

Rilder de Sousa Pires

***Métodos Numéricos em Problemas Físicos de Valor
Inicial para Equações Diferenciais Ordinárias***

Fortaleza - CE, Brasil

13 de Dezembro de 2010

Rilder de Sousa Pires

***Métodos Numéricos em Problemas Físicos de Valor
Inicial para Equações Diferenciais Ordinárias***

Monografia apresentada para obtenção do Grau
de Bacharel em Física pela Universidade Fed-
eral do Ceará.

Orientador:

Prof. Dr. André Auto Moreira

DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Fortaleza - CE, Brasil

13 de Dezembro de 2010

Monografia de Projeto Final de Graduação sob o título “*Métodos Numéricos em Problemas Físicos de Valor Inicial para Equações Diferenciais Ordinárias*”, defendida por Rilder de Sousa Pires e aprovada em 13 de Dezembro de 2010, em Fortaleza, Estado do Ceará, pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. André Auto Moreira
Orientador.
Universidade Federal do Ceará.

Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo
Universidade Federal do Ceará.

Prof. Dr. Eric Josef Ribeiro Parteli
Universidade Federal do Ceará.

Dedico esse trabalho aos meus pais.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais: Deuzimar Pires de Araújo e Antônia Juvani de Sousa Pires; e toda minha família pelo apoio, confiança e fé depositadas em mim ao longo desses anos.

Agradeço ao Prof. Dr. André Auto Moreira pela orientação ao longo desse curso, ao Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo pela ajuda e incentivo que me deu para o desenvolvimento desse trabalho e ao Prof. Dr. Eric Josef Ribeiro Parteli pelo comparecimento na banca dessa monografia.

Agradeço aos amigos e colegas de turma remanescentes: Fernando Wellison, César Menezes, Bruno Gondin, Calebe Alves, Paulo Vitor e Ricardo Bruno pelos momentos produtivos do curso.

Agradeço aos amigos do “vortex”: Saulo, Klara, Heitor pelos conselhos e pelos momentos de distração que me ajudaram a manter o pouco de sanidade que ainda me resta; e ao Reginaldo pelo abastecimento de café que me manteve acordado ao longo deste curso.

Agradeço aos amigos: Ermeson, Alexandre, Higor Piaget, Davi Soares, Julio César, Diego (Quântico) e Diego (Ex-cabeludo) pelos conselhos que me ajudaram a escrever esse trabalho.

Agradeço aos amigos do Laboratório: Paulo Vitor (Barbie), Jardel (Metralha 1), Fabio Medeiros, Jorge Luiz (Metralha 3), Macelo Magalhães (Macaco), Antônio Rodrigues (Toín), Mardônio (Véi) e Tiago (Caçambéro) pelos momentos de diversão.

Agradeço aos demais amigos que foram assistir a apresentação dessa monografia.

Agradeço aos demais professores do Departamento de Física que contribuíram de alguma forma para minha formação acadêmica.

Agradeço à Krypton, Araponga, Marilyn, Natalie, Julie e Jane pelo tempo e processamento empregados no desenvolvimento desse trabalho.

Agradeço à Universidade Federal do Ceará - UFC, ao Projeto de Iniciação Científica - Pibic e ao Conselho Nacional de Pesquisa - CNPq pelo apoio financeiro.

*“A felicidade não se resume na ausência de problemas,
mas sim na sua capacidade de lidar com eles.”*

Albert Einstein

Resumo

Esse trabalho apresenta alguns métodos numéricos utilizados para solucionar problemas pertencentes a uma classe de equações diferenciais ordinárias conhecidos como problemas de valor inicial. Apesar do caráter introdutório do texto, ele traz as principais bases para se resolver problemas complexos baseados em simulações de dinâmica molecular. No primeiro capítulo são apresentadas algumas situações físicas que se enquadram na classe de problemas de valor inicial, bem como as bases teóricas necessárias para resolvê-las. No segundo capítulo são mostradas formas de descrever, do ponto de vista computacional, os problemas apresentados no capítulo anterior, alguns conceitos importantes e métodos numéricos capazes de solucioná-los. No último capítulo, são resolvidos os problemas apresentados no primeiro capítulo utilizando os métodos numéricos apresentados no segundo. Com isso analisa-se convergência, precisão e técnicas para verificar o erro cometido pelos métodos utilizados.

Abstract

This work presents some numerical methods used to solve problems belonging to a class of ordinary differential equations known as initial value problems. Although this is but an introductory text, it brings the bases for solving complex problems based on molecular dynamics simulations. The first chapter presents some physical situations which fall within the class of initial value problems, and the theoretical ground needed to solve them. The second chapter shows ways to describe, from the computational point of view, the problems discussed in the previous chapter, as well as some important concepts and numerical methods to solve these problems. In the last chapter, the problems presented in the first chapter are solved using the numerical methods described in the second chapter. Finally, we analyze convergence, accuracy, and techniques for evaluating the error observed in the methods discussed.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 13
2	Problemas de Valor inicial	p. 14
2.1	Movimento de uma partícula	p. 14
2.2	Lançamento oblíquo	p. 15
2.3	Oscilador harmônico bidimensional	p. 16
2.4	Movimento sob a ação de uma força central	p. 17
3	Métodos Numéricos	p. 20
3.1	Definições preliminares	p. 20
3.2	Descrição do problema	p. 21
3.2.1	Sistemas de dimensões maiores	p. 22
3.2.2	Equações diferenciais de ordem superior	p. 23
3.3	Método da Série de Taylor	p. 23
3.3.1	Generalização do método	p. 24
3.4	Método de Runge-Kutta	p. 25
3.4.1	Método de Runge-Kutta de ordem 2	p. 25
3.4.2	Método de Runge-Kutta para ordens maiores	p. 26
3.5	Métodos de alta eficiência	p. 27
3.5.1	Método de Runge-Kutta adaptativo	p. 28
3.5.2	Métodos de passos múltiplos e preditores-corretores	p. 29

3.5.3	Método de Bulirsch-Stoer	p. 31
4	Exemplos de problemas	p. 32
4.1	Lançamento oblíquo com resistência do ar	p. 32
4.2	Oscilador harmônico bidimensional	p. 35
4.3	Partícula sob a ação de uma força central	p. 37
4.4	Modelo de elasticidade	p. 39
5	Conclusão	p. 41
	Referências Bibliográficas	p. 42
	Anexo A – Outros Métodos	p. 44
A.1	Método do ponto médio	p. 44
A.2	Algoritmo de Verlet	p. 44
A.2.1	Algoritmo do salto do sapo (leapfrog)	p. 45
A.2.2	Algoritmo Beeman	p. 45
	Anexo B – Análise de erros	p. 47

Lista de Figuras

- 4.1 Gráficos das equações horárias para o lançamento oblíquo com resistência do ar onde (a) corresponde à coordenada x , e (b) corresponde à coordenada y . A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de primeira ordem, os pontos (+) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de segunda ordem, os pontos (\square) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de terceira ordem e os pontos (\times) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem. p. 33
- 4.2 Gráfico da trajetória para o lançamento oblíquo com resistência do ar. A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de primeira ordem, os pontos (+) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de segunda ordem, os pontos (\square) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de terceira ordem e os pontos (\times) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem. p. 33
- 4.3 Gráficos do erro global absoluto em função do tempo para o lançamento oblíquo com resistência do ar. Nessa figura, (a) corresponde à coordenada x , e (b) corresponde à coordenada y . De cima para baixo, a linha (—) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de primeira ordem, a linha (.....) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de segunda ordem, a linha (.....) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de terceira ordem e a linha (.....) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem. p. 34
- 4.4 Gráficos da análise de convergência em função de h para o lançamento oblíquo com resistência do ar. Nessa figura, (a) corresponde ao gráfico de $\bar{x} = x((b + a)/2)$ em função de h , e (b) ao gráfico do erro global absoluto, calculado em \bar{x} , em função de h . Os pontos (\diamond) correspondem aos valores analíticos e os pontos (+) representam os valores obtidos numericamente para cada valor de h . p. 34

- 4.5 Gráficos das equações horárias para o oscilador harmônico bidimensional onde (a) corresponde à coordenada x , e (b) corresponde à coordenada y . A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem e os pontos (+) representam o resultado obtido para o método de Runge-Kutta de quarta ordem. p. 35
- 4.6 Gráfico da trajetória para o oscilador harmônico bidimensional. A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem e os pontos (+) representam o resultado obtido para o método de Runge-Kutta de quarta ordem. p. 36
- 4.7 Gráfico do erro global absoluto na coordenada x em função do tempo para o oscilador harmônico bidimensional. Em (a), a linha ($-\diamond-$) corresponde ao resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem e a linha ($-\dots-$) corresponde ao resultado obtido para o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Em (b), a linha (—) corresponde ao resultado obtido para a diferença absoluta dos valores apresentados em (a). p. 36
- 4.8 Gráfico da estimativa do erro global absoluto na coordenada x em função do tempo para o oscilador harmônico bidimensional. A linha ($-\diamond-$) corresponde ao erro global absoluto e a linha ($-\dots-$) corresponde à estimativa do erro global absoluto feita por meio do método do passo duplo. Para a obtenção desses resultados, foi utilizado o método de Runge-Kutta de quarta ordem. p. 37
- 4.9 Gráficos das equações horárias para o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central onde (a) corresponde à coordenada x e (b) corresponde à coordenada y . A linha (—) representa a solução numérica obtida para o método de Runge-Kutta de quarta ordem. p. 38
- 4.10 Gráfico da trajetória para o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central. A linha (—) corresponde a solução analítica e os pontos (\diamond) correspondem solução numérica obtida para o método de Runge-Kutta de quarta ordem. p. 38

- 4.11 Gráfico das quantidades conservadas para o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central. Nessa figura, (a) corresponde a energia do sistema e (b) corresponde ao momento angular. A linha (——) corresponde ao resultado numérico obtido por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem. p.39
- 4.12 Representação gráfica do modelo de elasticidade. Nessa figura, (a) corresponde ao estado do sistema quando $t = h$ e (b) corresponde ao estado do sistema quando $t = 300000h$. Os pontos escuros representam as massas e as linhas ligando os pontos representam as molas. p.40
- 4.13 Gráfico da energia para o modelo de elasticidade. A linha (——) corresponde ao resultado numérico obtido por meio do algoritmo de Beeman. . . p.40

1 Introdução

A maior parte da Física tem como uma das bases um princípio conhecido como causalidade, que estabelece que a mesma causa sempre produz o mesmo efeito[1, 2]. Esse princípio pode ainda ser enunciado de uma forma especial, estabelecendo que uma fase de um determinado processo está correlacionada com a fase posterior. Dessa forma, pode-se descrever fenômeno da natureza como uma expressão que relaciona um estado e seus estados vizinhos no espaço e no tempo[2].

É nesse contexto que são introduzidas as equações diferenciais na Física, como uma forma natural de se expressar o princípio da causalidade. Esse é um dos motivos pelo qual as equações diferenciais são tão importantes e aparecem nas mais diversas áreas da Física[2]. Dessa forma, é bastante importante estudar e procurar meios para se resolver esse tipo de equações e assim podermos descrever os diversos sistemas físicos encontrados na natureza.

Devido à complexidade de alguns sistemas, as equações envolvidas podem ser complicadas não permitindo a obtenção de uma solução analítica[3]. Por isso, é importante conhecer métodos alternativos para resolver esse tipo de equação. Atualmente, métodos computacionais são bastante utilizados para solucionar problemas descritos por equações diferenciais, fazendo destes uma ferramenta bastante poderosa e útil ao pesquisador moderno[4]. Para tanto, é importante que essa ferramenta seja utilizada corretamente, tendo-se em mente que ela não é necessariamente utilizada para substituir métodos analíticos, mas sim, na maioria das vezes, para complementá-los[5].

Durante as últimas décadas, esses métodos têm sido utilizados para simular sistemas que podem ser descritos por meio de dinâmica molecular. O objetivo desses métodos é resolver as equações de Newton do sistema e encontrar a trajetória dos átomos a partir da configuração inicial do sistema. Com isso, é possível determinar uma grande variedade de propriedades[6]. Assim, o objetivo desse trabalho é apresentar métodos, que possibilitam resolver problemas desse tipo, que se enquadram em uma classe de equações diferenciais ordinárias conhecidas como problemas de valor inicial.

2 *Problemas de Valor inicial*

Algumas vezes, o problema que se pretende resolver envolve uma ou mais derivadas de uma quantidade desconhecida que é função de apenas uma variável. Nesse caso, diz-se que a **equação diferencial** (ED) envolvida é uma **equação diferencial ordinária** (EDO). A solução desse tipo de ED não é unicamente determinada. Daí, faz-se necessária a utilização de condições auxiliares[7].

Nesse capítulo, serão mostradas aplicações desse tipo de ED em algumas situações físicas que se enquadram numa classe de problemas conhecidos como **problemas de valor inicial** (PVI). Estes são problemas onde o conhecimento de valores iniciais da quantidade de interesse e de suas derivadas determina a solução unicamente.

2.1 **Movimento de uma partícula**

A unidade elementar da mecânica é a partícula, cujo comportamento físico é totalmente determinado pelo vetor posição \mathbf{r} e por sua massa m que é uma quantidade escalar invariante[2]. Para se entender o movimento da partícula é conveniente se definir a velocidade \mathbf{v} e o momento linear \mathbf{p} :

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad \mathbf{p} = m\mathbf{v}.$$

Com isso, pode-se expressar o movimento da partícula através da *lei de Newton* que é dada por:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}. \quad (2.1)$$

Onde \mathbf{F} , que é função de \mathbf{x} , \mathbf{v} e do tempo t , representa a força que age no sistema. Assim, pode-se escrever a Eq. (2.1) mais explicitamente como:

$$m\mathbf{r}'' = \mathbf{F}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t). \quad (2.2)$$

Em duas dimensões \mathbf{r} e \mathbf{F} podem ser escritos como: $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}$ e $\mathbf{F} = F_x\hat{\mathbf{x}} + F_y\hat{\mathbf{y}}$. Se em cada componente da força aparecerem somente a coordenada correspondente e suas derivadas:

$$F_x = F_x(x', x, t), \quad (2.3)$$

$$F_y = F_y(y', y, t), \quad (2.4)$$

então as Eqs. (2.3) e (2.4) serão independentes entre si e poderão ser resolvidas independentemente[8]. Outro caso interessante ocorre quando a força \mathbf{F} depende apenas da posição e é conservativa*. Nesse caso, é comum definir a energia potencial $V(\mathbf{r})$ como o trabalho realizado pela força quando a partícula desloca-se de um ponto \mathbf{r} a um ponto de referência \mathbf{r}_s [8]:

$$V(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}_s} \mathbf{F}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = - \int_{\mathbf{r}_s}^{\mathbf{r}} \mathbf{F}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'. \quad (2.5)$$

Essas definições serão úteis para as seções que seguem.

2.2 Lançamento oblíquo

Um dos problemas importantes na história da mecânica é a determinação do movimento de um projétil. Esse problema é um caso particular do problema mostrado na Seç. 2.1. Desprezando a resistência do ar, e considerando apenas a ação da gravidade próximo à superfície da Terra, o projétil se moverá de acordo com a seguinte ED:

$$m\mathbf{r}'' = -mg\hat{\mathbf{y}}$$

onde o eixo y é tomado na direção vertical[8]. Na forma de componentes:

$$mx'' = 0,$$

$$my'' = -mg.$$

Veja que as forças envolvidas nesse problema são similares às mostradas nas Eqs. (2.3) e (2.4), portanto as soluções dessas equações são encontradas como no caso unidimensional. Considerando que o projétil parte da origem do sistema, as soluções para x e y são dadas por[8]:

$$\begin{aligned} x &= v_{x0}t, \\ y &= v_{y0}t - \frac{1}{2}gt^2. \end{aligned}$$

*A força \mathbf{F} é conservativa quando $\nabla \times \mathbf{F} = 0$.

Isolando t na primeira equação e substituindo na segunda obtém-se a equação da trajetória:

$$y = \frac{v_{y0}}{v_{x0}}x - \frac{g}{2v_{x0}^2}x^2.$$

No entanto, se levarmos em conta a resistência do ar, e que esta força de resistência do ar é proporcional à velocidade, a ED que descreve o movimento do projétil pode ser expressa por:

$$m\mathbf{r}'' = -mg\hat{\mathbf{y}} - b\mathbf{r}'.$$

Analogamente, na forma de componentes tem-se que

$$mx'' = -bx', \quad (2.6)$$

$$my'' = -mg - by'. \quad (2.7)$$

As soluções dessas equações podem ser escritas da seguinte forma:

$$x = \frac{mv_{x0}}{b}(1 - e^{-bt/m}),$$

$$y = \left(\frac{m^2g}{b^2} + \frac{mv_{y0}}{b} \right) (1 - e^{-bt/m}) - \frac{mg}{b}t.$$

A trajetória pode ser obtida de forma análoga ao que se fez anteriormente para o caso sem resistência[8]:

$$y = \left(\frac{mg}{bv_{x0}} + \frac{v_{y0}}{v_{x0}} \right) x - \frac{m^2g}{b^2} \ln \left(\frac{mv_{x0}}{mv_{x0} - bx} \right).$$

2.3 Oscilador harmônico bidimensional

Analogamente ao caso mostrado na seção anterior, para esse problema a força também tem a forma mostrada nas Eqs. (2.3) e (2.4). As equações de movimento desse problema são dadas por:

$$mx'' = -k_x x, \quad (2.8)$$

$$my'' = -k_y y, \quad (2.9)$$

e as soluções dessas equações também são conhecidas, e dadas por:

$$x = A_x \cos(\omega_x t + \theta_x),$$

$$y = A_y \cos(\omega_y t + \theta_y),$$

onde $\omega_x = \sqrt{k_x/m}$ e $\omega_y = \sqrt{k_y/m}$, e as constantes A_x , θ_x , A_y e θ_y são encontradas por meio das condições iniciais[8].

A trajetória de uma partícula sujeita à uma força desse tipo é bem interessante*. Não é difícil ver que o movimento dessa partícula estará confinado em uma caixa de dimensões $2A_x$ e $2A_y$ no plano xy onde a combinação das frequências angulares ω_x e ω_y define se essas trajetórias serão fechadas ou não[8].

2.4 Movimento sob a ação de uma força central

Força central é uma força dada por:

$$\mathbf{F}(r) = F(r)\hat{\mathbf{r}}.$$

Fisicamente, esta força representa uma atração, ou uma repulsão na direção de um ponto fixo localizado na origem. As forças gravitacionais e elétrica são exemplo de forças desse tipo. Pode-se notar que o vetor momento angular da partícula sob a ação de uma força central é constante uma vez que o torque é dado por:

$$\mathbf{N} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{r}})F(r) = 0.$$

Daí[8],

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0.$$

Para determinar o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central, considere-se que a posição da partícula \mathbf{r}_0 e a velocidade \mathbf{v}_0 sejam conhecidas em qualquer instante t_0 . Escolha-se o eixo x , ao longo da posição inicial \mathbf{r}_0 da partícula, e o eixo z perpendicular a velocidade inicial \mathbf{v}_0 . Então, inicialmente, têm-se:

$$\begin{aligned} x_0 &= |\mathbf{r}_0|, & y_0 &= z_0 = 0, \\ v_{x0} &= \mathbf{v}_0 \cdot \hat{\mathbf{x}}, & v_{y0} &= \mathbf{v}_0 \cdot \hat{\mathbf{y}}, & v_{z0} &= 0, \end{aligned}$$

e em coordenadas cartesianas as equações de movimento são dadas por[8]:

$$m\ddot{x} = \frac{x}{r}F(r), \quad m\ddot{y} = \frac{y}{r}F(r), \quad m\ddot{z} = \frac{z}{r}F(r).$$

*Tais figuras são conhecidas como *figuras de Lissajous*

Facilmente pode-se ver que uma solução para z é

$$z(t) = 0.$$

Logo o movimento é inteiramente bidimensional. Para as coordenadas r e θ , as equações do movimento podem ser obtidas por meio da Eq. (2.2). Assim, tem-se que:

$$m\ddot{r} - mr\dot{\theta}^2 = F(r), \quad (2.10)$$

$$mr\ddot{\theta} + 2m\dot{r}\dot{\theta} = 0. \quad (2.11)$$

Multiplicando a Eq. (2.11) por r , tem-se a conservação do momento angular, que se expressa na forma:

$$\frac{d}{dt}mr^2\dot{\theta} = \frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0$$

e na forma integral[8]:

$$mr^2\dot{\theta} = L = cte. \quad (2.12)$$

Outra integral que pode ser obtida das Eqs. (2.10) e (2.11), considerando-se que a força é conservativa, é

$$T + V = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 + V(r) = E. \quad (2.13)$$

Das Eqs. (2.12) e (2.13) tem-se:

$$\frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) = E \Rightarrow \dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2} \right)^{\frac{1}{2}}}.$$

Daí, pode-se obter r a a partir da seguinte integral[8]:

$$\int_{r_0}^r \frac{dr}{\left(E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2} \right)^{\frac{1}{2}}} = \sqrt{\frac{2}{m}}t, \quad (2.14)$$

e θ pela Eq. (2.12):

$$\theta = \theta_0 + \int_0^t \frac{L}{mr^2} dt. \quad (2.15)$$

Pode-se obter uma ED para a trajetória da partícula considerando que:

$$u = \frac{1}{r}, \quad r = \frac{1}{u}. \quad (2.16)$$

Novamente da Eq. (2.12), tem-se:

$$\begin{aligned}\dot{r} &= -\frac{1}{u^2} \frac{du}{d\theta} \dot{\theta} = -r^2 \dot{\theta} \frac{du}{d\theta}, \\ \dot{r} &= -\frac{L}{m} \frac{du}{d\theta}, \\ \ddot{r} &= -\frac{L}{m} \frac{d^2u}{d\theta^2} \dot{\theta} = -\frac{L^2 u^2}{m^2} \frac{d^2u}{d\theta^2}.\end{aligned}\quad (2.17)$$

Substituindo a Eq. (2.12) na Eq. (2.10) e mantendo apenas o termo em \ddot{r} do lado esquerdo, obtém-se:

$$m\ddot{r} = F(r) + \frac{L^2}{mr^3}.$$

Substituindo as Eqs. (2.16) e (2.17) na equação acima obtém-se a equação diferencial que descreve a trajetória:

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} = -u - \frac{m}{L^2 u^2} F\left(\frac{1}{u}\right), \quad (2.18)$$

em termos de $u(\theta)$. Por meio da Eq. (2.16), a equação para $r(\theta)$ pode facilmente ser obtida[8].

3 Métodos Numéricos

Nesse capítulo, serão mostradas formas de descrever um PVI e conceitos importantes para entender os métodos numéricos utilizados para resolvê-los. Além disso, serão apresentados métodos introdutórios como o da Série de Taylor e os de Runge-Kutta, Seções 3.3 e 3.4 respectivamente, que servirão como base para métodos mais avançados apresentados posteriormente na Seção 3.5, os quais são mais indicados para a solução de problemas de alta precisão.

3.1 Definições preliminares

Antes de estudar métodos numéricos para resolver EDOs em PVI, é interessante definir, pelo menos de forma superficial, alguns conceitos importantes:

Ordem: Seja uma quantidade $F(h)$ e $q \geq 0$. Se

$$l = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{|F(h)|}{h^q}$$

com $0 < l < \infty$, então F é dita ser $O(h^q)$. Lê-se de ordem q em h [9]. Em alguns momentos, é comum dizer que determinado método é de ordem q . Isso significa que o erro correspondente a esse método é $O(h^{q+1})$.

Discretização: Uma discretização uniforme f_i de uma quantidade contínua $f(x)$ pode ser entendida de forma simples como a representação pontual de f nos pontos $f(a + ih)$ de um intervalo $[a, b]$ conhecido[9]. Onde $h = (b - a)/n$ para algum inteiro n .

Erro: Quando se tem um esquema de aproximação* F_i de uma discretização f_i , o erro global da aproximação em i é dado por:

$$\varepsilon_i = f_i - F_i.$$

Além do erro global, existe ainda uma outra forma de erro, conhecida como *erro local*, que é definida por[9]:

*Nas próximas seções convencionou-se o uso de letras maiúsculas para representar esquemas de aproximação.

$$\bar{\varepsilon}_i = f_i - F_i \text{ onde } F_i = f_i \text{ para } m < n.$$

Esses erros são conhecidos também como *erros de truncamento*. Além desse tipo de erro, existe ainda o *erro de arredondamento* que é o erro cometido pelo hardware devido a forma como ele representa números reais.*

Consistência: Um esquema de aproximações F_i , de $O(h^q)$, é dito consistente, se

$$\frac{\bar{\varepsilon}_i}{h^q} \rightarrow 0$$

para todo i dado[9], quando $h \rightarrow 0$.

Convergência: Um esquema é dito convergente (L^2 -convergente)[†] se existir uma função $H(h)$, tal que:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{|H(h)|}{h} = 0$$

e uma constante A independente de h tal que[9]:

$$|\varepsilon_i| \leq e^{At} H(h)$$

onde $t = a + ih$.

Estabilidade: Um esquema é dito estável (L^2 -estável) se existir constantes A e C independentes de h tais que[9]:

$$|f_i| \leq C e^{At} |f_0|$$

onde $t = a + ih$.

3.2 Descrição do problema

Suponha inicialmente que pretende-se encontrar a solução de uma ED de primeira ordem dada por:

$$x'(t) = f(t, x(t)) \tag{3.1}$$

onde $f(t, x(t))$ é conhecida. Dessa forma, conhecendo o valor de $x_0 = x(a)$, uma aproximação numérica para o problema pode ser obtida sob a forma de uma tabela de pares ($t_i = a + ih, X_i \approx x(a + ih)$) utilizando os métodos mostrados nas Seções 3.3 e 3.4. Onde $[a, b]$ é intervalo de tempo estudado e n é o número de passos de tempo que serão executados pelo algoritmo.

*Uma abordagem um pouco mais geral sobre erros é feita no Anexo B.

[†]Veja [9] para mais detalhes

3.2.1 Sistemas de dimensões maiores

Suponha agora que pretende-se trabalhar com sistemas de dimensões maiores. Nesse caso, tem-se um sistema de equações diferenciais parecidas com as encontradas no caso anterior. Ou seja, para um sistema de três dimensões tem-se[7]:

$$\begin{aligned}x'(t) &= f(t, x(t), y(t), z(t)), \\y'(t) &= g(t, x(t), y(t), z(t)), \\z'(t) &= h(t, x(t), y(t), z(t)).\end{aligned}\tag{3.2}$$

Nesse caso, as equações ficam um pouco mais complicadas, porém pode-se utilizar uma *notação simplificada* para as equações mostradas acima. Para isso, basta considerar

$$\begin{aligned}{}^1x &= x, & {}^2x &= y, & {}^3x &= z, \\{}^1f &= f, & {}^2f &= g, & {}^3f &= h.\end{aligned}$$

Daí, as equações mostradas na Eq. (3.2) podem ser reescritas como

$$\mathbf{x}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)).\tag{3.3}$$

Pode-se ainda fazer ${}^0x = t$, ${}^0f = 1$ e escrever a equação anterior como

$$\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})\tag{3.4}$$

que é conhecida como *notação autônoma*[7]. Onde

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} {}^0x \\ {}^1x \\ {}^2x \\ {}^3x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}' = \begin{bmatrix} {}^0x' \\ {}^1x' \\ {}^2x' \\ {}^3x' \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} {}^0f \\ {}^1f \\ {}^2f \\ {}^3f \end{bmatrix}.$$

De forma similar ao que foi dito anteriormente, uma aproximação numérica do problema descrito acima pode ser obtida sob a forma de uma tabela [${}^0X_i = a + ih$, ${}^1X_i \approx x(a + ih)$, ${}^2X_i \approx y(a + ih)$, ${}^3X_i \approx z(a + ih)$] = \mathbf{X}_i^T uma vez que $\mathbf{X}_0 = \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(t = a)$ é conhecido. Prosseguindo de maneira análoga à mostrada acima, pode-se expandir essa ideia para dimensões maiores que três. Isso pode ser útil no caso que será mostrado adiante.

3.2.2 Equações diferenciais de ordem superior

Até esse momento, falou-se apenas em como representar numericamente um sistema cujas equações diferenciais envolvidas eram de primeira ordem. Ocorre que, eventualmente pode surgir a necessidade de representar um sistema cujas equações são da forma[7]

$$x^{(p)}(t) = f(t, x(t), x'(t), x''(t), \dots, x^{(p-1)}(t)).$$

Onde $x(a)$, $x'(a)$, $x''(a)$, \dots , $x^{(p-1)}(a)$ são dados. Para resolver esse tipo de problema*, basta fazer uma mudança de variáveis de tal forma que:

$$\begin{aligned} {}^0x = t, & \quad {}^1x = x, & \quad {}^2x = x', & \quad {}^3x = x'', & \quad \dots, & \quad {}^px = x^{(p-1)}, \\ {}^0f = 1, & \quad {}^1f = {}^2x, & \quad {}^2f = {}^3x, & \quad {}^3f = {}^4x, & \quad \dots, & \quad {}^nf = f({}^0x, {}^1x, {}^2x, \dots, {}^px) \end{aligned}$$

e se obtém uma equação idêntica à Eq. (3.4):

$$\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

onde[7]

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} {}^0x \\ {}^1x \\ {}^2x \\ \vdots \\ {}^px \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}' = \begin{bmatrix} {}^0x' \\ {}^1x' \\ {}^2x' \\ \vdots \\ {}^px' \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} {}^0f \\ {}^1f \\ {}^2f \\ \vdots \\ {}^pf \end{bmatrix}.$$

Para sistemas que além de possuírem EDs de ordem maior que um possuem também mais de uma dimensão, é fácil obter uma equação idêntica à mostrada acima. Para isso, basta combinar o procedimento acima com o mostrado anteriormente.

3.3 Método da Série de Taylor

Esse método, apesar de não ser muito geral, tem a vantagem de poder ser bastante preciso. Ele consiste basicamente em representar a solução da ED localmente pelos primeiros termos de sua série de Taylor. Suponha, genericamente, que pretende-se encontrar a solução de uma ED de primeira ordem dada pela Eq. (3.1). Suponha ainda que solução possa ser representada por uma série de Taylor. Nesse caso, sabendo-se o valor de $x(t)$, $x'(t)$, $x''(t)$, \dots , $x^{(q)}(t)$ no instante

*Os métodos apresentados nesse capítulo são destinados á problemas de primeira ordem. Dessa forma, faz-se necessário a utilização desse processo antes de implementá-los. Métodos próprios para resolver problemas de segunda ordem são apresentados no Anexo A.

de tempo t é possível encontrar uma aproximação para o valor de $x(t+h)$ que é dada por[7]:

$$x(t+h) \approx x(t) + hx'(t) + \frac{1}{2!}h^2x''(t) + \frac{1}{3!}h^3x'''(t) + \dots + \frac{1}{q!}h^qx^{(q)}(t). \quad (3.5)$$

Essa expressão é conhecida como *série de Taylor* truncada, daí o nome do método. O *método da Série de Taylor* de ordem $q = 1$ é conhecido como *método de Euler* e é dado por:

$$x(t+h) \approx x(t) + hf(t, x(t)).$$

Através dessa equação, pode-se facilmente obter uma aproximação numérica para o problema. Utilizando a notação de (t_i, X_i) , pode-se reescrever o *Método de Euler* da seguinte forma[7]:

$$X_{i+1} = X_i + hF(t_i, X_i). \quad (3.6)$$

A desvantagem desse método, como será visto posteriormente, é que precisa-se calcular analiticamente todas derivadas até a ordem de precisão que se deseja. Em alguns sistemas, isso pode ser bastante complicado, impossibilitando a sua aplicação.

3.3.1 Generalização do método

O método pode ainda ser generalizado para resolver problemas que envolvam sistemas de dimensões maiores ou EDs de ordem maior que um. Para isso, basta escrever a *série de Taylor* Eq. (3.5) na sua forma vetorial:

$$\mathbf{x}(t+h) \approx \mathbf{x}(t) + h\mathbf{x}'(t) + \frac{h^2}{2!}\mathbf{x}''(t) + \frac{h^3}{3!}\mathbf{x}'''(t) + \dots + \frac{h^q}{q!}\mathbf{x}^{(q)}(t).$$

Daí, pode-se obter uma estimativa para o valor de \mathbf{x} , uma vez que sabe-se $\mathbf{x}'(t)$ da Eq. (3.4) e os valores de $\mathbf{x}''(t)$, $\mathbf{x}'''(t)$, \dots , $\mathbf{x}^{(q)}(t)$ também podem ser obtidos derivando Eq. (3.4) até a ordem de precisão desejada. Utilizando a notação apresentada anteriormente, a equação acima pode ser escrita como[7]:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h\mathbf{X}'_i + \frac{h^2}{2!}\mathbf{X}''_i + \frac{h^3}{3!}\mathbf{X}'''_i + \dots + \frac{h^q}{q!}\mathbf{X}_i^{(q)}. \quad (3.7)$$

Uma primeira aproximação pode ser dada através do *método de Euler* que na *notação autônoma* pode ser escrito como[7]:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h\mathbf{F}(\mathbf{X}_i). \quad (3.8)$$

Esta permite calcular recursivamente todos os valores de \mathbf{X}_i , uma vez que $\mathbf{X}_0 = \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(a)$ é

conhecido por meio das condições iniciais.

3.4 Método de Runge-Kutta

De acordo com o que foi apresentado anteriormente, o método da série de Taylor apesar de preciso possui a desvantagem de ter que calcular várias derivadas da função de interesse. Com base nessa dificuldade, Carl Runge e Wilhelm Kutta desenvolveram um método que contorna esse tipo de problema[7]. O método consiste em desenvolver um esquema com constantes arbitrárias, e posteriormente determiná-las de forma que o método seja consistente. Uma forma geral, em notação simplificada, para o método de Runge-Kutta explícito é dada por[10]:

$$\begin{cases} \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(t, \mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}(t + \alpha_2 h, \mathbf{X} + h\beta_{21}\mathbf{F}_1), \\ \dots \\ \mathbf{F}_k = \mathbf{F}(t + \alpha_k h, \mathbf{X} + h\beta_{k1}\mathbf{F}_1 + \dots + h\beta_{k,k-1}\mathbf{F}_1) \end{cases} \quad (3.9)$$

e

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \sum_{j=1}^k c_j \mathbf{F}_j(t_i, \mathbf{X}_i).$$

Uma condição necessária para que o método de Runge-Kutta seja consistente é[10]

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}$$

para todo $i \leq k$. Dessa forma, existem diferentes coeficientes α_i e β_{ij} que satisfazem a condição acima e conseqüentemente diferentes métodos de Runge-Kutta de mesma ordem. Normalmente, esses coeficientes são escolhidos de forma analiticamente mais conveniente, ou de forma a minimizar o erro local.

3.4.1 Método de Runge-Kutta de ordem 2

Observando a Eq. (3.9) pode-se ver facilmente que o método de Runge-Kutta de ordem 1 se reduz ao método de Euler. Por isso, destinou-se essa sessão para dedução do método de Runge-Kutta de ordem 2. Da Eq. (3.9) tem-se:

$$\begin{cases} \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(t, \mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}(t + \alpha_2 h, \mathbf{X} + \beta_{21}\mathbf{F}_1) \end{cases}$$

onde $\beta_{21} = \alpha_2 = \alpha$. Assim, pode-se escrever as equações anteriores na notação autônoma da seguinte forma:

$$\begin{cases} \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \alpha h \mathbf{F}_1) \end{cases}$$

e

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h(c_1 \mathbf{F}_1 + c_2 \mathbf{F}_2). \quad (3.10)$$

Utilizando a expressão da série de Taylor para uma função de várias variáveis, temos que:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{K}) = \mathbf{F}(\mathbf{X}) + (\mathbf{K}^T \nabla) \mathbf{F}(\mathbf{X}) + \frac{1}{2!} (\mathbf{K}^T \nabla)^2 \mathbf{F}(\mathbf{X}) + \dots$$

onde

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{X}' \quad (3.11)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_2 &= \mathbf{F}(\mathbf{X}) + h\alpha (\mathbf{X}'^T \nabla) \mathbf{F}(\mathbf{X}) + \frac{h^2 \alpha^2}{2!} (\mathbf{X}'^T \nabla)^2 \mathbf{F}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 &= \mathbf{X}' + h\alpha (\mathbf{X}'^T \nabla) \mathbf{X}' + \frac{h^2 \alpha^2}{2!} (\mathbf{X}'^T \nabla)^2 \mathbf{X}', \\ \mathbf{F}_2 &= \mathbf{X}' + h\alpha \mathbf{X}'' + \frac{h^2 \alpha^2}{2!} \mathbf{X}'''. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dessa forma, substituindo as Eqs. (3.11) e (3.12) na Eq. (3.10) obtém-se:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h(c_1 + c_2) \mathbf{X}'_i + hc_2 \alpha^2 \mathbf{X}''_i.$$

Comparando a equação acima com a Eq. (3.7), tem-se que $c_1 + c_2 = 1$ e $\alpha c_2 = 1/2$. Essas são as condições para que o método de Runge-Kutta de ordem 2 seja consistente. Pode-se mostrar que escolher $\alpha = 2/3$ minimiza o erro local. Daí podemos escrever

$$\begin{cases} \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \frac{2h}{3} \mathbf{F}_1), \end{cases}$$

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{1}{4} \mathbf{F}_1 + \frac{3}{4} \mathbf{F}_2 \right]$$

onde esta seria a escolha ideal para o método de Runge-Kutta de segunda ordem[7].

3.4.2 Método de Runge-Kutta para ordens maiores

O método de Runge-Kutta de ordem 2, apesar de mais preciso que o método de Euler, pode não fornecer uma aproximação boa com o tempo computacional desejado. Para se obter aproximações melhores, podem ser utilizados métodos de Runge-Kutta de ordens maiores. Nor-

malmente escolhem-se:

$$\begin{cases} \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \frac{h}{2}\mathbf{F}_1\right), \\ \mathbf{F}_3 = \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \frac{3h}{4}\mathbf{F}_2\right), \end{cases}$$

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + \frac{h}{9}[2\mathbf{F}_1 + 3\mathbf{F}_2 + 4\mathbf{F}_3]$$

para ordem 3 e

$$\begin{cases} \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{X}), \\ \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \frac{h}{2}\mathbf{F}_1\right), \\ \mathbf{F}_3 = \mathbf{F}\left(\mathbf{X} + \frac{h}{2}\mathbf{F}_2\right), \\ \mathbf{F}_4 = \mathbf{F}(\mathbf{X} + \mathbf{F}_3), \end{cases}$$

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + \frac{h}{6}[\mathbf{F}_1 + 2\mathbf{F}_2 + 2\mathbf{F}_3 + \mathbf{F}_4] \quad (3.13)$$

para quarta ordem[7]. O método pode ser expandido para ordens maiores de forma análoga*, porém deve-se ter em mente que métodos de ordem maior não necessariamente são mais precisos[11]. Para problemas de alta precisão, os métodos que serão apresentados na próxima seção são mais indicados.

3.5 Métodos de alta eficiência

Os métodos apresentados nas seções anteriores são relevantes para se compreender os conceitos importantes por trás dos métodos numéricos[10]. Porém para resolver problemas de forma mais precisa ou mais rápida, os métodos apresentados nessa seção são mais indicados.

É necessário ter em mente que não existe um método numérico adequado para resolver um problema qualquer. Cabe ao interessado observar seu problema, analisar o que se tem disponível para resolvê-lo e, em seguida, determinar qual o método mais apropriado para solucioná-lo. Para isso, é bom que o leitor seja capaz de analisar qualitativamente o problema e verificar se o lado direito da equação diferencial possui funções suaves, ou não, dentro do intervalo de interesse.

Para problemas suaves de alta precisão, ou quando a determinação do lado direito da ED é custosa, o *método de Bulirsch-Stoer* (Seç. 3.5.3) é o mais adequado. Por conveniência, ou para problemas de baixa precisão, o *método de Runge-Kutta adaptativo* (Seç. 3.5.1) é o mais adequado. Os métodos *preditores-corretores* (Seç. 3.5.2) são utilizados para resolver problemas

*Para métodos de Runge-Kutta de ordens maiores que 4 veja [10].

que estão situados entre os dois casos citados acima. Existe apenas uma situação em que um método preditor-corretor é recomendado, que é quando se deseja uma solução de alta precisão com equações muito suaves cujo lado direito da equação é bastante complicado[11].

3.5.1 Método de Runge-Kutta adaptativo

Um método adaptativo, consiste em um método capaz de monitorar seu próprio desempenho e modificar o tamanho do passo de integração ao longo do processo. Essa modificação é feita de forma a manter uma determinada precisão com o mínimo de esforço computacional. O indicativo mais importante da performance de um método pode ser dado por uma estimativa para o erro de truncamento. A forma mais direta de se fazer isso é através de uma técnica conhecida como *passo duplo*[11]. Essa técnica consiste basicamente em estimar simultaneamente sua solução X^* , depois de um passo de comprimento h , e uma solução X , depois de dois passos de comprimento $h/2$, e então uma estimativa do erro pode ser dada por[11]:

$$\tilde{\varepsilon} = X - X^*.$$

Existem métodos alternativos para o ajuste de passo. Uma classe desses métodos é conhecida como *Runge-Kutta embutidos*. Esses métodos foram originalmente desenvolvidos por Fehlberg e algumas vezes são chamados de métodos de Runge-Kutta-Fehlberg. O mais conhecido desses métodos é o de quarta ordem que, ao contrário do método convencional, é dado por uma combinação de seis funções. A vantagem desse método é que uma outra combinação dessas seis funções dá origem a um método de quinta ordem, com o qual pode-se obter uma estimativa para o erro de truncamento através da subtração dos dois. Depois da formulação original, vários outros métodos embutidos de Runge-Kutta foram desenvolvidos. Um exemplo desses métodos é o de Cash-Karp. Esse método é mais eficiente que o método original e é expresso da seguinte forma[11]:

$$\begin{aligned} X_{i+1} &= X_i + \frac{37}{378}F_1 + \frac{250}{261}F_3 + \frac{125}{594}F_4 + \frac{512}{1771}F_6, \\ X_{i+1}^* &= X_i + \frac{2825}{27648}F_1 + \frac{18575}{48384}F_3 + \frac{13525}{55296}F_4 + \frac{277}{14336}F_5 + \frac{1}{4}F_6 \end{aligned}$$

onde os F 's são dados por:

$$\begin{cases} F_1 = hF(t, X), \\ F_2 = hF\left(t + \frac{1}{5}h, X + \frac{1}{5}F_1\right), \\ F_3 = hF\left(t + \frac{3}{10}h, X + \frac{3}{40}F_1 + \frac{9}{40}F_2\right), \\ F_4 = hF\left(t + \frac{3}{5}h, X + \frac{3}{10}F_1 - \frac{9}{10}F_2 + \frac{6}{5}F_3\right), \\ F_5 = hF\left(t + h, X - \frac{11}{54}F_1 + \frac{5}{2}F_2 - \frac{70}{27}F_3 + \frac{35}{27}F_4\right), \\ F_6 = fF\left(t + \frac{7}{8}h, X + \frac{1631}{55296}F_1 + \frac{175}{512}F_2 + \frac{575}{13824}F_3 + \frac{44275}{110592}F_4 + \frac{253}{4096}F_5\right). \end{cases}$$

Assim, a estimativa para o erro pode ser dada por[11]:

$$\tilde{\varepsilon} = X_{i+1} - X_{i+1}^*.$$

Sabendo-se como estimar o erro $\tilde{\varepsilon}$, pode-se estimar o passo h_0 que deve ser escolhido pelo algoritmo comparando o valor do erro $\tilde{\varepsilon}_1$ estimado para o passo anterior h_1 e o erro desejado $\tilde{\varepsilon}_0$. Uma forma fiel de se estimar h_0 é dada por:

$$h_0 = \begin{cases} Sh_1 \left| \frac{\tilde{\varepsilon}_0}{\tilde{\varepsilon}_1} \right|^{\frac{1}{5}} & \tilde{\varepsilon}_0 \geq \tilde{\varepsilon}_1 \\ Sh_1 \left| \frac{\tilde{\varepsilon}_0}{\tilde{\varepsilon}_1} \right|^{\frac{1}{4}} & \tilde{\varepsilon}_0 < \tilde{\varepsilon}_1 \end{cases}$$

onde S é um fator de segurança que é um pouco menor que 1, sendo o valor de $\tilde{\varepsilon}_0$ estimado de duas formas de acordo com o tipo de erro que se deseja monitorar. Normalmente, tem-se:

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \begin{cases} \gamma(|X_i| + |h \cdot X_i'|) & \text{(para o erro local)} \\ \gamma h \cdot X_i' & \text{(para o erro global)} \end{cases}$$

onde γ é o nível de tolerância que se deseja para o erro[11].

3.5.2 Métodos de passos múltiplos e preditores-corretores

Nos métodos apresentados nas Seções 3.3 e 3.4, uma aproximação do valor da solução em um determinado tempo era obtida através do valor da solução no passo de tempo diretamente anterior. Métodos desse tipo são conhecidos como métodos de passo único. Em alguns casos, métodos mais eficientes podem ser obtidos através dos valores $X_i, X_{i-1}, X_{i-2}, \dots$ da solução em vários passos de tempo anteriores[7].

Esses métodos são conhecidos como métodos de passos múltiplos. Como esses métodos necessitam de alguns passos anteriores, normalmente antes de se utilizar um método desse tipo, é comum usar um método de Runge Kutta para determinar os primeiros passos. Uma classe desses métodos é conhecida como *Adams-Bashforth*, cujas formas são dadas por [12, 13]:

$$q = 1 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h\mathbf{F}(\mathbf{X}_i), \quad (3.14)$$

$$q = 2 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{3}{2}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{1}{2}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) \right], \quad (3.15)$$

$$q = 3 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{23}{12}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{4}{3}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) + \frac{5}{12}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-2}) \right], \quad (3.16)$$

$$q = 4 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{55}{24}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{59}{24}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) + \frac{37}{24}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-2}) - \frac{3}{8}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-3}) \right], \quad (3.17)$$

$$q = 5 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{1901}{720}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{1387}{360}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) + \frac{109}{30}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-2}) - \frac{637}{360}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-3}) + \frac{251}{720}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-4}) \right] \quad (3.18)$$

onde q corresponde a ordem de cada método.

Na prática, essas fórmulas raramente são usadas sozinhas. Em vez disso, é comum utilizá-las como *preditores* para outros métodos *corretores*. Normalmente, os corretores utilizados com a fórmulas acima pertencem à outra classe de métodos conhecidos como métodos de *Adams-Moulton*, que podem ser expressos por [12, 13]:

$$q = 1 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{X}}_{i+1}), \quad (3.19)$$

$$q = 2 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + \frac{h}{2} \left[\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{X}}_{i+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{X}_i) \right], \quad (3.20)$$

$$q = 3 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{5}{12}\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{X}}_{i+1}) + \frac{2}{3}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{1}{12}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) \right], \quad (3.21)$$

$$q = 4 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{3}{8}\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{X}}_{i+1}) + \frac{19}{24}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{5}{24}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) + \frac{1}{24}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-2}) \right], \quad (3.22)$$

$$q = 5 : \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h \left[\frac{251}{720}\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{X}}_{i+1}) + \frac{646}{720}\mathbf{F}(\mathbf{X}_i) - \frac{264}{720}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-1}) + \frac{106}{720}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-2}) - \frac{19}{720}\mathbf{F}(\mathbf{X}_{i-3}) \right] \quad (3.23)$$

onde $\tilde{\mathbf{X}}_{i+1}$ é o valor calculado através das equações mostradas anteriormente e q corresponde a ordem de cada método.

A combinação de fórmulas das duas classes é comumente conhecida como um método *preditor-corrector*. O esquema preditor-corrector formado pelas fórmulas de Adams-Bashforth Eq. (3.17) e Adams-Moulton Eq. (3.22) de quarta ordem mostrados acima juntamente com o

método de Runge-Kutta também de quarta ordem Eq. (3.13) é um dos métodos de múltiplos passos mais utilizados, e recebe o nome de *método de Adams-Bashforth-Moulton* ou simplesmente *método de Adams-Moulton*[7].

3.5.3 Método de Bulirsch-Stoer

Esse método é constituído de três ideias principais. A primeira é considerar a solução final obtida pelo cálculo numérico como uma função do passo de integração h . Quando se sabe o suficiente sobre a função, pode-se aproximá-la por uma função analítica e extrapolar o resultado para $h = 0$. A segunda ideia por trás desse método, é que tipo de aproximação é usada para a função obtida[11].

Bulirsch e Stoer perceberam a vantagem de se usar um método de aproximação conhecido como *extrapolação por funções racionais**, um tipo de método de extrapolação de *Richardson*[†]. A terceira e última ideia é utilizar métodos os quais o erro é dado por uma função par, de forma que a aproximação realizada seja escrita em termos de h^2 em vez de h . Juntando essas ideias tem-se o *método de Bulirsch-Stoer*[11].

Como foi dito anteriormente, esse método é mais preciso que os métodos preditor-corretor e normalmente mais eficiente, contudo é bem mais difícil de implementar. O interessante nesse método é que, para encontrar a solução, são feitas reduções sistemáticas no passo de integração do algoritmo, de forma que a própria noção de ordem do método perde o sentido.

*Experiências recentes sugerem que a extrapolação polinomial é mais eficiente para problemas suaves.

[†]Para mais detalhes veja [11].

4 Exemplos de problemas

Neste capítulo, serão mostrados exemplos de problemas que podem ser resolvidos utilizando os métodos numéricos apresentados anteriormente. Os problemas que serão resolvidos nesse capítulo foram apresentados pelo menos de forma introdutória nas Seções 2.2, 2.4 e 2.3. Alguns deles possuem solução analítica, o que possibilita a sua utilização como parâmetro de comparação para analisar a precisão dos métodos numéricos utilizados.

4.1 Lançamento oblíquo com resistência do ar

Como foi visto na Seção 2.2, esse problema possui solução analítica, e as equações horárias e da trajetória do referido problema podem ser expressas por:

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{mv_{x0}}{b}(1 - e^{-bt/m}), \\ y(t) &= \left(\frac{m^2g}{b^2} + \frac{mv_{y0}}{b} \right) (1 - e^{-bt/m}) - \frac{mg}{b}t, \\ y(x) &= \left(\frac{mg}{bv_{x0}} + \frac{v_{y0}}{v_{x0}} \right) x - \frac{m^2g}{b^2} \ln \left(\frac{mv_{x0}}{mv_{x0} - bx} \right). \end{aligned}$$

Esse problema foi escolhido para analisar como a ordem de um método influencia no erro global. Foram utilizados métodos de série de Taylor de primeira, segunda, terceira e quarta ordem. Para as simulações realizadas, foram utilizados $n = 10$ e a técnica descrita na Seção 3.2.1 onde ${}^0x = x$, ${}^1x = y$, ${}^2x = v_x$ e ${}^3x = v_y$. Dessa forma, a partir de Eqs. (2.6) e (2.7) obtém-se:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} {}^0x \\ {}^1x \\ {}^2x \\ {}^3x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}' = \begin{bmatrix} {}^2x \\ {}^3x \\ -b \cdot {}^2x \\ -g - b \cdot {}^3x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}'' = \begin{bmatrix} -b \cdot {}^2x \\ -g - b \cdot {}^3x \\ b^2 \cdot {}^2x \\ bg + b^2 \cdot {}^3x \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{x}''' = \begin{bmatrix} b^2 \cdot 2x \\ bg + b^2 \cdot 3x \\ -b^3 \cdot 2x \\ -b^2g - b^3 \cdot 3x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^{(4)} = \begin{bmatrix} -b^3 \cdot 2x \\ -b^2g - b^3 \cdot 3x \\ b^4 \cdot 2x \\ b^3g + b^4 \cdot 3x \end{bmatrix}.$$

Foi utilizado como estado inicial $\mathbf{x}_0 = [0, 0, 20, 10]^T$. As soluções numéricas obtidas para as funções horárias de x e y são mostradas na Fig. 4.1 e a solução numérica para a trajetória é

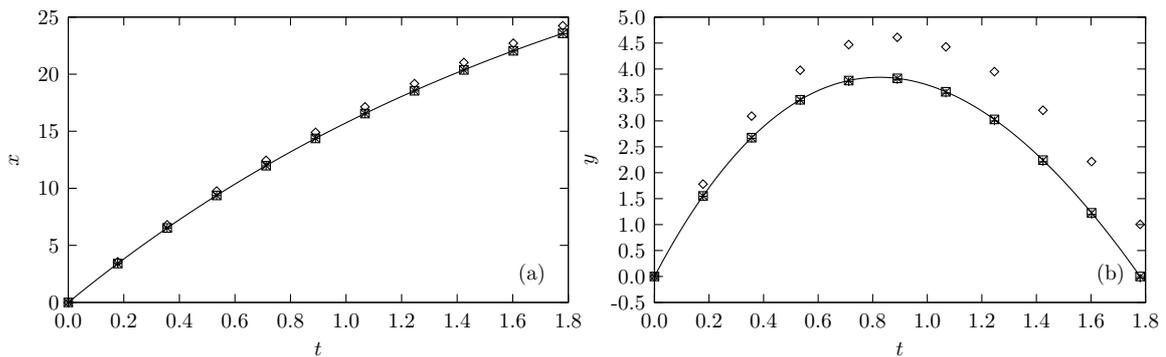


Figura 4.1: Gráficos das equações horárias para o lançamento oblíquo com resistência do ar onde (a) corresponde à coordenada x , e (b) corresponde à coordenada y . A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de primeira ordem, os pontos (+) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de segunda ordem, os pontos (\square) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de terceira ordem e os pontos (\times) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem.

mostrada na Fig. 4.2.

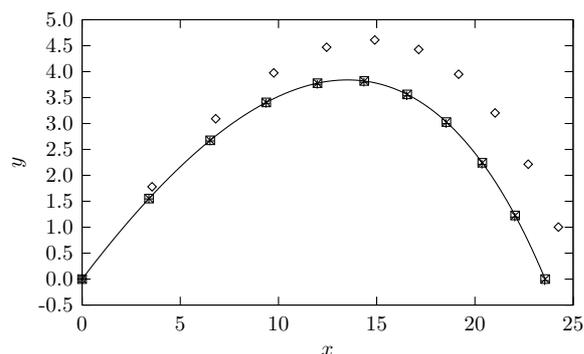


Figura 4.2: Gráfico da trajetória para o lançamento oblíquo com resistência do ar. A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de primeira ordem, os pontos (+) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de segunda ordem, os pontos (\square) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de terceira ordem e os pontos (\times) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem.

Através dos gráficos mostrados nas Figs. 4.1 e 4.2, é possível verificar que apesar da solução

numérica para a série de Taylor de primeira ordem ficar bem distante da solução real, a medida que se aumenta a ordem do método a solução numérica se aproxima da solução real rapidamente. A velocidade com que o erro decresce com a ordem do método fica um pouco mais clara conforme segue na Fig. 4.3.

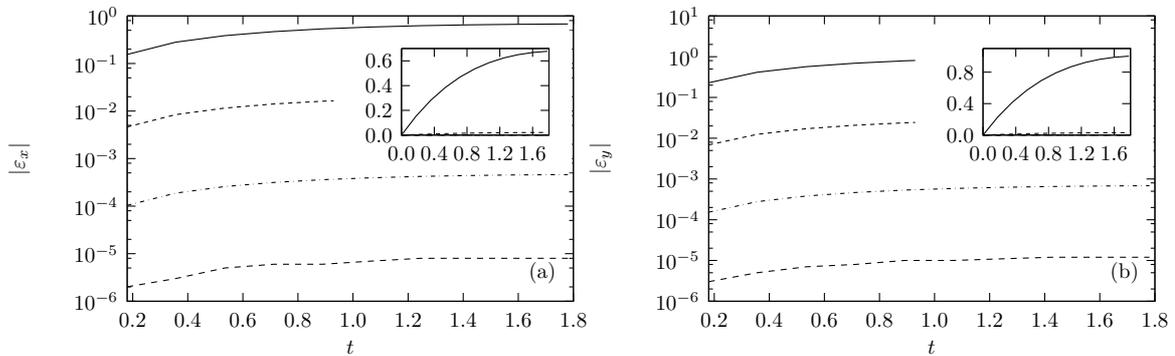


Figura 4.3: Gráficos do erro global absoluto em função do tempo para o lançamento oblíquo com resistência do ar. Nessa figura, (a) corresponde à coordenada x , e (b) corresponde à coordenada y . De cima para baixo, a linha (—) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de primeira ordem, a linha (-----) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de segunda ordem, a linha (.....) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de terceira ordem e a linha (-.-.-) representa o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem.

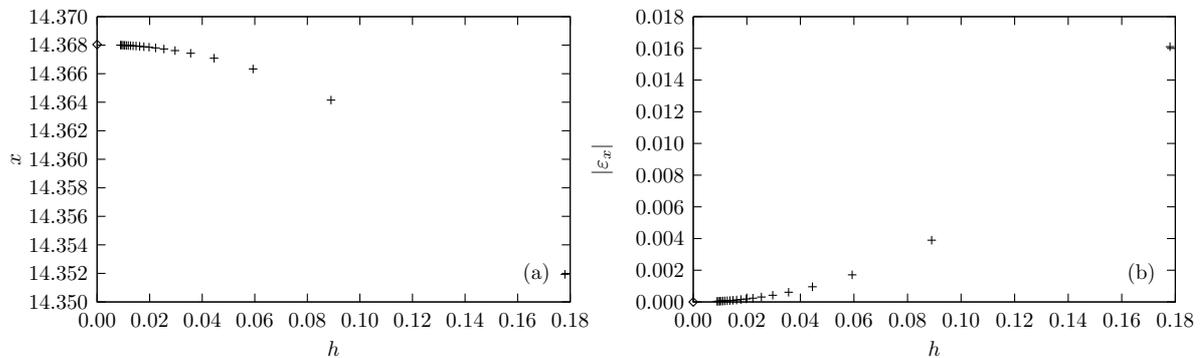


Figura 4.4: Gráficos da análise de convergência em função de h para o lançamento oblíquo com resistência do ar. Nessa figura, (a) corresponde ao gráfico de $\bar{x} = x((b+a)/2)$ em função de h , e (b) ao gráfico do erro global absoluto, calculado em \bar{x} , em função de h . Os pontos (\diamond) correspondem aos valores analíticos e os pontos (+) representam os valores obtidos numericamente para cada valor de h .

É possível assim, observar através desses gráficos o caráter convergente da série de Taylor. Isso pode ser confirmado através do comportamento quase linear dos gráficos mostrados na Fig. 4.3 quando t tende a infinito. Isso novamente é confirmado pelo comportamento mostrado na Fig. 4.4b quando h tende a zero. O gráfico da Fig. 4.4a é importante, pois mostra como a solução numérica converge para o valor analítico quando h tende a zero. Um procedimento

similar é realizado pelo método de Bulirsch-Stoer, conforme mostrado na Seç. 3.5.3 onde o valor de $\bar{x}(0)$ pode ser obtido extrapolando $\bar{x}(h)$ nesse gráfico para $h = 0$.

4.2 Oscilador harmônico bidimensional

Assim como o problema anterior, o oscilador harmônico bidimensional também possui solução analítica que foi analisada na Seç. 2.3. As equações horárias podem ser expressas na forma

$$x = A_x \cos(\omega_x t + \theta_x),$$

$$y = A_y \cos(\omega_y t + \theta_y).$$

Esse problema foi explorado para podermos analisar a diferença existente entre métodos da série de Taylor e métodos de Runge-Kutta de mesma ordem. A Fig. 4.5 mostra as funções horárias obtidas numericamente para os métodos de quarta ordem. A partir das equações diferenciais

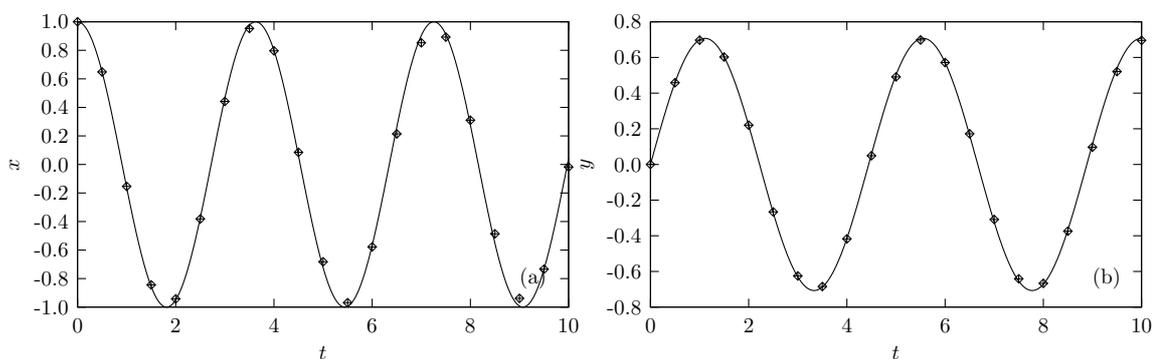


Figura 4.5: Gráficos das equações horárias para o oscilador harmônico bidimensional onde (a) corresponde à coordenada x , e (b) corresponde à coordenada y . A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (\diamond) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem e os pontos (+) representam o resultado obtido para o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

mostradas nas Eqs. (2.8) e (2.9), calculou-se as quantidades \mathbf{x}' , \mathbf{x}'' e \mathbf{x}''' de forma análoga ao que se fez na seção anterior. Utilizou-se para esse problema $n = 20$, $\mathbf{x}_0 = [1, 0, 0, 1]^T$, $k_x = 3$ e $k_y = 2$. Além disso, obteve-se a trajetória mostrada na Fig. 4.6

Analisou-se também a diferença entre o erro obtido para os dois métodos. Os gráficos para a coordenada x^* são mostrados na Fig. 4.7. A partir desses gráficos, é possível perceber a semelhança na solução numérica dos dois métodos. Quando se trata de métodos não adaptativos, a precisão está diretamente ligada à ordem do método utilizado. Isso enfatiza a vantagem

*Para a coordenada y o comportamento é análogo

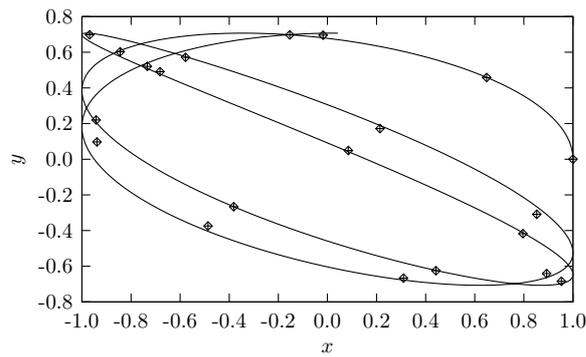


Figura 4.6: Gráfico da trajetória para o oscilador harmônico bidimensional. A linha (—) representa a solução analítica, os pontos (◇) representam o resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem e os pontos (+) representam o resultado obtido para o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

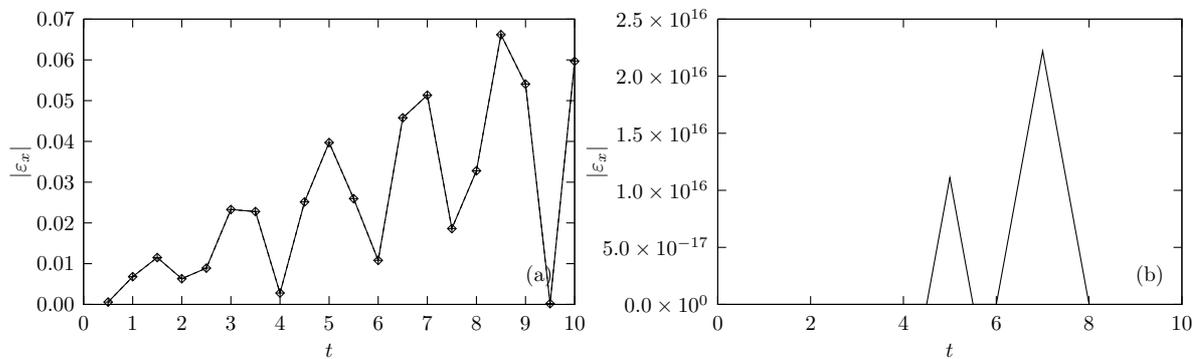


Figura 4.7: Gráfico do erro global absoluto na coordenada x em função do tempo para o oscilador harmônico bidimensional. Em (a), a linha (—◇—) corresponde ao resultado obtido para o método da série de Taylor de quarta ordem e a linha (---+---) corresponde ao resultado obtido para o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Em (b), a linha (—) corresponde ao resultado obtido para a diferença absoluta dos valores apresentados em (a).

de se usar o método de Runge-Kutta sobre o método da Série de Taylor, uma vez que para o método de Runge-Kutta não é necessário determinar as derivadas da quantidade de interesse. Foi analisada também uma estimativa para o erro da solução numérica em x para esse problema onde o resultado obtido é mostrado na Fig. 4.8. A técnica que foi utilizada para determinar o erro é a técnica do passo duplo apresentada na Seç. 3.5.1. A partir desse gráfico é possível verificar que a estimativa é uma boa aproximação para o erro, uma vez que a diferença relativa entre a média dos dois valores é de aproximadamente sete por cento para $n = 20$. Isso pode ser útil para verificar o erro em problemas reais, ou até mesmo para o desenvolvimento de um método adaptativo.

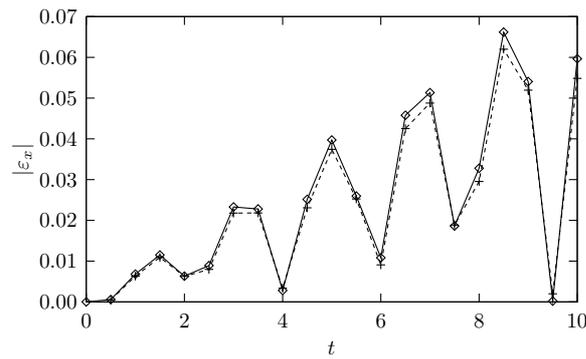


Figura 4.8: Gráfico da estimativa do erro global absoluto na coordenada x em função do tempo para o oscilador harmônico bidimensional. A linha (—◇—) corresponde ao erro global absoluto e a linha (---+---) corresponde à estimativa do erro global absoluto feita por meio do método do passo duplo. Para a obtenção desses resultados, foi utilizado o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

4.3 Partícula sob a ação de uma força central

Esse problema foi discutido de uma forma geral na seção (2.4). Como exemplo de um problema de força central foi escolhido o movimento de uma partícula sujeita a uma força dada por*:

$$F(r) = -\frac{K}{r^2} + \frac{K'}{r^3}.$$

A equação da trajetória para esse problema pode ser encontrada por meio da equação (2.18). Com um pouco de álgebra chega-se á:

$$r(\theta) = \frac{\beta/\alpha^2}{1 + \frac{A\alpha^2}{\beta} \cos \alpha(\theta - \theta_0)}$$

onde $\alpha^2 = 1 + mK'/L^2$, $\beta = mK/L^2$ e

$$\theta_0 = \frac{1}{\alpha} \cos^{-1} \left[\frac{1}{A} \left(\frac{1}{r_0} - \frac{\beta}{\alpha^2} \right) \right].$$

Embora seja possível encontrar a equação da trajetória para esse problema, as equações horárias não são simples de se obter, uma vez que quando se tenta resolver as Eqs. (2.14) e (2.15) encontram-se integrais elípticas. Porém, numericamente esta tarefa é mais simples de ser executada. Os resultados são mostrados na Fig. 4.9.

Para resolver este problema utilizou-se o método clássico de Runge-Kutta de quarta ordem, com $n = 500$ e $\mathbf{x}_0 = [5.0, 0, 0, 0.3]^T$ para $a = 0$, $b = 100$, $K = 2$ e $K' = 0.5$. Ao contrário dos problemas apresentados anteriormente, esse se aproxima um pouco mais do tipo de problema

*Veja problema 51 Cap. 3 de [8]

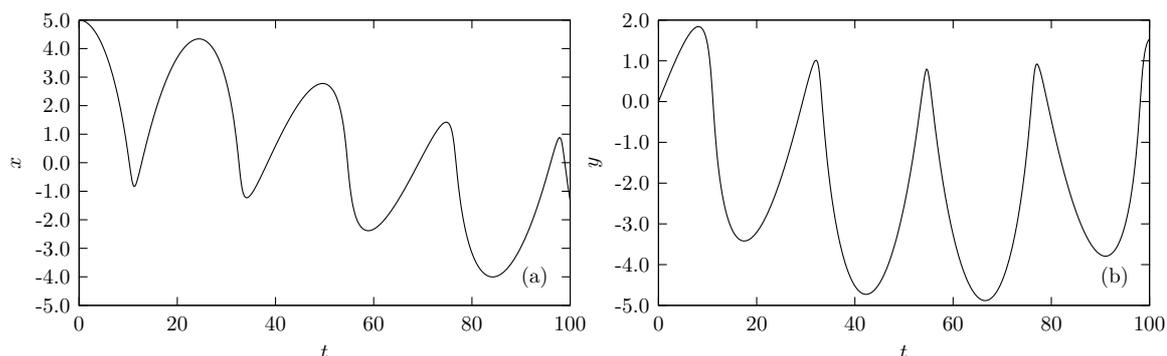


Figura 4.9: Gráficos das equações horárias para o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central onde (a) corresponde à coordenada x e (b) corresponde à coordenada y . A linha (—) representa a solução numérica obtida para o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

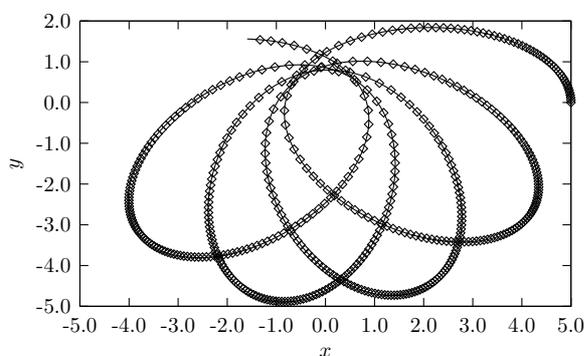


Figura 4.10: Gráfico da trajetória para o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central. A linha (—) corresponde a solução analítica e os pontos (\diamond) correspondem solução numérica obtida para o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

que se deseja estudar quando se utiliza métodos numéricos, uma vez que este não possui solução analítica para as funções horárias. Um indício de que o problema está com uma boa precisão é a trajetória que é mostrada na Fig. 4.10, porém na maioria das vezes isso também não é conhecido. Quando isso ocorre, é comum utilizar algumas técnicas para saber se a solução numérica obtida está pouco precisa. Quando o problema é conservativo, ou seja a energia se mantém constante, é comum verificar a conservação da energia, que é mostrada no gráfico da Fig. 4.11a. Em alguns casos, também pode-se verificar outras quantidades conservadas. No caso estudado nessa seção, pode-se analisar por exemplo o momento angular, que é mostrado na Fig. 4.11b. Quando o modelo escolhido não é conservativo, uma coisa que se pode fazer é analisar um caso particular do modelo em que teoricamente há conservação e verificar se sua solução numérica também possui esse caráter conservativo, ou utilizar argumentos físicos que possibilitem uma aproximação do modelo para limites assintóticos conhecidos. Outras alternativas que podem ser utilizadas para a verificação de possíveis erros são a simulação e a técnica de estimativa do erro apresentada na seção anterior.

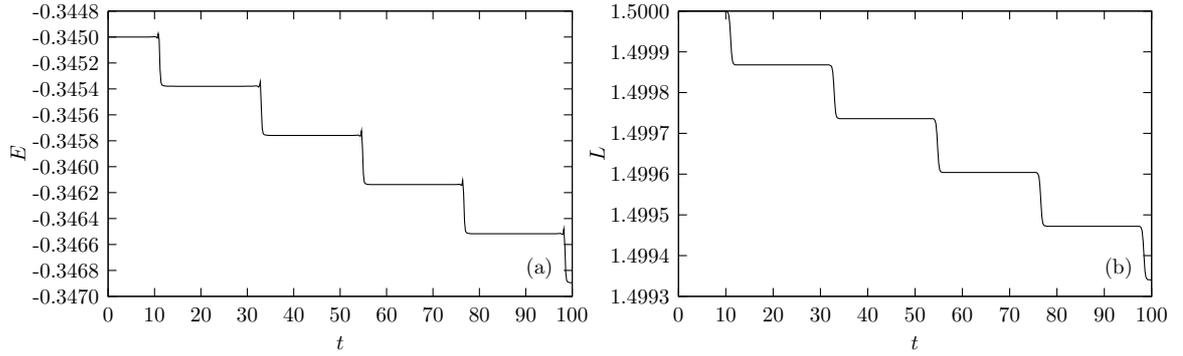


Figura 4.11: Gráfico das quantidades conservadas para o movimento de uma partícula sob a ação de uma força central. Nessa figura, (a) corresponde a energia do sistema e (b) corresponde ao momento angular. A linha (—) corresponde ao resultado numérico obtido por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem.

4.4 Modelo de elasticidade

Um problema um pouco mais complicado que pode-se estudar por meio de métodos computacionais é por exemplo o estudo de propriedades elásticas de um material quando submetido a condições de contorno variadas. Neste modelo, o material pode ser modelado por meio de um conjunto de massas interligadas por molas idênticas formando uma rede quadrada. Modelos similares a esse são utilizados para modelar a dinâmica de tecidos orgânicos quando submetidos à forças externas constantes ou oscilantes[14]. As forças que atuam em cada massa que compõem esse sistema são parecidas com as apresentadas na Seç. 2.4, e são dadas por:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}_{i,j} &= k \frac{\mathbf{x}_{i-1,j} - \mathbf{x}_{i,j}}{\|\mathbf{x}_{i-1,j} - \mathbf{x}_{i,j}\|} (\|\mathbf{x}_{i-1,j} - \mathbf{x}_{i,j}\| - l_0) \\
 &+ k \frac{\mathbf{x}_{i+1,j} - \mathbf{x}_{i,j}}{\|\mathbf{x}_{i+1,j} - \mathbf{x}_{i,j}\|} (\|\mathbf{x}_{i+1,j} - \mathbf{x}_{i,j}\| - l_0) \\
 &+ k \frac{\mathbf{x}_{i,j-1} - \mathbf{x}_{i,j}}{\|\mathbf{x}_{i,j-1} - \mathbf{x}_{i,j}\|} (\|\mathbf{x}_{i,j-1} - \mathbf{x}_{i,j}\| - l_0) \\
 &+ k \frac{\mathbf{x}_{i,j+1} - \mathbf{x}_{i,j}}{\|\mathbf{x}_{i,j+1} - \mathbf{x}_{i,j}\|} (\|\mathbf{x}_{i,j+1} - \mathbf{x}_{i,j}\| - l_0)
 \end{aligned}$$

onde os índices i e j localizam as massas e molas nas linhas e colunas da rede respectivamente. O k representa a constante elástica e l_0 é a distância original entre as massas. Lembrando que a equação acima é válida apenas para as massas no interior do tecido. Nesse problema, as extremidades superior e inferior estão livres e uma força externa é aplicada nas laterais direita e esquerda mantendo o tecido esticado horizontalmente de um comprimento duas vezes maior que o comprimento inicial. O que se obteve na simulação foi um sistema parecido com o mostrado na Fig. 4.12. No caso da energia, obteve-se o gráfico mostrado na Fig. 4.13.

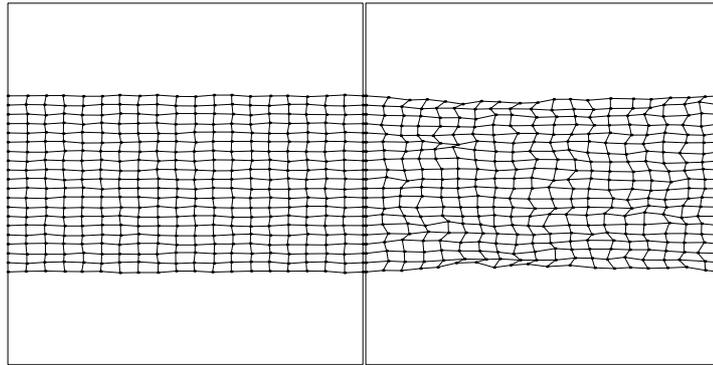


Figura 4.12: Representação gráfica do modelo de elasticidade. Nessa figura, (a) corresponde ao estado do sistema quando $t = h$ e (b) corresponde ao estado do sistema quando $t = 300000h$. Os pontos escuros representam as massas e as linhas ligando os pontos representam as molas.

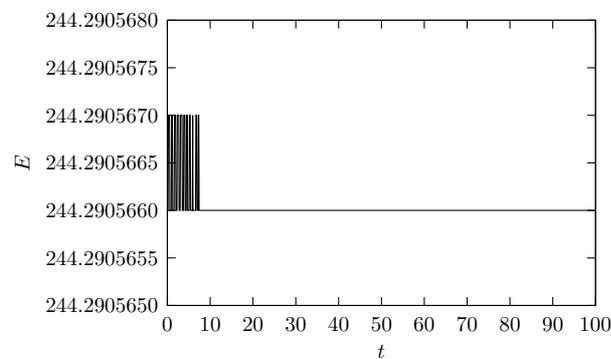


Figura 4.13: Gráfico da energia para o modelo de elasticidade. A linha (—) corresponde ao resultado numérico obtido por meio do algoritmo de Beeman.

Para solucionar este problema, foram utilizados o método de Runge-Kutta de quarta ordem Eq. (3.13) nos primeiros passos e o algoritmo de Beeman Eqs. (A.1) e (A.2) nos passos seguintes. Para a condição inicial, foram utilizadas massas idênticas em repouso posicionadas aleatoriamente em torno dos vértices de uma rede quadrada. Foram utilizadas 400 massas, $t_a = 0$, $t_b = 100$ e $n = 600000$ para esse problema. Generalizações do sistema podem ser feitas, como por exemplo: variações na constante elástica das molas e uma geometria inicial diferente para representar a malha de molas.

5 *Conclusão*

Nesse trabalho, foram abordados diversos métodos numéricos aplicados para resolver problemas de valor inicial expressos por meio de equações diferenciais ordinárias. Além disso, procurou-se não só apresentar os métodos, mas também discutir em quais situações a implementação de cada um deles pode ser indicada. Para tanto, deu-se prioridade aqui à utilização de métodos para a solução de problemas físicos que foram abordados no Capítulo 2, e cuja solução analítica de alguns é possível.

No último capítulo utilizou-se os métodos apresentados no Capítulo 3 para analisar como o erro se propaga na solução numérica de alguns problemas. Com isso, foi possível estudar a dependência do erro com a ordem e com o passo de integração, verificando assim o caráter convergente dos métodos de passo único analisados.

Investigou-se ainda, as vantagens de se utilizar os métodos de Runge-Kutta sobre os métodos de Série de Taylor. Também foram apresentadas técnicas para verificar o quão precisa está a solução obtida, como por exemplo: estimar o erro e verificar quantidades conservadas. Apesar da simplicidade dos problemas analisados nesse trabalho, esses podem facilmente servir de base para a solução de problemas mais complexos, como por exemplo alguns problemas de dinâmica molecular que são pesquisados e servem de modelo base para pesquisas realizadas nas mais diversas áreas do conhecimento científico.

Referências Bibliográficas

- 1 BUNGE, M. *Causality and modern science*. New Brunswick: Transaction Publishers, 2008.
- 2 HOPF, L. *Introduction to the Differential Equations of Physics*. New York: Dover Publications, 1948.
- 3 GRIEBEL, M.; KNAPEK, S.; ZUMBUSCH, G. W. *Numerical simulation in molecular dynamics: numerics, algorithms, parallelization, applications*. Jena: Springer, 2007.
- 4 DAHLQUIST, G.; BJÖRCK, A. *Numerical Methods*. Mineola: Courier Dover Publications, 2003.
- 5 KOONIN, S. E. *Computational Physics: Fortran Version*. Menlo Park: Westview Press, 1998.
- 6 GUNSTEREN, W. E. van; BERENDSEN, H. J. C. *Computer Simulation of Molecular Dynamics: Methodology, Applications, and Perspectives in Chemistry*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 1990.
- 7 CHENEY, W.; KINCAID, D. *Numerical Mathematics and Computing*. Pacific Grove, Califórnia: Brooks/Cole, 1994.
- 8 SYMON, K. *Mecânica*. Rio de Janeiro: Campus, 1971.
- 9 DAVIES, P. J. Numerical stability and convergence of approximations of retarded potential integral equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1994.
- 10 LAMBERT, J. D. *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*. New York: Wiley, 1973.
- 11 PRESS, W. H. *Numerical Recipes in Fortran 77: The art of parallel scientific computing*. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- 12 IXARU, L. G. *Numerical methods for differential equations and applications*. Hingham: Springer, 1984.
- 13 ATKINSON, K. E.; HAN, W.; STEWART, D. *Numerical solution of ordinary differential equations*. Hoboken: John Wiley and Sons, 2009.
- 14 JESUDASON, R. et al. Differential effects of static and cyclic stretching during elastase digestion on the mechanical properties of extracellular matrices. *Journal of Applied Physiology*, Am Physiological Soc, v. 103, n. 3, p. 803, 2007.
- 15 HINCHLIFFE, A. *Molecular modelling for beginners*. Chichester: John Wiley and Sons, 2003.

16 SADUS, R. J. *Molecular Simulation of Fluids: Theory, Algorithms and Object-Oriented*. Amsterdam: Elsevier, 2002.

17 BURDEN, R.; FAIRES, J. *Numerical analysis*. Amsterdam: Thomson Brooks/Cole, 2005.

ANEXO A – Outros Métodos

Além dos métodos apresentados no Cap. 3, existem ainda alguns outros métodos introdutório que aparecem na literatura. Esses métodos, são normalmente utilizados para dar uma aproximação melhor que o método de Euler, mas não são competitivos frente aos métodos apresentados nas Seções 3.5.1, 3.5.2 e 3.5.3.

A.1 Método do ponto médio

Esse método é bem simples. Ele é baseado na fórmula simétrica da derivada:

$$x'(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h}.$$

A partir da Eq. (3.1) tem-se explicitamente[4]:

$$X_{i+1} = X_{i-1} + 2hF(t_i, X_i).$$

Este é um pouco melhor que o método de Euler, uma vez que ele é de segunda ordem.

A.2 Algoritmo de Verlet

Esse método é desenvolvido especialmente para resolver equações de segunda ordem do tipo:

$$x''(t) = f(t, x(t)).$$

Por isso, podem facilmente ser utilizados para resolver problemas que envolvam a lei de Newton. Esse algoritmo é obtido a partir de expansões de Taylor de $x(t+h)$ e $x(t-h)$. Desprezando termos de $O(h^3)$, tem-se[15]:

$$X_{i+1} = 2X_i - X_{i-1} + F(t_i, X_i)h^2$$

e a velocidade pode ser obtida pela fórmula simétrica da derivada

$$V_i = \frac{V_{i+1} - V_{i-1}}{2h}.$$

essas duas equações geram um método de segunda ordem conhecido como algoritmo de Verlet.

Uma variante desse algoritmo é o *algoritmo de Verlet para a velocidade* que é dado por[15]:

$$X_{i+1} = X_i + V_i h + \frac{1}{2} F(t_i, X_i) h^2$$

sendo a velocidade obtida pela fórmula simétrica da derivada:

$$V_{i+1} = V_i + \frac{1}{2} (F(t_i, X_i) + F(t_{i+1}, X_{i+1})).$$

Esse método também é de segunda ordem. A vantagem desse método sobre o anterior é o fato dele necessitar armazenar um número menor de variáveis.

A.2.1 Algoritmo do salto do sapo (leapfrog)

Esse algoritmo também é desenvolvido especialmente para resolver EDOs de segunda ordem. Ele é obtido a partir de expansões de Taylor de $v(t + h/2)$ e $v(t - h/2)$. Daí tem-se desprezando termos de $O(h^3)$:

$$V_{i+1/2} = V_{i-1/2} + F(t_i, X_i) h$$

e para a posição[15]:

$$X_{i+1} = X_i + V_{i+1/2} h$$

Uma vantagem importante desse método é que ele é bem estável. Isso fez dele um dos métodos mais utilizados para resolver problemas de dinâmica molecular.

A.2.2 Algoritmo Beeman

Esse procedimento proposto por Beeman é provavelmente o mais preciso da família Verlet para o cálculo das velocidades. Nesse método, tem-se:

$$X_{i+1} = X_i + V_i h + \left(\frac{2}{3} F(t_i, X_i) - \frac{1}{6} F(t_{i-1}, X_{i-1}) \right) h^2 \quad (\text{A.1})$$

e para a velocidade[16]:

$$V_{i+1} = V_i + \left(\frac{1}{3} F(t_{i+1}, \tilde{X}_{i+1}) + \frac{5}{6} F(t_i, X_i) - \frac{1}{6} F(t_{i-1}, X_{i-1}) \right) h \quad (\text{A.2})$$

que possibilita o cálculo sincronizado das posições e das velocidades. Onde \tilde{X}_{i+1} é obtido a partir da Eq. (A.1).

ANEXO B – Analise de erros

No Cap. 3, deu-se prioridade em tratar erros de uma forma aplicada aos métodos, abordando principalmente erros de truncamento. Aqui, será dada uma abordagem um pouco mais geral visando o esclarecimento de algumas noções apresentadas anteriormente.

De forma geral, pode-se definir:

Erro absoluto: Se F é uma aproximação de f , pode-se definir o erro absoluto como[17]:

$$|\varepsilon| = |f - F|. \quad (\text{B.1})$$

Erro relativo: Seja, novamente, F é uma aproximação de f , pode-se definir o erro relativo como[17]:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{|f - F|}{|f|} \quad (\text{B.2})$$

onde $f \neq 0$.

Para analisar a precisão de uma determinada aproximação, a utilização do erro relativo é mais adequado, uma vez que ele leva em consideração o tamanho do valor que está sendo medido. A partir do erro absoluto, pode-se ter uma ideia qualitativa da aproximação que se está estudando, contudo é o erro relativo fornece uma medida de o quão boa está essa aproximação. Dessa forma, pode-se definir:

Valor aproximado: Um valor F é dito aproximado de f , com q dígitos significativos se q for o maior inteiro não negativo tal que[17]:

$$\frac{|f - F|}{|f|} \leq 5 \times 10^{-q} \quad (\text{B.3})$$

onde $f \neq 0$. Assim, uma aproximação F pode ser considerada boa se ela for um valor aproximado de f com uma quantidade q de dígitos. Onde 5×10^{-q} é uma quantidade preestabelecida pelo interessado que corresponde a fração de um determinado valor que considera-se desprezível frente ao próprio valor.