 + k^2\theta^2 - 2\theta k^2 = 1 + k^2\theta^2$$

# Método do Trapézio é conservativo

E para que H seja constante, deve-se satisfazer:

$$\frac{1 + k^2 + k^2\theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2\theta^2} = 1$$

ou seja :

$$1 + k^2 + k^2\theta^2 - 2\theta k^2 = 1 + k^2\theta^2$$

Logo:

$$k^2 - 2\theta k^2 = 0$$

# Método do Trapézio é conservativo

E para que H seja constante, deve-se satisfazer:

$$\frac{1 + k^2 + k^2\theta^2 - 2\theta k^2}{1 + k^2\theta^2} = 1$$

ou seja :

$$1 + k^2 + k^2\theta^2 - 2\theta k^2 = 1 + k^2\theta^2$$

Logo:

$$k^2 - 2\theta k^2 = 0 \quad \rightarrow \quad \theta = \frac{1}{2}$$

O que significa que para todos os valores de  $\theta$ , o único que gera um método conservativo é  $1/2$ , que dá origem o método Trapezoidal.

# Problemas de Valor Inicial

Definição do Problema

Obtenção de Métodos por Aproximação das Derivadas

Método de Euler

Obtenção de Métodos por Integração Numérica

Métodos de Adams

Métodos Runge-Kutta

Método de Euler Modificado

Condicionamento dos Problemas

Problemas *Stiff*



# Condicionamento dos Problemas

## Problema Mal Condicionado (1)

Considere o PVI:

$$y'' - 10y' - 11y = 0 \quad \text{com} \quad y(0) = 1 \quad \text{e} \quad y'(0) = -1$$

Solução:

$$y(t) = e^{-t}$$

# Condicionamento dos Problemas

## Problema Mal Condicionado (1)

Considere o PVI:

$$y'' - 10y' - 11y = 0 \quad \text{com} \quad y(0) = 1 \quad \text{e} \quad y'(0) = -1$$

Solução:

$$y(t) = e^{-t}$$

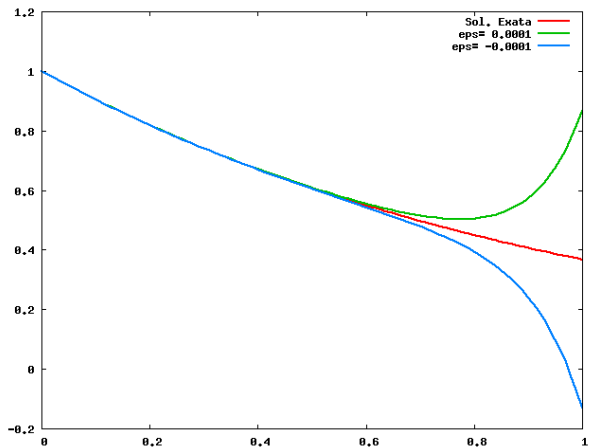
Com uma pequena variação nas condições iniciais:

$$y(0) = 1 + \varepsilon \quad \text{e} \quad y'(0) = -1$$

A solução passa a ser:

$$y(t) = \left(1 + \frac{11}{12}\varepsilon\right)e^{-t} + \frac{\varepsilon}{12}e^{11t}$$

# Problema Mal Condicionado (1)



## Problema Mal Condicionado (2)

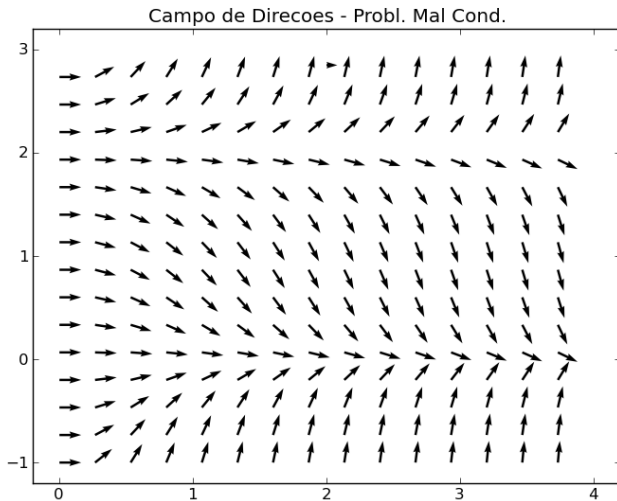
Analogamente para a equação não-linear:

$$y'(t) = t y (y - 2) \quad \text{com} \quad y(0) = 2$$

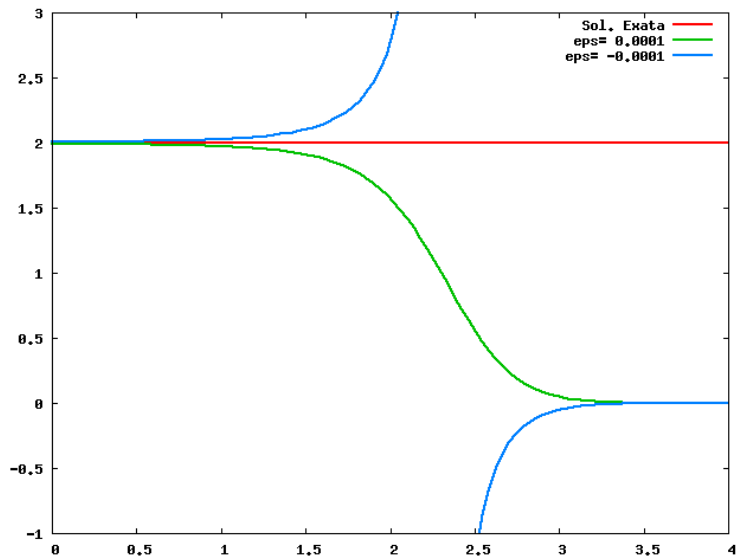
cuja solução é:

$$y(t) = \frac{2y_0}{y_0 + (2 - y_0)e^{t^2}}$$

## Problema Mal Condicionado (2)



## Problema Mal Condicionado (2)



# Problemas de Valor Inicial

Definição do Problema

Obtenção de Métodos por Aproximação das Derivadas

Método de Euler

Obtenção de Métodos por Integração Numérica

Métodos de Adams

Métodos Runge-Kutta

Método de Euler Modificado

Condicionamento dos Problemas

Problemas *Stiff*

# Problemas *Stiff*

Seja o PVI:

$$y' = -100y + 100 \quad \text{com} \quad y(0) = y_0,$$

cujas solução exata é dada por:

$$y(t) = 1 + (y_0 - 1)e^{-100t}$$



# Problemas *Stiff*

Seja o PVI:

$$y' = -100y + 100 \quad \text{com} \quad y(0) = y_0,$$

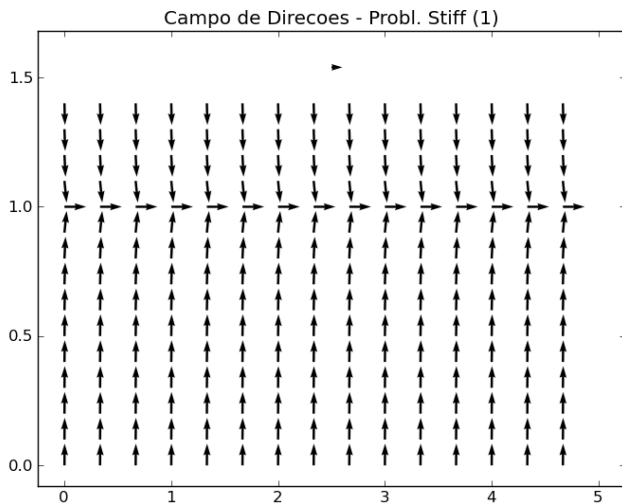
cujas solução exata é dada por:

$$y(t) = 1 + (y_0 - 1)e^{-100t}$$

A solução é estável já que para uma condição inicial  $y_0 + \varepsilon$  a solução tem um acréscimo de  $\varepsilon e^{-100t}$ .

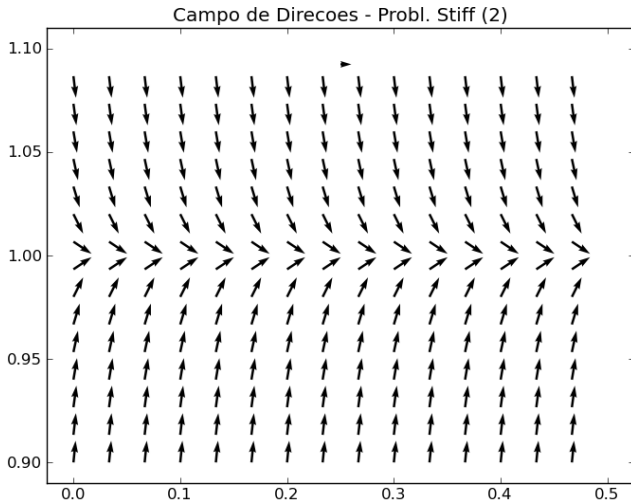
# Problemas *Stiff*

## Campo de Direções



# Problemas *Stiff*

## Campo de Direções - Detalhe



## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$y_{j+1} = y_j + k(-100y_j + 100)$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k \end{aligned}$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k \end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$y_0 = 2$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k \end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$y_0 = 2$$

$$y_1 = (1 - 100k)2 + 100k$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$y_0 = 2$$

$$y_1 = (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k)$$



## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$y_0 = 2$$

$$y_1 = (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k)$$

$$y_2 = (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)] + 100k$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$\begin{aligned}y_0 &= 2 \\ y_1 &= (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k) \\ y_2 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)] + 100k \\ &= (1 - 100k) + (1 - 100k)^2 + 100k\end{aligned}$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$\begin{aligned}y_0 &= 2 \\ y_1 &= (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k) \\ y_2 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)] + 100k \\ &= (1 - 100k) + (1 - 100k)^2 + 100k = 1 + (1 - 100k)^2\end{aligned}$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$y_0 = 2$$

$$y_1 = (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k)$$

$$\begin{aligned}y_2 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)] + 100k \\ &= (1 - 100k) + (1 - 100k)^2 + 100k = 1 + (1 - 100k)^2\end{aligned}$$

$$y_3 = (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)^2] + 100k$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$\begin{aligned}y_0 &= 2 \\ y_1 &= (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k) \\ y_2 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)] + 100k \\ &= (1 - 100k) + (1 - 100k)^2 + 100k = 1 + (1 - 100k)^2 \\ y_3 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)^2] + 100k = 1 + (1 - 100k)^3 \\ &\vdots\end{aligned}$$

## Problemas *Stiff*

Assumindo, por exemplo,  $y_0 = 2$ , a solução exata fica:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

e aplicação do Método de Euler fornece:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + k(-100y_j + 100) \\ &= (1 - 100k)y_j + 100k\end{aligned}$$

Mais especificamente:

$$\begin{aligned}y_0 &= 2 \\ y_1 &= (1 - 100k)2 + 100k = 1 + (1 - 100k) \\ y_2 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)] + 100k \\ &= (1 - 100k) + (1 - 100k)^2 + 100k = 1 + (1 - 100k)^2 \\ y_3 &= (1 - 100k)[1 + (1 - 100k)^2] + 100k = 1 + (1 - 100k)^3 \\ &\vdots \\ y_j &= 1 + (1 - 100k)^j\end{aligned}$$

# Problemas *Stiff*

Comparando a solução exata:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

com a aproximada pelo método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

Percebe-se que  $(1 - 100k)^j$  é uma aproximação para  $e^{-100t}$ .

Apesar deste termo se tornar rapidamente desprezível a medida que  $t$  cresce,  $k$  deve ser mantido pequeno para que não se perca a estabilidade.

# Problemas *Stiff*

Comparando a solução exata:

$$y(t) = 1 + e^{-100t},$$

com a aproximada pelo método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

Percebe-se que  $(1 - 100k)^j$  é uma aproximação para  $e^{-100t}$ .

Apesar deste termo se tornar rapidamente desprezível a medida que  $t$  cresce,  $k$  deve ser mantido pequeno para que não se perca a estabilidade. O comportamento acima é típico:

**Problemas *Stiff*** A solução contém uma componente que contribui pouco com a solução, mas, se o método é condicionalmente estável, força que o passo seja reduzido para que se garanta a estabilidade.



## Problemas *Stiff*

Para que a solução do Método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

seja limitada como a solução exata, devemos ter:

$$-1 < 1 - 100k < 1$$

# Problemas *Stiff*

Para que a solução do Método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

seja limitada como a solução exata, devemos ter:

$$-1 < 1 - 100k < 1$$

$$-2 < -100k < 0$$

# Problemas *Stiff*

Para que a solução do Método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

seja limitada como a solução exata, devemos ter:

$$-1 < 1 - 100k < 1$$

$$-2 < -100k < 0$$

$$0 < 100k < 2$$

# Problemas *Stiff*

Para que a solução do Método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

seja limitada como a solução exata, devemos ter:

$$\begin{array}{rcl} -1 < 1 - 100k < 1 \\ -2 < -100k < 0 \\ 0 < 100k < 2 \\ 0 < k < 0,02 \end{array}$$

# Problemas *Stiff*

Para que a solução do Método de Euler

$$y_j = 1 + (1 - 100k)^j$$

seja limitada como a solução exata, devemos ter:

$$-1 < 1 - 100k < 1$$

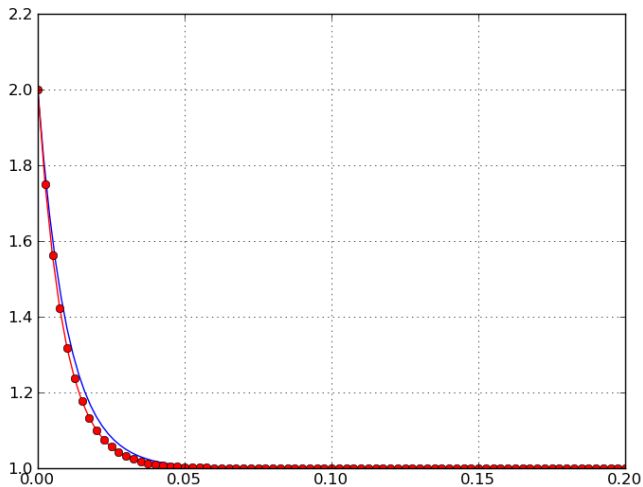
$$-2 < -100k < 0$$

$$0 < 100k < 2$$

$$0 < k < 0,02$$

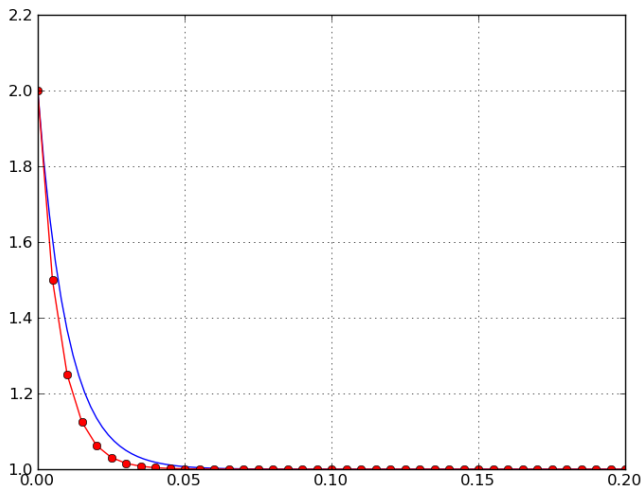
Sendo que se  $0,01 < k < 0,02$  o comportamento é oscilatório.

# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



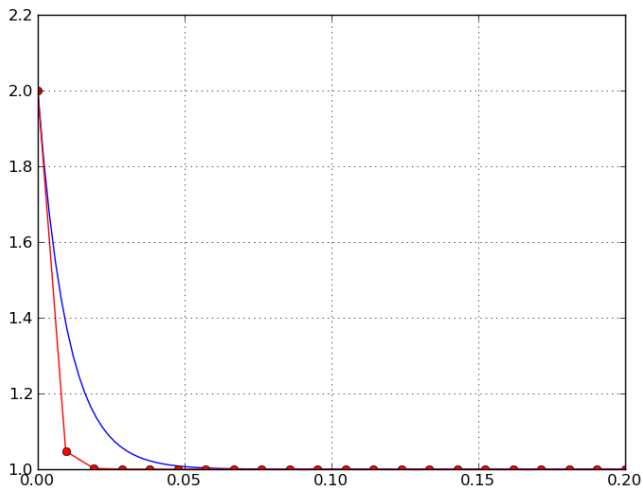
Método de Euler;  $M=80$ ;  $k = 0,2/80 = 0,0025$

# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



Método de Euler;  $M=40$ ;  $k = 0,2/40 = 0,005$

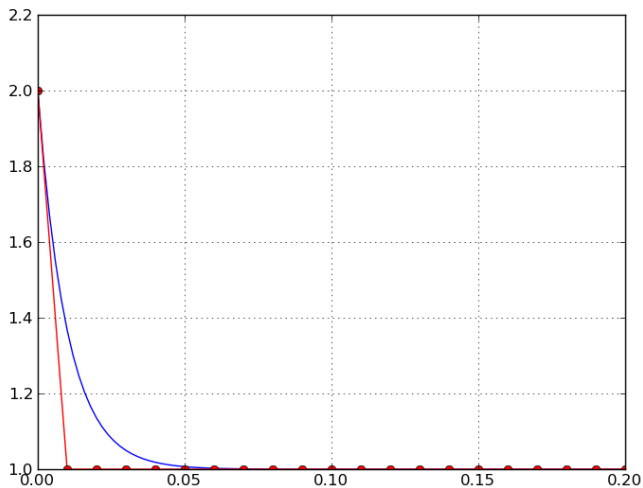
# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



Método de Euler;  $M=21$ ;  $k = 0,2/21 = 0,00952$

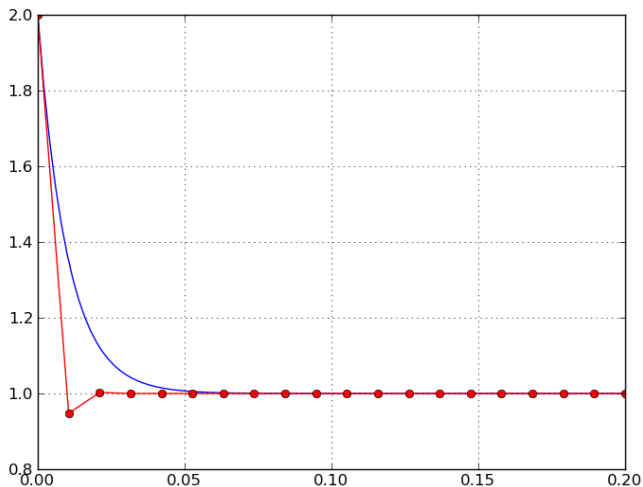


# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



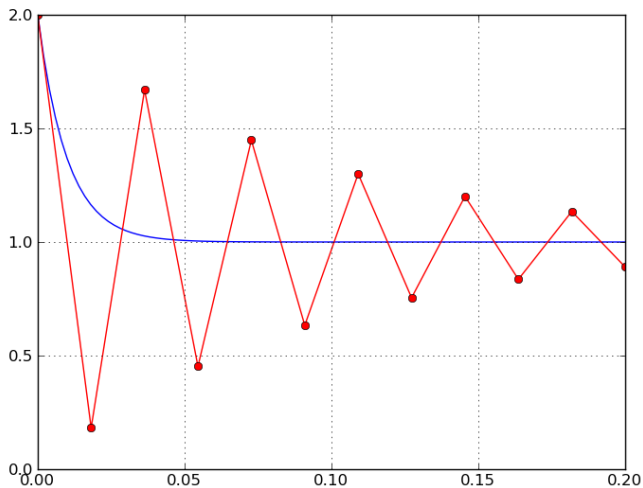
Método de Euler;  $M=20$ ;  $k = 0,2/20 = 0,01$

## Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



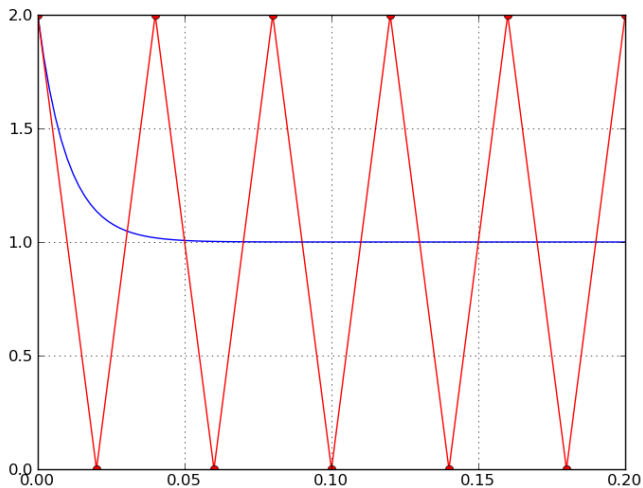
Método de Euler;  $M=19$ ;  $k = 0,2/19 = 0,010526$

# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



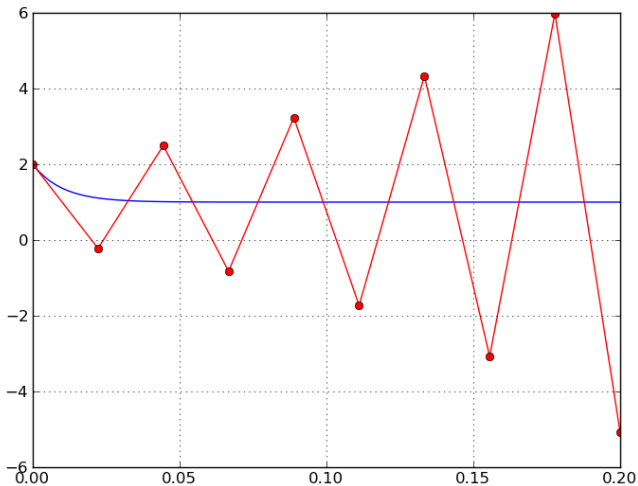
Método de Euler;  $M=11$ ;  $k = 0,2/11 = 0,01818$

# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



Método de Euler;  $M=10$ ;  $k = 0,2/10 = 0,02$

# Problema *Stiff*: $y' = -100y + 100$



Método de Euler;  $M=9$ ;  $k = 0,2/9 = 0,0222$