Aula 07 - Runge-Kutta Adaptativo e Métodos de Passos-Múltiplos

Éliton Fontana

1 Método de Runge-Kutta para Sistemas

O método de Runge-Kutta pode ser utilizado para a resolução de sistemas de EDO's. Considere, por exemplo, um sistema com duas equações:

$$\frac{dy}{dt} = f(y, x, t) \qquad y(t_0) = y_0$$

$$\frac{dx}{dt} = g(y, x, t) \qquad x(t_0) = x_0$$

Neste caso os parâmetros k_1,\dots,k_4 irão depender de qual equação está sendo avaliada:

$$k_1^y = f(t_n, y_n, x_n)$$

$$k_1^x = g(t_n, y_n, x_n)$$

$$k_2^y = f(t_n + \Delta t/2, y_n + k_1^y \Delta t/2, x_n + k_1^x \Delta t/2)$$

$$k_2^x = g(t_n + \Delta t/2, y_n + k_1^y \Delta t/2, x_n + k_1^x \Delta t/2)$$

$$k_3^y = f(t_n + \Delta t/2, y_n + k_2^y \Delta t/2, x_n + k_2^x \Delta t/2)$$

$$k_3^x = g(t_n + \Delta t/2, y_n + k_2^y \Delta t/2, x_n + k_2^x \Delta t/2)$$

$$k_3^x = g(t_n + \Delta t/2, y_n + k_2^y \Delta t/2, x_n + k_2^x \Delta t/2)$$

$$k_4^y = f(t_n + \Delta t, y_n + k_3^y \Delta t, x_n + k_3^x \Delta t)$$

$$k_4^x = g(t_n + \Delta t, y_n + k_2^y \Delta t, x_n + k_3^x \Delta t)$$

Com base nestes valores, a solução no ponto n+1 pode ser aproximada:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{6} (k_1^y + 2k_2^y + 2k_3^y + k_4^y)$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{6} (k_1^x + 2k_2^x + 2k_3^x + k_4^x)$$

Considere agora um sistema de m equações:

$$\frac{dy^{1}}{dt} = f_{1}(t, y^{1}, y^{2}, y^{3}, \dots, y^{m}) \qquad y^{1}(t_{0}) = y_{0}^{1}$$

$$\frac{dy^{2}}{dt} = f_{2}(t, y^{1}, y^{2}, y^{3}, \dots, y^{m}) \qquad y^{2}(t_{0}) = y_{0}^{2}$$

$$\frac{dy^{3}}{dt} = f_{3}(t, y^{1}, y^{2}, y^{3}, \dots, y^{m}) \qquad y^{3}(t_{0}) = y_{0}^{3}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\frac{dy^{m}}{dt} = f_{m}(t, y^{1}, y^{2}, y^{3}, \dots, y^{m}) \qquad y^{m}(t_{0}) = y_{0}^{m}$$
(1)

Neste caso, as quantidades k_1 , k_2 , etc. passam a ser vetores com m componentes:

$$\overline{k_1} = \begin{bmatrix} f_1(x_n, y_n^1, y_n^2, \dots, y_n^m) \\ f_2(x_n, y_n^1, y_n^2, \dots, y_n^m) \\ \vdots \\ f_m(x_n, y_n^1, y_n^2, \dots, y_n^m) \end{bmatrix}$$

$$\overline{k_2} = \Delta t \begin{bmatrix} f_1(x_n + \Delta t/2, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_1}[1]/2, y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_1}[2]/2, \dots y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_1}[m]/2) \\ f_2(x_n + \Delta t/2, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_1}[1]/2, y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_1}[2]/2, \dots y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_1}[m]/2) \\ \vdots \\ f_m(x_n + \Delta t/2, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_1}[1]/2, y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_1}[2]/2, \dots y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_1}[m]/2) \end{bmatrix}$$

$$\overline{k_3} = \Delta t \begin{bmatrix} f_1(x_n + \Delta t/2, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_2}[1]/2, y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_2}[2]/2, \dots y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_2}[m]/2) \\ f_2(x_n + \Delta t/2, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_2}[1]/2, y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_2}[2]/2, \dots y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_2}[m]/2) \\ \vdots \\ f_m(x_n + \Delta t/2, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_2}[1]/2, y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_2}[2]/2, \dots y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_2}[m]/2) \end{bmatrix}$$

$$\overline{k_4} = \Delta t \begin{bmatrix} f_1(x_n + \Delta t, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_3}[1], y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_3}[2], \dots, y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_3}[m]) \\ f_2(x_n + \Delta t, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_3}[1], y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_3}[2], \dots, y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_3}[m]) \\ \vdots \\ f_m(x_n + \Delta t, y_n^1 + \Delta t \cdot \overline{k_3}[1], y_n^2 + \Delta t \cdot \overline{k_3}[2], \dots, y_n^m + \Delta t \cdot \overline{k_3}[m]) \end{bmatrix}$$

Com base nestes vetores, a solução para o sistema pode ser avaliada:

$$y_{n+1}^{i} = y_{n}^{i} + \frac{\Delta t}{2} (k_{1}[i] + 2k_{2}[i] + 2k_{3}[i] + k_{4}[i])$$

Exemplo 01:) Utilize o método RK4 para resolver os dois primeros passos para o seguinte sistema, considerando $\Delta t = 0.2$:

$$\frac{dy}{dt} = -7y\sin(x+2t) \qquad y(0) = 1$$

$$\frac{dx}{dt} = 4x - y^2 \qquad x(0) = 0$$

Definindo:

$$f(t, y, x) = -7y\sin(x+2t)$$
 $g(t, y, x) = 4x-y^2$ $t_0 = 0$ $y_0 = 1$ $x_0 = 0$

Para o primeiro passo de tempo, temos que:

$$t_1 = t_0 + \Delta t = 0.2$$

Avaliando primeiramente k_1 para as duas equações:

$$k_1^y = f(t_0, y_0, x_0) = (-7 \cdot (1)\sin(0 + 2 \cdot 0)) = 0$$

 $k_1^x = g(t_0, y_0, x_0) = (4 \cdot (0) - 1^2) = -1$

Avaliando agora k_2

$$k_2^y = f(t_0 + \Delta t/2, y_0 + \Delta t k_1^y/2, x_0 + \Delta t k_1^x/2) = (-7 \cdot (1)\sin(-1 \cdot 0.2/2 + 2 \cdot 0.2/2)) = -0.6988339$$
$$k_2^x = g(t_0 + \Delta t/2, y_0 + \Delta t k_1^y/2, x_0 + \Delta t k_1^x/2) = (4 \cdot (-1 \cdot 0.2/2) - (1)^2) = -1.4$$

Para k_3 :

$$k_3^y = \Delta t f(t_0 + \Delta t/2, y_0 + \Delta t k_2^y/2, x_0 + \Delta t k_2^x/2)$$

$$= (-7 \cdot (1 + 0.2(-0.6988339)/2) \sin((0.2 * (-1.4)/2) + 2 * 0.1)) = -0.3904146283$$

$$k_3^x = \Delta t g(t_0 + \Delta t/2, y_0 + \Delta t k_2^y/2, x_0 + \Delta t k_2^x/2)$$

$$= (4(0.2 \cdot (-1.4)/2) - (1 + 0.2(-0.6988339)/2)^2) = -1.42511690$$

Para k_4 :

$$k_4^y = f(t_1, y_0 + \Delta t k_3^y, x_0 + \Delta t k_3^x)$$

$$= (-7(1 + 0.2 \cdot (-0.3904146283)) \sin((0.2 \cdot (-1.42511690)) - 2 \cdot (0.2))) = -0.7403586$$

$$k_4^x = g(t_1, y_0 + \Delta t k_3^y, x_0 + \Delta t k_3^x)$$

$$= (4(0.2 \cdot (-1.42511690)) - (1 + 0.2 \cdot (-0.3904146283))^2) = -1.99002461$$

Agora os pontos y_1 e x_1 podem ser avaliados:

$$y_1 = \frac{\Delta t}{6}(k_1^y + 2k_2^y + 2k_3^y + k_4^y) = 0.9027048$$

$$x_1 = \frac{\Delta t}{6} (k_1^x + 2k_2^x + 2k_3^x + k_4^x) = -0.2880086$$

Repetindo o procedimento para o próximo passo, obtém-se os seguintes coeficientes:

$$k_1^y = -0.706188$$
 $k_1^x = -1.9669104$ $k_2^y = -0.6700916$ $k_2^x = -2.6311658$

$$k_3^y = -0.285797$$
 $k_3^x = -2.902888$ $k_4^y = 0.405631$ $k_4^x = -4.1892917$

Com isso, obtém-se:

$$y_2 = 0.828960$$
 $x_2 = -0.8621522$

2 Métodos de Runge-Kutta Adaptativos

Como visto anteriormente, o passo de tempo utilizado (Δt) possui uma grande influência no erro associado à resolução de equações diferenciais através de métodos numéricos. Além disso, o valor de Δt irá definir quantos passos serão necessários para atingir o tempo final desejado. Para reduzir o gasto computacional envolvido, deve-se utilizar o maior passo de tempo possível que garanta que o erro esteja dentro do limite estabelecido.

Para um grande número de problemas comuns na engenharia, a resolução pode necessitar de passos muito pequenos em um determinado intervalo de tempo e possibilitar que passos maiores sejam utilizados para os demais intervalos. Por exemplo, quando a solução representa um decaimento exponencial, usualmente nos instantes iniciais ocorre uma rápida variação na solução que tende a estabilizar conforme o tempo avança. Como consequência, passos de tempo pequenos são necessários nos instantes inicias, porém após um determinado tempo os passos podem ser aumentados sem que o erro seja superior ao especificado.

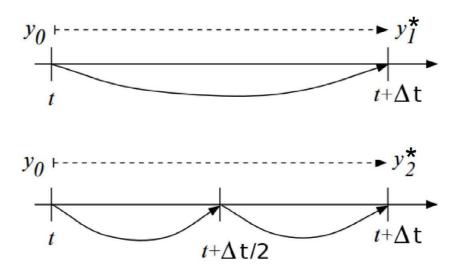
Para evitar estes inconvenientes, pode-se utilizar um passo de tempo que se adapte a solução. A implementação deste tipo de algoritmo requer que o erro de truncamento local seja de alguma forma estimado ao longo da resolução (para cada passo de tempo). Apesar de isto gerar um gasto computacional extra, normalmente o ganho associado ao uso de passos adaptativos supera em muito este gasto.

Existem duas formas duas abordagens distintas para implimentar métodos de Runge-Kutta com passo adaptativo. Uma delas consiste em estimar o erro através da diferença entre duas predições obtidas com passos diferentes usando um método de mesma ordem. A outra abordagem consiste em avaliar o erro local de truncamento através da comparação entre os resultados obtidos com métodos de ordem distintas, utilizado o mesmo passo de tempo.

2.1 Método de Passo Duplo

O método adaptativo mais simples é o método de passo duplo, que consiste em avaliar cada ponto duas vezes, uma vez através de um único passo e outra através de dois passos com a metade do tamanho do primeiro. A diferença entre os dois resultados representa uma estimativa do erro de truncamento local. Por exemplo, quando o ponto y_{i+1} vai ser calculado com base no ponto y_i , primeiramente calcula-se utilizando um passo Δt e na sequência calcula-se novamente y_{i+1} através de dois passos com tamanho $\Delta t/2$.

Suponha que y_1^* representa o valor calculado em $t+\Delta$ com o passo Δt e y_2^* o valor calculado para o mesmo tempo $t+\Delta t$ mas com o passo $\Delta t/2$, como ilustrado na figura a seguir.



Por exemplo, considere o método de Runge-Kutta de primeira ordem (Euler explícito). Como visto anteriormente, neste caso o erro de truncamento local é da ordem de Δt^2 . Definindo a solução exata em $t + \Delta t$ como x, pode-se definir a solução exata em termos de y_1^* :

$$x = y_1^* + \Delta t^2 \phi + O(\Delta t^3)$$

onde ϕ é um escalar. De forma semelhante, para y_2^* são necessários dois passos, de modo que:

$$x = y_2^* + 2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \phi + O(\Delta t^3) = y_2^* + \frac{\Delta t^2}{2}\phi + O(\Delta t^3)$$

Desprezando os termos da ordem de Δt^3 , igualando as duas expressões temos que:

$$y_1^* + \Delta t^2 \phi = y_2^* + 2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \phi$$

Definindo $\Delta = y_2^* - y_1^*$:

$$\Delta = y_2^* - y_1^* = \frac{\Delta t^2}{2} \phi$$

Assim, o termo Δ representa uma estimativa do erro associado com y_2^* . Para métodos de maior ordem, o parâmetro Δ também irá representar uma estimativa do erro associado com y_2^* , porém neste caso o erro não será da ordem de Δt^2 mas irá depender da ordem do método utilizado. Por exemplo, para o método RK4, o parâmetro Δ será da orde de Δt^5 .

Se o valor Δ for inferior ao erro local permitido, pode-se aumentar o passo Δt , enquanto que se Δ for maior que o erro permitido, deve-se diminuir Δt .

Considere, por exemplo, que o erro máximo permitido seja $e_{max}=10^{-6}$. Se $\Delta=|y_2^*-y_1^*|<10^{-6}$, valida-se o passo e utiliza-se o valor y_2^* . Para corrigir o passo de tempo Δt , diferentes relações podem ser utilizadas, como por exemplo:

$$\Delta t = \left(\frac{e_{max}}{\Delta}\right)^{\alpha} \Delta t^*$$

onde Δt^* representa o passo de tempo antigo e Δt o valor corrigido. Como neste caso $e_{max} > \Delta$, o valor novo obtido será maior que o anterior. O valor de α recomendado para este caso $(e_{max} > \Delta)$ é de $\alpha = 0.2$

Considerando agora que $\Delta > e_{max}$. Neste caso, o passo é invalidado e deve ser recalculado com um passo menor. A relação utilizada para recalcular o passo é a mesma apresentada anteriormente, porém neste caso o valor corrigido será menor que o anterior e o valor recomendado para α é de $\alpha = 0.25$.

Exemplo 02) Utilize o método de Runge-Kutta de quarta ordem juntamente com o método do passo duplo para estimar o valor de y(1.25). Considere que o erro de truncamento local não pode ser superior a 10^{-3} e como estimativa inicial para o passo de tempo considere $\Delta t = 1$:

$$\frac{dy}{dt} = 4e^{0.8t} - 0.5y \qquad y(0) = 2$$

Avaliando o primero passo com $\Delta t=1$, obtemos $y(1)=y_1^*=6.201$. Considerando agora $\Delta t=0.5$, a resolução de dois passos implica que $y(1)=y_2^*=6.195$. Assim:

$$\Delta = y_2^* - y_1^* = 0.006$$

Como o valor é superior ao erro máximo, deve-se refazer este passo. Recalculando o passo de tempo:

$$\Delta t = \left(\frac{10^{-3}}{0.006}\right)^{0.25} 1 = 0.638943$$

Recalculando o primeiro passo de tempo com o novo valor de Δt , obtém-se que $y_1^* = 4.3481$ e $y_2^* = 4.3475$, de modo que $\Delta = 6 \times 10^{-4}$. Como o valor é inferior ao erro máximo, este ponto pode ser validado:

$$t_1 = t_0 + \Delta t = 0.638943$$

$$y(t_1) = y_1 = 4.3475$$

Para avaliar o próximo passo, primeiramente pode-se avaliar um novo Δt :

$$\Delta t = \left(\frac{10^{-3}}{6 \times 10^{-4}}\right)^{0.2} \cdot 0.638943 = 0.707672$$

Utilizando este valor, obtém-se qu
 para $t_2=t_1+\Delta t=0.638943+0.707672=1.346615$, $y_1^*=8.4886328$ e $y_2^*=8.4869326$, de modo que $\Delta=0.0017$. Como o valor está acima do erro máximo, deve-se reduzir o passo de tempo:

$$\Delta t = \left(\frac{10^{-3}}{0.0017}\right)^{0.25} 0.707672 = 0.619755$$

Recalculado os valores, agora para $t_2 = t_1 + \Delta t = 0.638943 + 0.619755 = 1.258698$, obtém-se que $y_1^* = 7.849350209$ e $y_2^* = 7.84849122$, de modo que $\Delta = 8.59 \times 10^{-4}$. Como o erro está abaixo do especificado, pode-se validar o passo. Assim:

$$t_2 = 1.258698$$

$$y(t_2) = y_2 = 7.84849122$$

Como deseja-se saber y(1.25), o valor de t_2 já está acima do especifado. Para obter o valor no ponto t=1.25, pode-se realizar uma interpolação linear entre os valores para t_1 e t_2 :

$$y(1.25) = y_1 + \frac{(t_2 - 1.25)}{(t_2 - t_1)}(y_2 - y_1) = 7.79936$$

2.2 Método de Runge-Kutta-Fehlberg

Outra alternativa para estimar o erro local de truncamento é avaliar um dado ponto através de métodos com ordem distinta. Por exemplo, pode-se avaliar a solução em um dado ponto $y(t_{i+1})$ através de um método de segunda ordem (y_{i+1}^*) e de um método de terceira ordem (y_{i+1}) . A diferença entre os dois valores $(y_{i+1} - y_{i+1}^*)$ representa uma estimativa do erro de truncamento neste ponto. Se os dois valores forem muito próximos, isto indica que a redução no passo de tempo não irá diminuir significativamente o erro local de truncamento.

A abordagem mais utilizada consiste em avaliar a solução em um ponto através de métodos de Runge-Kutta de quarta e quinta ordem, sendo que as estimativas de quarta ordem (y_{i+1}^*) e de quinta ordem (y_{i+1}) podem ser representadas como:

$$y_{i+1}^* = y_i + \Delta t \left(\frac{37}{378} k_1 + \frac{250}{621} k_3 + \frac{125}{594} k_4 + \frac{512}{1771} k_6 \right)$$
$$y_{i+1} = y_i + \Delta t \left(\frac{2825}{27648} k_1 + \frac{18575}{48384} k_3 + \frac{13525}{55296} k_4 + \frac{277}{14336} k_5 \frac{1}{4} + k_6 \right)$$

onde:

$$k_{1} = f(t_{i}, y_{i})$$

$$k_{2} = f\left(t_{i} + \frac{\Delta t}{5}, y_{i} + \frac{\Delta t}{5}k_{1}\right)$$

$$k_{3} = f\left(t_{i} + \frac{3\Delta t}{10}, y_{i} + \frac{3\Delta t}{40}k_{1} + \frac{9\Delta t}{40}k_{2}\right)$$

$$k_{4} = f\left(t_{i} + \frac{3\Delta t}{5}, y_{i} + \frac{3\Delta t}{10}k_{1} - \frac{9\Delta t}{10}k_{2} + \frac{6\Delta t}{5}k_{3}\right)$$

$$k_{5} = f\left(t_{i} + \Delta t, y_{i} - \frac{11\Delta t}{54}k_{1} + \frac{5\Delta t}{2}k_{2} - \frac{70\Delta t}{27}k_{3} + \frac{35\Delta t}{27}k_{4}\right)$$

$$k_{6} = f\left(t_{i} + \frac{7\Delta t}{8}, y_{i} + \frac{1631\Delta t}{55296}k_{1} + \frac{175\Delta t}{512}k_{2} + \frac{575\Delta t}{13824}k_{3} + \frac{44275\Delta t}{110592}k_{4} + \frac{253\Delta t}{4096}k_{5}\right)$$

Da mesma forma como para o método anterior, o erro associado com a estimativa do ponto y_{i+1} é avaliado como:

$$\Delta = y_{i+1} - y_{i+1}^*$$

Com base neste valor, utiliza-se o mesmo critério apresentado anteriormente para corrigir o passo de tempo Δt , ou seja, se o erro for menor que o especificado aumenta-se o passo de tempo e se o erro for menor descarta-se o valor obtido e reduz-se o passo de tempo até que o erro esteja dentro do valor tolerável. As relações utilizadas para reduzir ou aumentar o passo são as mesmas apresentadas para o método do passo duplo.

3 Métodos de Passos Múltiplos

Os métodos de passos múltiplos são aqueles onde a variável y_{n+1} é determinada com base nos valores desta variável em mais de um ponto, como por exemplo no método baseado na regra do ponto médio:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\Delta t y'(t_n)$$
 \to $y'(t_n) = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2\Delta t}$

Os demais métodos, que determinam y_{n+1} com base somente nos valores de y_n , são chamados de métodos de passo único.

Como visto anteriormente, os métodos de passos múltiplos não iniciam automaticamente, sendo necessário avaliar alguns pontos iniciais através de outro método. Dentre os métodos de passos múltiplos, os mais utilizados são os da família dos métodos de Adams, como apresentado a seguir.

3.1 Método de Adams-Bashforth

Considere novamente o seguinte PVI:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \qquad \qquad y(t_0) = y_0$$

Uma maneira de obter o valor em um ponto y_{n+1} com base em um valor conhecido y_n é integrar a equação desde um ponto t_n até um ponto t_{n+1} :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t)dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y)dt$$

Como o lado esquerdo avalia a integral de uma derivada, podemos escrever a expressão anterior como:

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = y_{n+1} - y_n = \int_t^{t_{n+1}} f(t, y) dt$$

Como a função y(t) não é conhecida, não é possível resolver diretamente a integral do lado direito da equação. O método de Adams-Bashforth consiste em substituir a função f(t,y) por um polinômio p(t), permitindo assim a resolução da integral:

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} p(t)dt$$

Dependendo da ordem escolhida para o polinômio p(t), diferentes formulações são obtidas. Os coeficientes associados ao polinômio são determinados com base nos valores já conhecidos para y_n , y_{n-1} , y_{n-2} , etc. Caso um polinômio de ordem k for utilizado, é necessário conhecer a solução em k+1 pontos.

Por exemplo, caso um polinômio de primeira ordem for empregado:

$$p(t) = At + B$$

é necessário conhecer o valor da função f(x,y) em dois pontos, ou seja, é necessário determinar dois valores $(y_n \in y_{n-1})$ para encontar as constantes $A \in B$. Com isso:

$$At_n + B = f(t_n, y_n) = f_n$$

$$At_{n-1} + B = A(t_n - \Delta t) + B = f(t_{n-1}, y_{n-1}) = f_{n-1}$$

Resolvendo para $A \in B$:

$$A = \frac{f_n - f_{n-1}}{\Delta t} \qquad B = \frac{f_{n-1}t_n - f_nt_{n-1}}{\Delta t}$$

Substituindo p(t) = At + B na expressão anterior e resolvendo a integral:

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (At + B)dt = y_n + \frac{A}{2}(t_{n+1}^2 - t_n^2) + B(t_{n+1} - t_n)$$

Substituindo as expressões obtidas para A e B e simplificando o resultado obtido:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{3}{2}\Delta t \cdot f_n - \frac{1}{2}\Delta t \cdot f_{n-1}$$

Esta relação é conhecida como método de Adams-Bashforth de 2^a ordem, e representa um método explícito onde é necessário conhecer a solução nos dois pontos anteriores.

Usando polinômios de maior ordem, pode-se obter métodos de maior ordem. Um dos mais utilizados é o de quarta ordem:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$

Neste caso, é necessário conhecer 4 pontos anteriores. Em comparação com outros métodos de quarta ordem, como RK4, o método de Adams-Bashforth costuma apresentar melhores resultados.

3.2 Método de Adams-Moulton

O método de Adams-Moulton é uma modificação do método de Adams-Bashftorh que consiste em avaliar o polinômio interpolador p(t) em $t_{n+1}, t_n, t_{n-1}, \ldots$ ao invés de $t_n, t_{n-1}, t_{n-2}, \ldots$

Por exemplo, considere novamente um polinômio de primeira ordem $p(t) = \alpha t + \beta$. Neste caso, as constantes são avaliadas através da relações:

$$\alpha t_{n+1} + \beta = f_{n+1}$$

$$\alpha t_n + \beta = f_n$$

De onde se obtém que:

$$\alpha = \frac{f_{n+1} - f_n}{\Delta t} \qquad \beta = \frac{f_n t_{n+1} - f_{n+1} t_n}{\Delta t}$$

De modo que y_{n+1} pode ser obtido como:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} f_n + \frac{\Delta t}{2} f_{n+1}$$

Considerando que $f_{n+1} = f(t_{n+1}, y_{n+1})$, esta relação representa uma fórmula implícita de segunda ordem.

Utilizando polinômios de ordem maior, obtém-se formulações de ordem superior. O método de Adams-Moulton de quarta ordem é dado como:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{24} (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$

Para evitar as dificuldades associadas ao uso de métodos implícitos, é comum adotar uma abordagem preditiva-corretiva, utilizando Adams-Bashforth como uma etapa preditiva e Adams-Moulton como corretora.

Por exemplo, utilizando uma abordagem de segunda ordem, a etapa preditiva é dada como:

$$y_{n+1}^* = y_n + \frac{3}{2}\Delta t \cdot f_n - \frac{1}{2}\Delta t \cdot f_{n-1}$$

Sendo este valor posteriormente corrigido com a relação de Adams-Moulton:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} f_n + \frac{\Delta t}{2} f_{n+1}^*$$

onde $f_{n+1}^* = f(t_{n+1}, y_{n+1}^*)$

Exemplo 03:) Utilizando uma abordagem preditiva-corretiva, utilize os métodos de Adams de segunda ordem para obter a solução aproximada do seguinte PVI até t = 0.4, utilizando $\Delta t = 0.1$:

$$\frac{dy}{dt} = -y + 2t \qquad \qquad y(0) = 2$$

Esta equação foi avaliada anteriormente com o método de Runge-Kutta. Para utilizar Adams-Bashforth, neste caso é necessário conhecer a solução em dois pontos anteriores. Pode-se utilizar a condição inicial como um destes pontos:

$$t_0 = 0$$
 $y_0 = 2$

e o valor obtido com o método de Runge-Kutta para y_1 :

$$t_1 = 0.1$$
 $y_1 = 1.82$

Com isso, pode-se determinar o valor preditivo em $t_2 = 0.2$:

$$y_2^* = y_1 + \frac{3}{2}\Delta t \cdot f(t_1, y_1) - \frac{1}{2}\Delta t \cdot f(t_0, y_0) = 1.577$$

Utilizando Adams-Moulton para corrigir o valor:

$$y_2 = y_1 + \frac{\Delta t}{2} f(t_1, y_1) + \frac{\Delta t}{2} f(t_2, y_2^*) = 1.68015$$

Repetindo o procedimento para o próximo passo de tempo $(t_3 = 0.3)$:

$$y_3^* = y_2 + \frac{3}{2}\Delta t \cdot f(t_2, y_2) - \frac{1}{2}\Delta t \cdot f(t_1, y_1) = 1.48313$$
$$y_3 = y_2 + \frac{\Delta t}{2}f(t_2, y_2) + \frac{\Delta t}{2}f(t_3, y_3^*) = 1.57199$$

Finalmente, para o último passo de tempo $(t_4 = 0.4)$:

$$y_4^* = y_3 + \frac{3}{2}\Delta t \cdot f(t_3, y_3) - \frac{1}{2}\Delta t \cdot f(t_2, y_2) = 1.4902$$
$$y_4 = y_3 + \frac{\Delta t}{2}f(t_3, y_3) + \frac{\Delta t}{2}f(t_4, y_4^*) = 1.4889$$