Curso: Métodos Numéricos II
Professor: Creto Augusto Vidal
Semestre: 2020.1
Aula # 26

1. Objetivo: Solução Aproximada de Problemas de Valores Iniciais (PVI) (continuação).

Nesta Aula, são apresentados os seguintes métodos:

- Métodos de passos múltiplos (continuação): método de predição e correção.

2. Solução aproximada de um problema de valor inicial

A **solução aproximada** de um PVI parte da condição inicial e busca aproximações da solução da equação diferencial, isto é, aproximações de $S(t)$, em uma sequência de valores discretos da variável t.

Para resolver um PVI de forma aproximada, a descrição original do problema tem que ser transformada para o seguinte formato (EDO de primeira ordem)

(1) PVI: $\begin{cases} \frac{\mathrm{d}S(t)}{\mathrm{d}t} = \mathcal{F}(S(t),t) \\ S(t_0) = S_0 \end{cases}$,

onde $S(t)$ é o estado do problema e S_0 é o estado inicial do problema.

Portanto, partindo do ponto inicial, o estado do problema será obtido nos seguintes pontos:

(2) $S_0, S_1, S_2, S_3, S_4, \cdots, S_{i-1}, S_i, S_{i+1}, \cdots$

onde $S_i \approx S(t_0 + i\,\Delta t)$.

3. Métodos de passos múltiplos do tipo predição e correção

Os métodos de passos múltiplos apresentados aqui são métodos explícitos que consistem em duas fases: uma fase de predição (primeira estimativa de S_{i+1}) e uma fase de correção (melhoramento da solução S_{i+1}). Há várias maneiras de desenvolver a fórmula

(3) $S_{i+1} = G(S_{i-k}, \cdots, S_{i-1}, S_i, \Delta t, L_p)$,

dos métodos de passos múltiplos particularizadas para os métodos de predição e correção.

Suponha que o problema (1) já tenha sido resolvido para os passos $S_0, S_1, S_2, S_3, S_4, \cdots, S_{i-1}, S_i$. A equação diferencial ordinária na equação (1) pode ser reescrita na forma diferencial como

(4) $\frac{\mathrm{d}S(t)}{\mathrm{d}t} = \mathcal{F}(S(t),t) \Longrightarrow \mathrm{d}S = \mathcal{F}(S(t),t)\mathrm{d}t$.

Integrando-se os dois lados no intervalo $[t_i, t_{i+1}]$, tem-se

(5) $\int_{S_i}^{S_{i+1}} \mathrm{d}S = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathcal{F}(S(t),t)\mathrm{d}t \Longrightarrow S_{i+1} - S_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathcal{F}(S(t),t)\mathrm{d}t$.

Logo, a expressão em (5) pode ser reescrita como

(6) $S_{i+1} = S_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathcal{F}(S(t),t)\mathrm{d}t$.

A expressão (6) é uma maneira, ainda abstrata, de representar a expressão (3) dos métodos de passos múltiplos. Para deixá-la menos abstrata, observe o seguinte:

1. Dado o estado S_i, a derivada da função $S(t)$ no instante t_i é dada por

(7) $\frac{dS(t_i)}{dt} = \mathcal{F}(S(t_i), t_i) \approx \mathcal{F}(S_i, t_i)$; e

2. Se uma aproximação da função $\frac{dS(t)}{dt}$ for conhecida (suponha que ela seja chamada de $g(t)$) ela poderá ser usada em

(8) $\int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathcal{F}(S(t), t)dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{dS(t)}{dt} dt \approx \int_{t_i}^{t_{i+1}} g(t)\, dt.$

Assim, a expressão (6) pode ser reescrita como

(9) $S_{i+1} = S_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} g(t)\, dt.$

Note que, para cada novo valor do estado obtido em um dado instante de tempo, a estimativa da derivada naquele instante de tempo pode ser calculada pela equação (7). Assim, se os estados $S_0, S_1, S_2, S_3, S_4, \cdots, S_{i-1}, S_i$ tiverem sido determinados, as derivadas correspondentes, $\mathcal{F}(S_0, t_0), \mathcal{F}(S_1, t_1), \mathcal{F}(S_2, t_2), \mathcal{F}(S_3, t_3), \mathcal{F}(S_4, t_4), \cdots, \mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1}), \mathcal{F}(S_i, t_i)$ são calculadas pela equação (7).

Portanto, é possível construir a função $g(t)$ como uma função de interpolação passando pelas derivadas dos últimos $k+1$ estados, isto é, por $\{\mathcal{F}(S_{i-k}, t_{i-k}), \cdots, \mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1}), \mathcal{F}(S_i, t_i)\}$. Na Figura 1, k é igual a três. Assim, para o caso da Figura 1, a fórmula (9) ficaria uma função explícita de S_i e das derivadas dos quatro últimos estados.

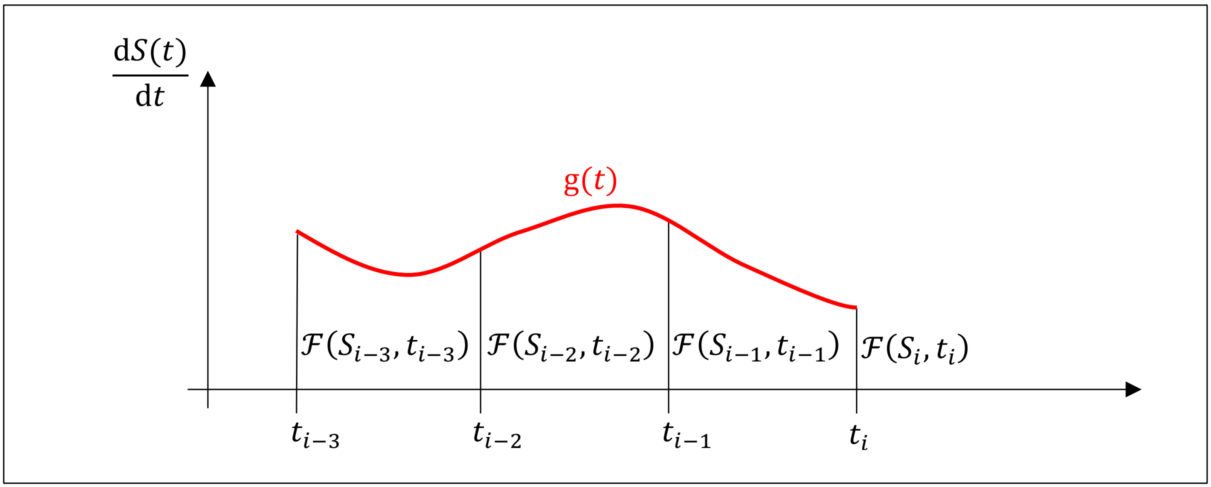

Figura 1. Função de interpolação das derivadas dos quatro últimos estados.

3.1 Método de passos múltiplos de segunda ordem (Adams-Bashforth)

Neste método, $k = 1$. Portanto, apenas os pontos $(t_{i-1}, \mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1}))$ e $(t_i, \mathcal{F}(S_i, t_i))$ serão usados para construir a função $\frac{dS(t)}{dt} \approx g(t)$ que será usada como integrando na equação (9). Neste caso muito simples, a função $g(t)$ é a função de interpolação linear (uma reta) que pode ser escrita facilmente com as funções de interpolação de Lagrange como

$$
\begin{aligned}
g(t) &= L_{i-1}(t)\,\mathcal{F}(S_{i-1},t_{i-1}) + L_i(t)\quad \mathcal{F}(S_i,t_i) \\
&= \frac{(t-t_i)}{(t_{i-1}-t_i)}\mathcal{F}(S_{i-1},t_{i-1}) + \frac{(t-t_{i-1})}{(t_i-t_{i-1})}\mathcal{F}(S_i,t_i) \\
&= \frac{1}{\Delta t}[-(t-t_i)\mathcal{F}(S_{i-1},t_{i-1}) + (t-t_{i-1})\mathcal{F}(S_i,t_i)]
\end{aligned} \tag{10}
$$

Para simplificar a notação, $\mathcal{F}(S_{i-1},t_{i-1})$ e $\mathcal{F}(S_i,t_i)$ serão escritas como $\mathcal{F}_{i-1}$ e $\mathcal{F}_i$ respectivamente. Assim, a equação (10) pode ser escrita como

$$
\begin{aligned}
g(t) &= \frac{1}{\Delta t}[-(t-t_i)\mathcal{F}_{i-1} + (t-t_{i-1})\mathcal{F}_i] \\
&= \frac{1}{\Delta t}[(\mathcal{F}_i-\mathcal{F}_{i-1})t + (t_i\mathcal{F}_{i-1} - t_{i-1}\mathcal{F}_i)].
\end{aligned} \tag{11}
$$

Substituindo-se (11) em (9), tem-se

$$
\begin{aligned}
S_{i+1} &= S_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{1}{\Delta t}[(\mathcal{F}_i-\mathcal{F}_{i-1})t + (t_i\mathcal{F}_{i-1} - t_{i-1}\mathcal{F}_i)]\,\mathrm{d}t \\
&= S_i + \frac{1}{\Delta t}(\mathcal{F}_i-\mathcal{F}_{i-1})\frac{1}{2}t^2\Big|_{t_i}^{t_{i+1}} + \frac{1}{\Delta t}(t_i\mathcal{F}_{i-1} - t_{i-1}\mathcal{F}_i)t\Big|_{t_i}^{t_{i+1}} \\
&= S_i + \frac{1}{\Delta t}(\mathcal{F}_i-\mathcal{F}_{i-1})\frac{1}{2}({t_{i+1}}^2 - {t_i}^2) + \frac{1}{\Delta t}(t_i\mathcal{F}_{i-1} - t_{i-1}\mathcal{F}_i)(t_{i+1}-t_i) \\
&= S_i + \frac{1}{\Delta t}(\mathcal{F}_i-\mathcal{F}_{i-1})\frac{1}{2}(t_{i+1}+t_i)\Delta t + \frac{1}{\Delta t}(t_i\mathcal{F}_{i-1} - t_{i-1}\mathcal{F}_i)\Delta t \\
&= S_i + (\mathcal{F}_i-\mathcal{F}_{i-1})\frac{1}{2}(t_{i+1}+t_i) + (t_i\mathcal{F}_{i-1} - t_{i-1}\mathcal{F}_i) \\
&= S_i + \mathcal{F}_{i-1}\left(t_i - \frac{1}{2}t_i - \frac{1}{2}t_{i+1}\right) + \mathcal{F}_i\left(\frac{1}{2}t_{i+1} - \frac{1}{2}t_{i-1} + \frac{1}{2}t_i - \frac{1}{2}t_{i-1}\right) \\
&= S_i + \mathcal{F}_{i-1}\left(-\frac{\Delta t}{2}\right) + \mathcal{F}_i\left(\frac{3}{2}\Delta t\right)
\end{aligned} \tag{12}
$$

Assim, a chamada fórmula de predição é

$$\bar{S}_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{2}(-\mathcal{F}_{i-1} + 3\mathcal{F}_i). \tag{13}$$

Agora que se tem uma estimativa de $\bar{S}_{i+1}$ calculada a partir da história de curto prazo (apenas os dois últimos estados) dos estados anteriores, pode-se repetir o processo, construindo $g(t)$ a partir dos pontos $\big(t_i, \mathcal{F}(S_i,t_i)\big)$ e $\big(t_{i+1}, \mathcal{F}(\bar{S}_{i+1},t_{i+1})\big)$. Assim

$$
\begin{aligned}
g(t) &= L_i(t)\mathcal{F}(S_i,t_i) + L_{i+1}(t)\mathcal{F}(\bar{S}_{i+1},t_{i+1}) \\
&= \frac{(t-t_{i+1})}{(t_i-t_{i+1})}\mathcal{F}(S_i,t_i) + \frac{(t-t_i)}{(t_{i+1}-t_i)}\mathcal{F}(\bar{S}_{i+1},t_{i+1}) \\
&= \frac{1}{\Delta t}[-(t-t_{i+1})\mathcal{F}(S_i,t_i) + (t-t_i)\mathcal{F}(\bar{S}_{i+1},t_{i+1})]
\end{aligned} \tag{14}
$$

Usando a notação simplificada, a equação (14) pode ser escrita como

$$
\begin{aligned}
g(t) &= \frac{1}{\Delta t}[-(t-t_{i+1})\mathcal{F}_i + (t-t_i)\mathcal{F}_{i+1}] \\
&= \frac{1}{\Delta t}[(\mathcal{F}_{i+1}-\mathcal{F}_i)t + (t_{i+1}\mathcal{F}_i - t_i\mathcal{F}_{i+1})].
\end{aligned} \tag{15}
$$

Substituindo-se (15) em (9), tem-se

$$
\begin{aligned}
S_{i+1} &= S_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{1}{\Delta t}\left[(\mathcal{F}_{i+1} - \mathcal{F}_i)t + (t_{i+1}\mathcal{F}_i - t_i\mathcal{F}_{i+1})\right] \mathrm{d}t \\
&= S_i + \frac{1}{\Delta t}(\mathcal{F}_{i+1} - \mathcal{F}_i)\frac{1}{2}t^2\Big|_{t_i}^{t_{i+1}} + \frac{1}{\Delta t}(t_{i+1}\mathcal{F}_i - t_i\mathcal{F}_{i+1})t\Big|_{t_i}^{t_{i+1}} \\
&= S_i + \frac{1}{\Delta t}(\mathcal{F}_{i+1} - \mathcal{F}_i)\frac{1}{2}({t_{i+1}}^2 - {t_i}^2) + \frac{1}{\Delta t}(t_{i+1}\mathcal{F}_i - t_i\mathcal{F}_{i+1})(t_{i+1} - t_i) \\
&= S_i + \frac{1}{\Delta t}(\mathcal{F}_{i+1} - \mathcal{F}_i)\frac{1}{2}(t_{i+1} + t_i)\Delta t + \frac{1}{\Delta t}(t_{i+1}\mathcal{F}_i - t_i\mathcal{F}_{i+1})\Delta t \qquad (16) \\
&= S_i + (\mathcal{F}_{i+1} - \mathcal{F}_i)\frac{1}{2}(t_{i+1} + t_i) + (t_{i+1}\mathcal{F}_i - t_i\mathcal{F}_{i+1}) \\
&= S_i + \mathcal{F}_i\left(t_{i+1} - \frac{1}{2}t_{i+1} - \frac{1}{2}t_i\right) + \mathcal{F}_{i+1}\left(\frac{1}{2}t_{i+1} - \frac{1}{2}t_i + \frac{1}{2}t_i - \frac{1}{2}t_i\right) \\
&= S_i + \mathcal{F}_i\left(\frac{\Delta t}{2}\right) + \mathcal{F}_{i+1}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)
\end{aligned}
$$

Assim, a chamada fórmula de correção é

(17) $S_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{2}(\mathcal{F}_i + \mathcal{F}_{i+1})$

Note que, para usar a fórmula de predição (equação (13)), são necessários os estados dos instantes t_i e t_{i-1}. Portanto, (13) só pode começar a ser usada a partir de $i = 1$, isto é,

(18) $\bar{S}_{1+1} = S_1 + \frac{\Delta t}{2}(-\mathcal{F}_{1-1} + 3\mathcal{F}_1) \Longrightarrow \bar{S}_2 = S_1 + \frac{\Delta t}{2}(-\mathcal{F}_0 + 3\mathcal{F}_1)$.

Portanto, o estado S_1 deve ser obtido por um método de passo simples equivalente (segunda-ordem). O Método preditor-corretor de Adams-Bashforth (método de segunda ordem) pode ser sintetizado como:

Fase de inicialização: Obter o estado S_1 pelo método de Runge-Kutta de segunda ordem.

Fase de predição: Estimar o estado $\mathbf{S}_{i+1}$

(19) $\bar{\boldsymbol{S}}_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{2}(-\mathcal{F}_{i-1} + 3\mathcal{F}_i)$

Fase de correção: Atualização do estado $\mathbf{S}_{i+1}$

(20) $\boldsymbol{S}_{i+1} = S_i + \Delta t\left(\frac{1}{2}\mathcal{F}(S_i, t_i) + \frac{1}{2}\,\mathcal{F}(\bar{\boldsymbol{S}}_{i+1}, t_{i+1})\right)$.

Note que a fórmula (20) pode ser utilizada iterativamente até que $\boldsymbol{S}_{i+1}$ convirja para a tolerância especificada, isto é

$\boldsymbol{S}_{i+1}{}^{(k-1)} = \bar{\boldsymbol{S}}_{i+1}$

do

$$\boldsymbol{S}_{i+1}{}^{(k)} = S_i + \Delta t\left(\frac{1}{2}\mathcal{F}(S_i, t_i) + \frac{1}{2}\,\mathcal{F}\left(\boldsymbol{S}_{i+1}{}^{(k-1)}, t_{i+1}\right)\right).$$

while $\left(\left|\frac{\boldsymbol{S}_{i+1}{}^{(k)} - \boldsymbol{S}_{i+1}{}^{(k-1)}}{\boldsymbol{S}_{i+1}{}^{(k)}}\right| < \boldsymbol{\varepsilon}\right)$

3.2 Método de passos múltiplos de terceira ordem

Neste método, $k = 2$. Portanto, os pontos $(t_{i-2}, \mathcal{F}(S_{i-2}, t_{i-2}))$, $(t_{i-1}, \mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1}))$ e $(t_i, \mathcal{F}(S_i, t_i))$ serão usados para construir a função $\frac{\mathrm{d}S(t)}{\mathrm{d}t} \approx \mathrm{g}(t)$ que será usada como integrando na equação (9).

Neste caso, a função $\mathrm{g}(t)$ é um polinômio de interpolação de segundo grau (uma parábola). A integral que aparece na equação (9) fica mais fácil de calcular se for feita uma mudança de variáveis como no caso do desenvolvimento das fórmulas de integração de Newton-Cotes. Assim,

(21) $I = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathrm{g}(t)\,\mathrm{d}t = \int_2^3 \mathrm{g}(t(r)) \frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}r = \int_2^3 \hat{\mathrm{g}}(\mathrm{r}) \frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}r,$

onde $\hat{\mathrm{g}}(\mathrm{r})$ é o polinômio de interpolação de Newton de segundo grau na variável r com os pontos de interpolação $\mathcal{F}(S_{i-2}, t_{i-2})$, $\mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1})$ e $\mathcal{F}(S_i, t_i)$, e $t(r)$ é a parametrização da variável t como função da nova variável r em que $r = 0$ corresponde a t_{i-2}. Assim, tem-se

(22) $t(r) = t_{i-2} + r\,\Delta t,$

(23) $\frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} = \Delta t,$

(24) $\hat{\mathrm{g}}(\mathrm{r}) = \sum_{i=0}^{2} \Delta_0^i \mathcal{F}_{i-2} \frac{r!}{i!(r-i)!} = \Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} r + \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} (r^2 - r)$, e

(25) $\Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} = \mathcal{F}_{i-2},$

(26) $\Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} = \mathcal{F}_{i-1} - \mathcal{F}_{i-2},$

(27) $\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} = \mathcal{F}_i - 2\mathcal{F}_{i-1} + \mathcal{F}_{i-2}.$

Portanto, substituindo-se as equações (23) e (24) em (21), obtém-se

$$
\begin{aligned}
I &= \int_2^3 \hat{\mathrm{g}}(\mathrm{r}) \frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}r \\
&= \Delta t \int_2^3 \Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} \mathrm{d}r + \Delta t \int_2^3 \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} r \mathrm{d}r + \Delta t \int_2^3 \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} (r^2 - r) \mathrm{d}r \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} \int_2^3 \mathrm{d}r + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} \int_2^3 r \mathrm{d}r + \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} \left(\int_2^3 r^2 \mathrm{d}r - \int_2^3 r \mathrm{d}r \right) \right] \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} \frac{1}{2}(9-4) + \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} \left(\frac{1}{3}(27-8) - \frac{5}{2} \right) \right] \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} \frac{5}{2} + \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} \left(\frac{19}{3} - \frac{5}{2} \right) \right] \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-2} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-2} \frac{5}{2} + \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-2} \left(\frac{23}{6} \right) \right]
\end{aligned} \tag{28}
$$

Substituindo-se (25) a (27) em (28), tem-se

$$
\begin{aligned}
I &= \Delta t \left[\mathcal{F}_{i-2} + (\mathcal{F}_{i-1} - \mathcal{F}_{i-2}) \frac{5}{2} + \frac{1}{2} (\mathcal{F}_i - 2\mathcal{F}_{i-1} + \mathcal{F}_{i-2}) \left(\frac{23}{6} \right) \right] \\
&= \Delta t \left[\mathcal{F}_{i-2} \left(1 - \frac{5}{2} + \frac{23}{12} \right) + \mathcal{F}_{i-1} \left(\frac{5}{2} - \frac{23}{6} \right) + \mathcal{F}_i \left(\frac{23}{12} \right) \right] \\
&= \Delta t \left[\mathcal{F}_{i-2} \left(\frac{5}{12} \right) + \mathcal{F}_{i-1} \left(-\frac{16}{12} \right) + \mathcal{F}_i \left(\frac{23}{12} \right) \right] \\
&= \Delta t \left[\left(\frac{5}{12} \right) \mathcal{F}_{i-2} - \left(\frac{16}{12} \right) \mathcal{F}_{i-1} + \left(\frac{23}{12} \right) \mathcal{F}_i \right]
\end{aligned} \tag{29}
$$

Assim, a chamada fórmula de predição é

(30) $\bar{S}_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{12}(5\mathcal{F}_{i-2} - 16\mathcal{F}_{i-1} + 23\mathcal{F}_i).$

Agora que se tem uma estimativa de $\bar{S}_{i+1}$ calculada a partir da história formada pelos três últimos estados, pode-se repetir o processo, construindo $g(t)$ a partir dos pontos $\mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1})$, $\mathcal{F}(S_i, t_i)$ e $\mathcal{F}(\bar{S}_{i+1}, t_{i+1})$. Assim

(31) $\hat{g}(r) = \sum_{i=0}^{2} \Delta_0^i \mathcal{F}_{i-1} \frac{r!}{i!(r-i)!} = \Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} r + \frac{1}{2}\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1}(r^2 - r)$, e

(32) $\Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} = \mathcal{F}_{i-1},$

(33) $\Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} = \mathcal{F}_i - \mathcal{F}_{i-1},$

(34) $\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1} = \mathcal{F}_{i+1} - 2\mathcal{F}_i + \mathcal{F}_{i-1}.$

Note que o ponto $r = 0$ da nova parametrização corresponde agora ao ponto t_{i-1}. Portanto, a integral em (9) depois da parametrização fica

(35) $I = \int_{t_i}^{t_{i+1}} g(t)\, \mathrm{d}t = \int_1^2 g(t(r)) \frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}r = \int_1^2 \hat{g}(r) \frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}r$

que, com a substituição de (31) e $\frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} = \Delta t$, pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
I &= \int_1^2 \hat{g}(r) \frac{\mathrm{d}t(r)}{\mathrm{d}r} \mathrm{d}r \\
&= \Delta t \int_1^1 \Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} \mathrm{d}r + \Delta t \int_1^2 \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} r \mathrm{d}r + \Delta t \int_1^2 \frac{1}{2} \Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1}(r^2 - r)\mathrm{d}r \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} \int_1^2 \mathrm{d}r + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} \int_1^2 r\mathrm{d}r + \frac{1}{2}\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1}\left(\int_1^2 r^2 \mathrm{d}r - \int_1^2 r\mathrm{d}r\right)\right] \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} \frac{1}{2}(4-1) + \frac{1}{2}\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1}\left(\frac{1}{3}(8-1) - \frac{3}{2}\right)\right] \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1}\left(\frac{7}{3} - \frac{3}{2}\right)\right] \\
&= \Delta t \left[\Delta_0 \mathcal{F}_{i-1} + \Delta_0^1 \mathcal{F}_{i-1} \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\Delta_0^2 \mathcal{F}_{i-1}\left(\frac{5}{6}\right)\right]
\end{aligned} \tag{36}$$

Substituindo-se (32) a (34) em (36), tem-se

$$\begin{aligned}
I &= \Delta t \left[\mathcal{F}_{i-1} + (\mathcal{F}_i - \mathcal{F}_{i-1})\frac{3}{2} + \frac{1}{2}(\mathcal{F}_{i+1} - 2\mathcal{F}_i + \mathcal{F}_{i-1})\left(\frac{5}{6}\right)\right] \\
&= \Delta t \left[\mathcal{F}_{i-1}\left(1 - \frac{3}{2} + \frac{5}{12}\right) + \mathcal{F}_i\left(\frac{3}{2} - \frac{5}{6}\right) + \mathcal{F}_{i+1}\left(\frac{5}{12}\right)\right] \\
&= \Delta t \left[\mathcal{F}_{i-1}\left(-\frac{1}{12}\right) + \mathcal{F}_i\left(\frac{8}{12}\right) + \mathcal{F}_{i+1}\left(\frac{5}{12}\right)\right] \\
&= \Delta t \left[\left(-\frac{1}{12}\right)\mathcal{F}_{i-1} + \left(\frac{8}{12}\right)\mathcal{F}_i + \left(\frac{5}{12}\right)\mathcal{F}_{i+1}\right]
\end{aligned} \tag{37}$$

Substituindo-se (37) em (9), tem-se

(40) $S_{i+1} \;=\; S_i + \Delta t \left[\left(-\frac{1}{12}\right)\mathcal{F}_{i-1} + \left(\frac{8}{12}\right)\mathcal{F}_i + \left(\frac{5}{12}\right)\mathcal{F}_{i+1}\right]$

Assim, a chamada fórmula de correção é

(41) $S_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{12}(-\mathcal{F}_{i-1} + 8\mathcal{F}_i + 5\mathcal{F}_{i+1}).$

Note que, para usar a fórmula de predição (equação (30)), são necessários os estados dos instantes t_i, t_{i-1} e t_{i-2}. Portanto, (30) só pode começar a ser usada a partir de $i = 2$, isto é,

(42) $\bar{S}_{2+1} = S_2 + \frac{\Delta t}{12}(5\mathcal{F}_{2-2} - 16\mathcal{F}_{2-1} + 23\mathcal{F}_2) \Longrightarrow \bar{S}_3 = S_2 + \frac{\Delta t}{2}(5\mathcal{F}_0 - 16\mathcal{F}_1 + 23\mathcal{F}_2)$.

Portanto, os estados S_1 e S_2 devem ser obtidos por um método de passo simples equivalente (terceira ordem). O Método preditor-corretor de Adams--Bashforth-Moulton (método de terceira ordem) pode ser sintetizado como:

Fase de inicialização: Obter os estados S_1 e S_2 pelo método de Runge-Kutta de terceira ordem.

Fase de predição: Estimar o estado $\mathbf{S_{i+1}}$

(43) $\bar{S}_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{12}(5\mathcal{F}_{i-2} - 16\mathcal{F}_{i-1} + 23\mathcal{F}_i)$.

Fase de correção: Atualização do estado $\mathbf{S_{i+1}}$

(44) $\boldsymbol{S_{i+1}} = S_i + \frac{\Delta t}{12}(-\mathcal{F}_{i-1} + 8\mathcal{F}_i + 5\mathcal{F}_{i+1})$.

Note que a fórmula (44) pode ser utilizada iterativamente até que $\boldsymbol{S_{i+1}}$ convirja para a tolerância especificada, isto é

$\boldsymbol{S_{i+1}}^{(k-1)} = \bar{\boldsymbol{S}}_{i+1}$

do

$$\boldsymbol{S_{i+1}}^{(k)} = S_i + \frac{\Delta t}{12}\left(-\mathcal{F}(S_{i-1}, t_{i-1}) + 8\mathcal{F}(S_i, t_i) + 5\,\mathcal{F}\left(\boldsymbol{S_{i+1}}^{(k-1)}, t_{i+1}\right)\right)$$

while $\left(\left|\frac{\boldsymbol{S_{i+1}}^{(k)} - \boldsymbol{S_{i+1}}^{(k-1)}}{\boldsymbol{S_{i+1}}^{(k)}}\right| < \boldsymbol{\varepsilon}\right)$

Tarefa 18: Método preditor-corretor de quarta ordem

Assista ao vídeo https://www.youtube.com/watch?v=fp6n7x55tkQ

Parte 1: Usando como modelo os passos de desenvolvimento do método preditor-corretor de terceira ordem, desenvolva o método preditor-corretor de quarta ordem.

Parte 2: Repita a tarefa da Aula#25 usando o método desenvolvido na **Parte 1.**

Note que, na fase de inicialização você precisará do método de Runge-Kutta de quarta ordem cujas fórmulas são

(T1) $\mathcal{F}_1 = \mathcal{F}(S(t_i), t_i)$

(T2) $S_2 = S_i + \frac{\Delta t}{2}\mathcal{F}_1$

(T3) $\mathcal{F}_2 = \mathcal{F}\left(S_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$

(T4) $S_3 = S_i + \frac{\Delta t}{2}\mathcal{F}_2$

(T5) $\mathcal{F}_3 = \mathcal{F}\left(S_3, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)$

(T6) $S_4 = S_i + \Delta t\mathcal{F}_3$

(T7) $\mathcal{F}_4 = \mathcal{F}(S_4, t_i + \Delta t)$

(T8) $$S_{i+1} = S_i + \frac{\Delta t}{6}(\mathcal{F}_1 + 2\mathcal{F}_2 + 2\mathcal{F}_3 + \mathcal{F}_4)$$

OBS. Há outras fórmulas de R-K de quarta ordem. A eq. (T8) não veio de Simpson 3/8.