Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos

ISSN - 0109-2569

Métodos numéricos para a solução de equações algébrico - diferenciais

AUGUSTO DE ABREU PIRES

ANTÔNIO CASTELO FILHO

Nº 29

RELATÓRIOS TÉCNICOS DO ICMSC

SÃO CARLOS
Out. / 1994

SYSNO 0872272
DATA / /
ICMC - SBAB

Métodos Numéricos para a Solução de Equações Algébrico - Diferenciais

Augusto de Abreu Pires

Antônio Castelo Filho

Relatório Técnico

ICMSC - Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos, da Universidade de São Paulo.

São Carlos
1994

ÍNDICE

1 - INTRODUÇÃO 01

2 - MÉTODOS BDF 07
2.1 - Introdução 07
2.2 - Convergência dos métodos BDF 11
2.2.1 - Sistemas semi - explícitos de índice 1 11
2.2.2 - Sistemas de índice 1 implícitos 11
2.2.3 - Sistemas semi - explícitos de índice 2 12

3 - EAD COM SINGULARIDADES 14
3.1 - Resultados Teóricos 14

4 - ALGORITMOS 20

5 - RESULTADOS NUMÉRICOS 27
5.1 - Introdução 27
5.1 - Exemplos Numéricos 27

6 - CONCLUSÃO 36

7 - BIBLIOGRAFIA 38

1 INTRODUÇÃO

O tema deste trabalho é Equações Algébrico - Diferenciais (EAD), as quais constituem sistemas que envolvem equações algébricas e equações diferenciais. A escolha deste assunto se deve ao fato de que a solução numérica de EAD tem sido objeto de intensas pesquisas nos últimos anos, conseguindo-se grande progresso na compreensão da estrutura matemática e na análise de métodos numéricos para sistemas de EAD.

EAD surgem frequentemente em problemas de diversas áreas de estudo, dentre as quais destacamos:

- Sistemas mecânicos restritos
- Equações do movimento descrito por pêndulos
- Problemas em robótica
- Problemas de controles ótimos com controles restritos.

Apresentaremos, agora, algumas definições básicas, necessárias para a compreensão de resultados posteriores.

***Definição* 1.1** *Um Homeomorfismo entre X e Y é uma aplicação $H : X \to Y$ contínua, inversível com inversa contínua. Se H e H^{-1} são de classe C^k, dizemos que H é um Homeomorfismo de classe C^k entre X e Y. Um Homeomorfismo de classe C^k, com $k \geq 1$ é dito um Difeomorfismo de classe C^k, onde C^j é o espaço das funções j-vezes diferenciáveis com a j-ésima derivada contínua.*

***Definição* 1.2** *$M \subset R^k$ é uma Variedade de classe C^r de dimensão n se para todo $x \in M$, existem vizinhanças abertas $U \subset R^k$ de x, $V \subset R^n$, e um Homeomorfismo de classe C^r, $H : V \to U \cap M$.*

Adotaremos para o restante deste trabalho, a seguinte notação, a menos que algo ao contrário seja dito:

R^{ixj}: espaço das matrizes (i x j) com coeficientes reais,

R^{ij}: espaço real de dimensão ij, onde, ij denota o produto do número real i pelo número real j (i.j).

Inicialmente, apresentaremos os principais tópicos da teoria das EAD, outros, podem ser encontrados em [Brenan/Campbell/Petzold - 89] ou em [Pires - 93].

Uma função y(t) é uma solução (clássica) da EAD não linear geral

$$F(t,y(t),y'(t))=0 \qquad (1.1)$$

onde $t \in I \subset R$, $y \in R^m$ e $F: R^{2m+1} \to R^m$, em um intervalo I, se y é continuamente diferenciável em I e satisfaz (1.1) para todo $t \in I$.

***Definição* 1.3** *Seja I um intervalo aberto de R, Ω um subconjunto conexo aberto de R^{2m+1} e F uma função diferenciável de Ω em R^m. Então a EAD (1.1) é solúvel em I sobre Ω se existe uma família r-dimensional de soluções $\phi(t,c)$ definidas em um conjunto conexo aberto $I \times \tilde{\Omega}$, $\tilde{\Omega} \subset R^r$ tal que:*

i) $\phi(t,c)$ está definida em todo I para cada $c \in \tilde{\Omega}$;

ii) $(t,\phi(t,c),\phi'(t,c)) \in \Omega$ para $(t,c) \in I \times \tilde{\Omega}$;

iii) Se $\Psi(t)$ é qualquer outra solução e $(t,\Psi(t,c),\Psi'(t,c)) \in \Omega$ então $\Psi(t)=\phi(t,c)$ para algum $c \in \tilde{\Omega}$;

iv) o gráfico de ϕ como uma função de (t,c) é uma variedade $(r+1)$-dimensional.

***Definição* 1.4** *O número mínimo de vezes que a equação (1.1), ou parte dela, será diferenciada com relação a t para determinar y' como uma função contínua de y e t (ou seja, transformar a EAD em uma EDO) é o índice v da EAD (1.1). Este índice também é chamado de índice global.*

Uma EAD linear com coeficientes constantes tem a forma

$$Ax' + Bx = f \tag{1.2}$$

onde A e B são matrizes mxm.

***Definição* 1.5** *Seja λ um parâmetro complexo. Então $(\lambda A + B)$ é a matriz pencil.*

***Definição* 1.6** *Se o $\det(\lambda A + B)$ não é identicamente nulo como uma função de λ, então a matriz pencil, ou simplesmente o pencil, $(\lambda A + B)$ é dito ser regular.*

Quando o pencil é um pencil regular dizemos que a EAD é uma EAD regular.

***Teorema* 1.1** *Suponha que $(\lambda A + B)$ é um pencil regular. Então existem matrizes não singulares P e Q tais que*

$$PAQ = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & N \end{bmatrix} \quad e \quad PBQ = \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \tag{1.3}$$

onde N é uma matriz diagonal por blocos, isto é,

$$N = \begin{bmatrix} N_1 & & & & \\ & N_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & N_k \end{bmatrix}$$

e cada N_i *é da forma*

$$N_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

com dimensão m_i *e C é a forma canônica de Jordan da matriz* $(J_1^{-1}(I - cJ_1))$ *onde* J_1 *é o bloco de Jordan da matriz* $((cA+B)^{-1}.A)$ *que contém todos os auto valores não nulos e* $c \neq 1$ *é tal que* $(cA+B)$ *é inversível. Além disso, considerando o sistema*

$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & N \end{bmatrix} x' + \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} x = f$$

se $N=0$, *então* $v=1$. *No caso em que A é não singular, nós temos* $PAQ=I$, $PBQ=C$ *e* $v=0$. *Se* $\det(\lambda A + B)$ *é identicamente constante então* (1.3) *simplifica-se para* $PAQ=N$, $PBQ=I$.

Observe que a matriz N, do teorema anterior, tem índice de nilpotência α (isto é, $N^{\alpha} = 0$ e $N^{\alpha-1} \neq 0$), onde $\alpha = \max_{1 \leq j \leq k} \{\dim N_j\}$.

Observe, ainda, que o índice de nilpotência de N é exatamente o índice da EAD, como descrito anteriormente.

Considerando que as mudanças de coordenadas P, Q proporcionadas por este teorema sejam aplicadas à EAD (1.2), isto é, considerando $x = Qy$, então (1.2) torna-se $AQy' + BQy = f$, e multiplicando a esquerda por P, temos

$$PAQy' + PBQy = Pf \qquad (1.4)$$

logo, pelo teorema 1.1, obtemos, com $Pf = [f_1, f_2]^t$,

$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & N \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}$$

ou seja,

$$\begin{cases} y_1' + Cy_1 = f_1 & (1.5a) \\ Ny_2' + y_2 = f_2 & (1.5b) \end{cases}$$

A equação (1.5a) é uma EDO cuja solução existe para qualquer valor inicial de y_1 e qualquer função contínua f_1. Quanto a (1.5b), esta tem apenas uma solução , pois

$$Ny_2' + y_2 = (ND + I)y_2 = f_2$$

e assim

$$y_2 = (ND + I)^{-1} f_2$$

onde $D = \dfrac{d}{dt}$.

Como

$$(ND + I)^{-1} = \sum_{i=0}^{\alpha-1} (-1)^i N^i D^i$$

onde α é o grau de nilpotência de N, temos

$$y_2 = (ND + 1)^{-1} f_2 = \sum_{i=0}^{\alpha-1} (-1)^i N^i f_2^{(i)} \qquad (1.6)$$

onde $f_2^{(i)} = \dfrac{d^i f_2}{dt^i}$.

***Teorema* 1.2** *A EAD linear com coeficientes constantes* (1.2) *é solúvel se e somente se o pencil* $(\lambda A + B)$ *é um pencil regular.*

Seja a EAD

$$A(t)x'(t) + B(t)x(t) = f(t) \qquad (1.7)$$

onde A,B são 2m-vezes diferenciáveis, f é m-vezes diferenciável, $t \in I$ e I é um subintervalo de R.

A equação (1.7) é a forma geral de uma EAD linear com coeficientes dependendo do tempo.

***Definição* 1.7** *Se* (1.7) *é uma EAD regular, então o índice local para t, denotado por* $v_t(t)$, *é o índice do pencil* $(\lambda A(t) + B(t))$, *que é a nilpotência da matriz N, apresentada no teorema* 1.1.

Consideremos a mudança de coordenada em (1.7) dada por $x = Q(t)y$ e multipliquemos também por P(t), assim obtemos

$$PAQy' + (PAQ' + PBQ)\, y = Pf \tag{1.8}$$

onde P e Q são matrizes não singulares no intervalo de interesse e pelo menos tão suaves quanto os coeficientes da EAD.

Como P e Q são não singulares, (1.7) e (1.8) são analiticamente equivalentes.

***Definição* 1.8** *Uma propriedade de uma matriz é uma propriedade estrutural se todo elemento não nulo da matriz pode ser trocado por variáveis independentes e a propriedade ainda vale em um conjunto denso aberto de valores destas variáveis.*

Ao contrário do caso linear com coeficientes constantes a estrutura do pencil $(\lambda A + B)$ não está diretamente ligada com as soluções da EAD linear com coeficientes dependendo do tempo. Por (1.6) vemos que se N é uma matriz constante e $N^{\alpha} = 0$ e $N^{\alpha-1} \neq 0$ (ou seja, N tem índice de nilpotência α), então $Nx' + x = f$ é solúvel. Agora, no caso de sistemas lineares com coeficientes dependendo do tempo podemos ter mais de uma solução devido ao fato que $(N(t))^{\alpha} = 0$ não necessariamente implica $\left(N\frac{d}{dt}\right)^{\alpha} = 0.$

Agora se N(t) é estruturalmente nilpotente (no sentido da definição 1.8), então se $[N(t)]^{\alpha} = 0$ teremos $\left(N\frac{d}{dt}\right)^{\alpha} = 0$ e assim

$$N(t)x' + x = f,$$

que pode ser escrita como

$$(N(t)D + I)x = f$$

onde $D = \frac{d}{dt}$, tem como solução

$$x = (N(t)D+I)^{-1}f = \sum_{i=0}^{\infty}(-1)^i(N(t)D)^i f = \sum_{i=0}^{\alpha-1}(-1)^i(N(t)D)^i f \cdot$$

2 MÉTODOS BDF

2.1 Introdução

Inicialmente mostraremos porque as fórmulas de diferenças para trás (métodos BDF) aparecem como a mais popular classe de métodos para a solução de EAD gerais.

A primeira técnica geral bem sucedida para a solução numérica de EAD, foi proposta por [Gear - 71]. Esta técnica, que utilizava os métodos BDF, foi inicialmente aplicada a sistemas de equações diferenciais acopladas a equações algébricas, denominados sistemas semi - explícitos

$$\begin{cases} x' = f(x,y,t) & (2.1.1a) \\ 0 = g(x,y,t) & (2.1.1b) \end{cases}$$

onde y é um vetor da mesma dimensão que g.

Os métodos BDF tratam as variáveis algébricas e diferenciais do problema (2.1.1) de maneira análoga, logo a idéia básica desses métodos pode ser generalizada para a solução do problema completamente implícito (1.1).

O método BDF de primeira ordem mais simples é o método de Euler implícito, que consiste em substituir a derivada em (1.1) por uma diferença para trás, ou seja, (1.1) é transformada em

$$F\left(t_n, y_n, \frac{y_n - y_{n-1}}{h}\right) = 0$$

onde $h = t_n - t_{n-1}$.

O sistema de equações não lineares para y_n em cada passo é, então, usualmente resolvido pelo método de Newton.

O método BDF de k-passos consiste em substituir y' pela derivada do polinômio que interpola a solução sobre os pontos $t_n, t_{n-1}, \ldots, t_{n-k}$ avaliado para t_n. Isto nos dá

$$F\left(t_n, y_n, \frac{\rho y_n}{h}\right) = 0 \qquad (2.1.2)$$

onde $\rho y_n = \sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n-i}$, e α_i, $i = 0,1,\ldots,k$ são os coeficientes do método BDF, que podem ser encontrados em [Lambert - 73], na página 242.

Lembramos que o método BDF é uma classe especial dos métodos lineares de passo múltiplo, pois tais métodos, quando aplicados ao problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(a) = \eta \end{cases}$$

são representados, em sua forma geral, pela expressão

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n-j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n-j}\,, \quad \alpha_0 = 1, \tag{2.1.3}$$

e tomando $\beta_1 = \cdots \beta_k = 0$ temos a expressão

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n-j} = h\beta_0 f_n$$

que é o método BDF geral, para o problema de valor inicial acima.

Ainda mais, quando k=1, temos

$$\alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n-1} = h\beta_0 f_n .$$

De [Lambert - 73], temos que se k=1 então $\alpha_0 = -\alpha_1 = \beta_0 = 1$, assim

$$y_n - y_{n-1} = h f_n$$

ou seja,

$$y'_n = f_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{h}$$

que é o método de Euler implícito.

Observação: Da teoria de EDO, sabemos que um método BDF de k-passos é estável para EDO se $k \leq 6$. Assim consideraremos sempre $k \leq 6$.

Os resultados apresentados a seguir podem ser encontrados em [Brenan/Campbell/ Petzold - 89] ou em [Pires - 94].

***Teorèma* 2.1.1** *O método BDF de k-passos* ($k \leq 6$) *com tamanho de passo constante h aplicado a sistemas de EAD linear com coeficientes constantes de índice v é convergente de ordem* $O(h^k)$ *depois de* $(v\text{-}1)k+1$ *passos.*

Em contraste, para métodos BDF aplicados a uma EDO explícita, o erro local é de uma ordem superior ao erro global, quando lembramos que, as definições de erro local e de erro global para EAD, são como em EDO.

Agora, nem todas EAD são resolvidas com sucesso pelos métodos BDF. Para ilustrar um problema que pode ocorrer com a aplicação dos métodos BDF a sistemas de índice alto, ou seja, maior que 1, analisaremos um exemplo simples.

Consideremos o sistema de índice 3

$$\begin{cases} x_1' = x_2 \\ x_2' = x_3 \\ 0 = x_1 - g(t) \end{cases}.$$

A solução exata da EAD é claramente

$$\begin{cases} x_1(t) = g(t) \\ x_2(t) = g'(t) \\ x_3(t) = g''(t) \end{cases}.$$

Pelo método de Euler implícito obtemos

$$\begin{cases} x_{1,n} = g(t_n) \\ x_{2,n} = \dfrac{x_{1,n} - x_{1,n-1}}{h} \\ x_{3,n} = \dfrac{x_{2,n} - x_{2,n-1}}{h} \end{cases}.$$

Ignorando os erros de arredondamento, o valor de x_1 será determinado exatamente em todos os passos, mesmo se o valor inicial $x_{1,0}$ está errado. Agora suponha que os valores iniciais para t_0 não satisfazem o sistema original. Então os valores $x_{2,1}$ e $x_{3,1}$ obtidos no final do primeiro passo estarão incorretos. Depois de dois passos, $x_{2,2}$ será exato O(h), visto que ele é determinado pela primeira diferença dividida de g(t). De qualquer maneira, $x_{3,2}$ ainda está incorreto. No terceiro passo, o valor para $x_{3,3}$ é exato O(h), pois ele é obtido pela segunda diferença dividida de g(t). Portanto, mesmo com valores iniciais incorretos, depois de três passos de tamanho h com o método de Euler implícito, a solução numérica é exata O(h).(Se valores iniciais consistentes são dados, a solução é exata O(h) no final do segundo passo).

Uma segunda dificuldade que aparece para o método BDF, diz respeito à estabilidade, quando aplicados a sistemas de EAD de índice ≥ 2. Nós vimos que o método BDF com passo constante pode ser usado para EAD com coeficientes constantes. Agora, o que ocorre quando eles são aplicados à EAD com coeficientes variando com o tempo? De

[Gear/Petzold - 83] vemos que se o índice local de nilpotência da matriz N apresentada no teorema 1.1, que é o índice local da EAD, é dois, teremos um problema de estabilidade dependendo dos coeficientes.

Para exemplificar o fato acima, veremos um exemplo

Consideremos o sistema

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & \eta t \end{bmatrix} z' + \begin{bmatrix} 1 & \eta t \\ 0 & 1+\eta \end{bmatrix} z = \begin{bmatrix} g(t) \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (2.1.4)$$

o qual foi obtido do sistema

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} y' + y = \begin{bmatrix} g(t) \\ 0 \end{bmatrix}$$

pela mudança de variável $y = Hz$ onde $H = \begin{bmatrix} 1 & \eta t \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

Facilmente vemos que o índice da EAD é 2. Se $\eta = -1$, a EAD (2.1.4) não tem uma matriz pencil regular.De qualquer modo é fácil verificar, usando as transformações

$$P = I \quad e \quad Q = \begin{bmatrix} 1 & -\dfrac{\eta t}{(1+\eta)} \\ 0 & \dfrac{1}{(1+\eta)} \end{bmatrix}$$

que seu índice local também é 2.

Se (2.1.4) é resolvida pelo método de Euler implícito, obtemos a solução numérica

$$\begin{cases} z_{2,n} = \dfrac{\eta}{1+\eta} z_{2,n-1} - \dfrac{g_n - g_{n-1}}{h(1+\eta)} \\ z_{1,n} = g_n - \eta t_n z_{2,n} \end{cases}.$$

A solução exata é

$$\begin{cases} z_2(t_n) = -g'(t_n) \\ z_1(t_n) = g(t_n) + \eta t_n g'(t_n) \end{cases}$$

e a solução numérica é instável se $\eta < -\dfrac{1}{2}$.

Relembramos que um método é estável se existir um $h_0 > 0$ para cada equação diferencial tal que uma mudança nos valores iniciais por uma quantidade fixa produz uma mudança limitada na solução numérica para todo $0 < h \leq h_0$.

2.2 Convergência dos métodos BDF

Nesta seção estudaremos alguns resultados sobre a convergência dos métodos BDF, quando aplicados à EAD de índice 1 e índice 2 na forma semi - explícita, uma vez que, da definição de índice, vemos que uma EAD de índice 0 é uma EDO.

2.2.1 Sistemas semi-explícitos de índice 1

Sistemas semi-explícitos de índice 1 constituem uma importante classe dentre os sistemas de índice 1 e aparecem frequentemente em problemas de engenharia. Consideremos o sistema dado por (2.1.1) onde $\left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)^{-1}$ existe e é limitada em uma vizinhança da solução exata.

A aplicação dos métodos lineares de passo múltiplo a estes sistemas é tão simples, que descreveremos o caso geral, ao invés de nos limitarmos aos métodos BDF no resto desta seção. Analogamente a (2.1.3), a aplicação destes métodos a EAD (2.1.1) conduz ao seguinte algoritmo

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j x_{n-j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(x_{n-j}, y_{n-j}, t_{n-j}) & (2.2.1a) \\ 0 = g(x_n, y_n, t_n) & (2.2.1b) \end{cases}$$

Desta maneira, os resultados de convergência e estabilidade para EDO não stiff são ainda válidos para a EAD semi-explícita de índice 1.

2.2.2 Sistemas de índice 1 implícitos

Nesta subseção apresentaremos o principal resultado de convergência para métodos BDF aplicados a sistemas de índice 1 implícitos, que são dados, na sua forma geral por (1.1).

Vamos, primeiramente, definir algumas terminologias e provar alguns resultados preliminares.

Consideremos a EAD implícita (1.1) sujeita a condição inicial $y(t_0) = y_0$.

Assumiremos que F é uma função suficientemente suave e que existe uma solução suave y(t) satisfazendo a condição inicial dada.

***Definição* 2.2.1** *A EAD não linear* (1.1) *é dita ser de índice* 1 *uniforme se o índice do sistema com coeficientes constantes*

$$Aw'(t) + Bw(t) = g(t) \tag{2.2.2}$$

onde,

$$\begin{cases} A = F_{y'}(\hat{t}, \hat{y}, \hat{y}') \\ B = F_{y}(\hat{t}, \hat{y}, \hat{y}') \end{cases} \tag{2.2.3}$$

é 1 *para todo* $(\hat{t}, \hat{y}, \hat{y}')$ *em uma vizinhança do gráfico da solução, e se:*

1- *As derivadas parciais de A com respeito a t, y, y', existem e são limitadas em uma vizinhança da solução.*

2- *O posto de A é constante em uma vizinhança da solução.*

***Teorema* 2.2.1** *Seja* (1.1) *uma EAD de índice* 1 *uniforme em um intervalo* $I = [t_0, t_0 + T]$. *Suponhamos que os erros nos valores iniciais são* $O(h^k)$ *e os erros da iteração de Newton em cada passo são* $O(h^{k+1})$. *Então a solução numérica de* (1.1) *por um método BDF de k-passos com tamanho h, fixo, para* $k < 7$, *converge com* $O(h^k)$ (*depois de k+1 passos*).

2.2.3 Sistemas semi-explícitos de índice 2

Nesta subseção estudaremos o comportamento dos métodos BDF aplicados a sistemas semi-explícitos de índice 2. Veremos que um método BDF de k-passos ($k < 7$) é convergente com $O(h^k)$.

Consideremos o sistema não linear semi-explícito

$$\begin{cases} f(x, x', y, t) = 0 & \text{(2.2.4a)} \\ g(x, y, t) = 0 & \text{(2.2.4b)} \end{cases}$$

onde assumimos que o sistema tem índice 2, $\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)^{-1}$ existe e é limitada em uma vizinhança da solução, $\left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)$ tem posto constante, e f e g tem quantas derivadas parciais contínuas desejarmos em uma vizinhança da solução.

***Teorema* 2.2.2** *Suponha que o sistema semi-explícito de índice* 2 (2.2.4) *é resolvido numericamente por um método BDF de k-passos* ($k < 7$), *os erros nos valores iniciais são* $O(h^k)$, *e os erros na iteração de Newton satisfazem* $O(h^{k+1})$. *Então o método BDF de k-passos é convergente* (*globalmente*) *com* $O(h^k)$, *depois de* $(k+1)$ *passos.*

3 EAD COM SINGULARIDADES

3.1 Resultados Teóricos

No capítulo anterior não tratamos de EAD com singularidades, isto porque os métodos BDF, quando aplicados a EAD com singularidades não apresentam um bom comportamento. Neste capítulo, então, estudaremos uma teoria, que pode ser encontrada em [Castelo/Tavares - 94], a qual tomaremos como base para uma nova classe numérica, que será desenvolvida no próximo capítulo, que em particular, resolve EAD com singularidades satisfatoriamente.

***Definição* 3.1.1** *Dada uma EAD de índice v, sabemos que após v diferenciações esta estará reduzida a uma EDO do tipo*

$$y' = G(t,y). \tag{3.1.1}$$

Disto definimos K como o conjunto conexo, aberto, maximal onde G está definida.

***Definição* 3.1.2** *O índice v da EAD* (1.1) *sobre K é o número mínimo de vezes que* (1.1), *ou parte dela, será diferenciada com relação a t para determinar y' como uma função contínua de y e t, isto é,* $y'(t) = G(t, y(t))$, *com* $G: K \to R^m$ (*observando-se também a EAD*).

Vamos agora definir singularidade de uma EAD

***Definição* 3.1.3** *Um ponto* $P_0 = (t_0, y_0)$ *é uma singularidade da EAD* (1.1) *se* $P_0 \in K$, $G(t_0, y_0) = 0$ *e* $F(P_0, z_0) = 0$, *ou* P_0 *está no bordo de K e* $F(P_0, z_0) = 0$, *para algum* $z_0 \in R^m$.

***Definição* 3.1.4** *A imagem de uma função* $c: J \to R^{2m+1}$ *é uma solução geral da EAD* (1.1) *se* $c \in C^1(J)$ *e satisfaz*

$$\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ Y_1(s)T'(s) - Y_0(s) = 0 \end{cases} \tag{3.1.2}$$

para todo $s \in J$ *onde* $c(s) = (T(s), Y_0(s), Y_1(s))$ *com* $T(s) \in R$, $Y_0(s) \in R^m$ *e* $Y_1(s) \in R^m$. *Se a função F em* (1.1) *não depende de y', isto é,* (1.1) *é uma equação puramente algébrica então* (3.1.2) *se reduz à* $F(c(s)) = 0$ *e* $c(s) = (T(s), Y_0(s))$.

Observe que se $\alpha: L \to J$ com $L \subset R$ é um difeormorfismo de classe C^1 e $c: J \to R^{2m+1}$ é de classe C^1 e satisfaz (3.1.2) (isto é, c(J) é uma solução geral de (1.1)), então $c \circ \alpha: L \to R^{2m+1}$ é também de classe C^1 e satisfaz (3.1.2) (isto é, $(c \circ \alpha)(L)$ é uma solução geral de (1.1)), mas o traço de c e $(c \circ \alpha)$ é o mesmo, isto é $c(J) = (c \circ \alpha)(L)$.

Os resultados apresentados a seguir, podem ser encontrtados em [Castelo/Tavares - 94] ou em [Pires -94].

***Teorema* 3.1.1** *Considere uma solução geral de* (1.1) *dada por* $c: J \to R^{2m+1}$. *Se* $T'(s) \neq 0$ *em um intervalo* $I \subset J$, *então* $Y_0(s) = y_0(T(s))$, $Y_1(s) = \dfrac{d}{dT} y_0(T(s))$ *em* I *e* y_0 *definida em* $T(I)$ *é uma solução clássica da EAD* (1.1).

O problema de valor inicial para a EAD (1.1) é definido como

$$\begin{cases} F(t, y(t), y'(t)) = 0 \\ y(t_0) = a_0 \\ y'(t_0) = a_1 \end{cases} \tag{3.1.3}$$

onde $F(t_0, a_0, a_1) = 0$.

Seja $w: \Omega \to R^{mx(2m+1)}$, onde Ω é um subconjunto aberto conexo de R^{2m+1}, definido por

$$w(T, Y_0, Y_1) = \begin{pmatrix} Y_1 & -I_m & 0 \end{pmatrix}_{mx(2m+1)} \text{ com } \begin{cases} Y_1 \in R^{mx1} \\ I_m \in R^{mxm} \\ 0 \in R^{mxm} \end{cases}.$$

Agora podemos reescrever (3.1.2) como

$$\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ w(c(s))c'(s) = 0 \end{cases} \tag{3.1.4}$$

pois, $w(c(s))c'(s) = \begin{pmatrix} Y_1(s) & -I_m & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} T'(s) & Y_0'(s) & Y_1'(s) \end{pmatrix}^t = Y_1(s)T'(s) - I_m Y_0'(s) + 0Y_1'(s)$

$= Y_1(s)T'(s) - Y_0'(s).$

Se F não depende de y', isto é, é um sistema puramente algébrico, definimos (3.1.4) como

$$F(c(s)) = 0.$$

O sistema (3.1.4) é chamado o sistema diferencial associado à EAD (1.1).

O problema de valor inicial para (3.1.4) é definido como

$$\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ w(c(s))c'(s) = 0 \\ c(0) = c_0 = (t_0, a_0, a_1) \end{cases} \tag{3.1.5}$$

com $F(c_0) = 0$.

Diferenciando a primeira equação de (3.1.5) com respeito a s e definindo

$$A(c(s)) = \begin{pmatrix} DF(c(s)) \\ w(c(s)) \end{pmatrix}_{2mx(2m+1)}$$

temos um novo problema de valor inicial

$$\begin{cases} A(c(s))c'(s) = 0 \\ c(0) = c_0 = (t_0, a_0, a_1) \end{cases} \tag{3.1.6}$$

Note que se (1.1) é do tipo F(t,y(t))=0 então A(c(s))=DF(c(s)).

***Definição* 3.1.5** *Um ponto* $c^0 = (t^0, a^0, a^1)$ *é dito ser uma singularidade do sistema diferencial* (3.1.4) *se* $F(c^0) = 0$ *e* $A(c^0)$ *não tem posto máximo.*

Vamos agora, ver um exemplo.

Exemplo 3.1.1 $\begin{cases} (y(t))^2 = t \\ y(t_0) = y_0 > 0,\ t_0 > 0,\ y_0^2 = t_0 \end{cases}$

Neste exemplo $G(t,y) = \dfrac{1}{2y}$, que é sempre não nula e definida para qualquer (t,y) tal que $y \neq 0$.

Esta EAD tem índice 1 sobre os conjuntos

$$K_1 = \{(t,y): 0 < t < \infty,\ 0 < y < \infty\}$$

e

$$K_2 = \{(t,y): 0 < t < \infty,\ -\infty < y < 0\}.$$

O ponto (0,0) é uma singularidade e a solução clássica é $y(t) = t^{\frac{1}{2}}$ para $t \in (0,\infty)$.

O sistema diferencial associado é

$$\begin{cases} Y_0^2(s) - T(s) = 0 \\ T(0) = t_0 \\ Y_0(0) = y_0 \end{cases}$$

que não tem nenhuma singularidade e a solução geral é dada por

$$c(s) = \left(\left(s + t_0^{\frac{1}{2}} \right)^2, \left(s + t_0^{\frac{1}{2}} \right) \right)$$

para $s \in R$, onde $c(0) = \left(t_0, t_0^{\frac{1}{2}} \right) = (t_0, y_0)$ é a condição inicial. Como $T'\left(-t_0^{\frac{1}{2}} \right) = 0$ e $c(0) = (t_0, y_0)$, usando o teorema 3.1.1 nós temos que c(s)=(t,y(t)) para $s > -t_0^{\frac{1}{2}}$ onde $T(s) = \left(s + t_0^{\frac{1}{2}} \right)^2$.

***Teorema* 3.1.2** *Se DF é Lipschitz em uma vizinhança aberta de c_0 e $A(c_0)$ tem posto máximo, então existe $r > 0$ tal que o problema de valor inicial* (3.1.5) *tem solução única em $B = \{u: \|u - c_0\| \le r\}$. A solução é única no sentido que o traço é único.*

***Corolário* 3.1.1** *Se DF é Lipschitz em uma vizinhança aberta de $c_0 = (t_0, a_0, a_1)$ e $A(t_0, a_0, a_1)$ tem posto máximo, então existe $r > 0$ tal que o problema de valor inicial* (3.1.3) *com $F(t_0, a_0, a_1) = 0$ tem uma única solução geral no conjunto*

$$B = \{(T, Y_0, Y_1): \|(T, Y_0, Y_1) - (t_0, a_0, a_1)\| \le r\}.$$

Se $F_{Y_1}(c_0)$ é não singular (isto é, a EAD tem índice 0) então $A(c_0)$ tem posto máximo, pois, sendo $c_0 = (t_0, a_0, a_1)$ então

$$A(c_0)=\begin{pmatrix} F_T(c_0) & F_{Y_0}(c_0) & F_{Y_1}(c_0) \\ a_1 & -I & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.1.7}$$

Agora se $F_{Y_1}(c_0)$ tem posto (m-1) (isto é, a EAD tem índice maior que 0), $A(c_0)$ pode ainda ter posto máximo pois o vetor $\begin{pmatrix} F_T(c_0) \\ a_1 \end{pmatrix}$ pode recuperar o posto de $A(c_0)$.

Se $F_{Y_1}(c_0)$ tem posto menor que (m-1), $A(c_0)$ não pode ter posto máximo. Usando mudanças de variáveis no domínio e na ordenação de F, podemos localmente escrever (1.1) na seguinte forma

$$\begin{cases} f(t,y(t),z(t),y'(t))=0 \\ g(t,y(t),z(t))=0 \end{cases} \tag{3.1.8}$$

onde $f:\Omega\to R^n$ e $g:\Omega\to R^p$ são funções suficientemente diferenciáveis definidas no conjunto aberto conexo $\Omega\subset R^{2n+p+1}$ e $n+p=m$.

Os resultados apresentados até o momento neste capítulo, devidamente adaptados, também são válidos para uma EAD na forma (3.1.8).

Note que se $f_{y'}(c_0)$ e $g_z(c_0)$ são não singulares, a EAD (3.1.8) tem índice 1 e $A(c_0)$ tem posto máximo, pois

$$A(c(s))=\begin{pmatrix} Df(c(s)) \\ Dg(c(s)) \\ w(c(s)) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f_T & f_{Y_0} & f_{Z_0} & f_{Y_1} \\ g_T & g_{Y_0} & g_{Z_0} & 0_{pxn} \\ Y_1 & -I_n & 0_{nxp} & 0_{nxn} \end{pmatrix}, \text{ e observe que} \begin{cases} f_{Y_0}=f_y \\ f_{Y_1}=f_{y'} \\ g_{Z_0}=g_z \end{cases}.$$

Mas, se $g_z(c_0)$ é singular a EAD (3.1.8) tem índice maior que 1 e $A(c_0)$ poderá ainda ter posto máximo, pois a primeira coluna poderá recuperar o seu posto. Para ilustrar este fato, consideremos o seguinte exemplo

$$\begin{cases} (y'(t))^2+(z(t))^2=1 \\ (y(t))^2+t^2=\dfrac{1}{4} \\ y'(0)=1 \\ y(0)=\dfrac{1}{2} \\ z(0)=0 \end{cases}$$

onde temos que $c_0 = \left(0, \frac{1}{2}, 0, 1\right)$ e $A(c_0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ tem posto máximo, e observe que $g_z(c_0) = 0$ é singular.

4 ALGORITMOS

Faremos agora, alguns comentários sobre a implementação numérica dos métodos BDF, e introduziremos uma nova classe numérica, desenvolvida com base na teoria apresentada no capítulo anterior, que em particular, resolve EAD com singularidades satisfatoriamente.

Lembramos que, se desejamos resolver numericamente um sistema do tipo

$$F(x) = 0$$

em vez de usarmos o método de Newton,

$$x^{k+1} = x^k - (DF(x^k))^{-1} F(x^k)$$

podemos usar o método de Newton modificado,

$$x^{k+1} = x^k - (DF(x^0))^{-1} F(x^k)$$

sem perda de convergência.

Os métodos BDF encontram uma aproximacão para a solução clássica y(t) da EAD (1.1). Dentre outros modos, usando o método de Euler implícito temos que

$$y'_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{h}$$

onde $h = t_n - t_{n-1}$. Assim obtemos o sistema

$$F\left(t_n, y_n, \frac{y_n - y_{n-1}}{h}\right) = 0$$

o qual, é resolvido para y_n, em cada passo, por exemplo, pelo método de Newton modificado. Isto nos dá

$$y_n^{k+1} = y_n^k - (A_n^0)^{-1} F\left(t_n^k, y_n^k, \frac{y_n^k - y_{n-1}}{h}\right)$$

onde

$$A_n^0 = F_y\left(t_n^0, y_n^0, \frac{y_n^0 - y_{n-1}}{h}\right) + \frac{1}{h} F_{y'}\left(t_n^0, y_n^0, \frac{y_n^0 - y_{n-1}}{h}\right).$$

Como é usual, não invertemos A_n^0, resolvemos o sistema

$$(A_n^0)S = -F\left(t_n^k, y_n^k, \frac{y_n^k - y_{n-1}}{h}\right)$$

onde $S = y_n^{k+1} - y_n^k$. Assim obtemos

$$\begin{cases} y_n^{k+1} = S + y_n^k \\ (y_n^{k+1})' = \dfrac{y_n^{k+1} - y_{n-1}}{h} \end{cases}.$$

O custo de um passo desta classe numérica (método BDF) é aproximadamente $(2m^3 + r_3m^2)$, onde r_3 é o número de iterações do método de Newton modificado.

Quanto a esta nova classe numérica, dada a EAD (1.1) os métodos numéricos usualmente utilizados (como o método BDF, por exemplo) encontram uma aproximação para a solução clássica y(t), o que faremos através desta nova classe de métodos é encontrar uma aproximação para a solução geral c(s) da EAD (1.1), utilizando um método PC (Previsor - Corretor).

Consideremos então o sistema diferencial (3.1.4) associado à EAD (1.1) e o PVI (3.1.5).

Pelo teorema 3.1.2 este PVI tem localmente uma única solução.

Por diferenciação obteve-se de (3.1.5) um outro PVI equivalente, dado por (3.1.6).

Na demonstração do teorema 3.1.2 (ver [Castelo/Tavares - 94] ou [Pires - 94]) mostra-se que este PVI é equivalente ao PVI para uma equação diferencial ordinária da forma

$$\begin{cases} c'(s) = \xi(A(c(s))) \\ c(0) = c_0 \end{cases} \qquad (4.1)$$

Resolvemos então, o PVI (4.1). Antes porém, necessitamos encontrar o vetor $\xi(A)$, que pode ser obtido da seguinte maneira.

Suponhamos que a decomposição QR de A^t

$$A^t = Q\begin{pmatrix} R \\ 0^t \end{pmatrix}$$

é dada onde Q é uma matriz (2m+1)x(2m+1) ortogonal, isto é $Q^tQ = I$ e R é uma matriz triangular superior (2m)x(2m), não singular, isto é $R_{ij} = 0$ para $i > j$ e $R_{ii} \neq 0$. Assim se z denota a última coluna de Q então

$$Az = \begin{pmatrix} R^t & 0 \end{pmatrix} Q^t z = \begin{pmatrix} R^t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

pois as colunas de Q são ortonormais. Ainda nos resta encontrar o sinal de z tal que $\det\begin{pmatrix} A \\ z^t \end{pmatrix} > 0$. Note que

$$\begin{pmatrix} A^t & z \end{pmatrix} = Q \begin{bmatrix} R & 0 \\ 0^t & 1 \end{bmatrix}$$

implica que

$$\det\begin{pmatrix} A \\ z^t \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} A^t & z \end{pmatrix} = \det Q \det R.$$

Assim, $\xi(A) = \pm z$, concordando com o sinal de detQdetR, se é positivo ou negativo.

Observação: detR é o produto dos elementos diagonais de R, e seu sinal é facilmente determinado. O sinal de detQ também é facilmente obtido, pois sabemos que como Q é ortogonal, então $\det Q = \pm 1$. Por exemplo, se rotações de Givens são usadas para obter a decomposição QR de A^t então $\det Q = 1$; ou, se usamos reflexões de Householder, cada reflexão muda o sinal, e então o sinal do detQ é igual a $(-1)^p$ onde p é o número de reflexões que são envolvidas na fatoração de A^t pelo método de Householder. Em ambos os casos não existe qualquer custo computacional adicional.

Como $A(c(s)) \in R^{(2m)x(2m+1)}$ o custo do processo acima para determinar $\xi(A)$ é aproximadamente $16m^3$ para cada passo. No entanto, este cálculo pode ter o custo minimizado, pois, sendo c(s)=(T(s),Y(s),Z(s)) temos que o PVI (3.1.6) se torna

$$\begin{cases} F_T T' + F_Y Y' + F_Z Z' = 0 \\ ZT' - Y' = 0 \end{cases}$$

e assim c'(s) pode ser obtido resolvendo o sistema

$$(F_T + F_Y Z)T' + F_Z Z' = \begin{pmatrix} F_T + F_Y Z & F_Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T' \\ Z' \end{pmatrix} = 0$$

analogamente como fizemos acima para calcular $\xi(A)$, e fazendo $Y' = ZT'$. Assim,

$$\xi(A) = \pm \frac{c'(s)}{\|c'(s)\|}.$$

Ainda mais, o sinal de $\xi(A)$ pode ser escolhido arbitrariamente, uma vez que a integração numérica é feita em ambas as direções da condição inicial. Observe ainda que, como a matriz

$$(F_T + F_Y Z \quad F_Z)$$

a ser decomposta na forma QR (entre outras maneiras) na resolução do sistema acima tem dimensão mx(m+1) o custo de tal decomposição é aproximadamente $2m^3$, que agora é o custo aproximado do cálculo de $\xi(A)$.

Assim, o cálculo de $\xi(A)$ está facilmente resolvido e assim podemos resolver numericamente o PVI (4.1), por exemplo, utilizando o método de Euler explícito

$$\frac{c_n - c_{n-1}}{h} = \xi(A(c_{n-1}))$$

ou seja,

$$c_n = c_{n-1} + h\xi(A(c_{n-1}))$$

que é o passo preditor.

O passo corretor é feito levando-se em conta o sistema diferencial (3.1.4), utilizando, por exemplo, o método de Euler implícito, isto é

$$\begin{cases} F(c_n) = 0 \\ w(c_n)(c_n - c_{n-1}) = 0 \end{cases}$$

ou seja

$$\begin{cases} F(T_n, Y_n, Z_n) = 0 \\ Z_n(T_n - T_{n-1}) - (Y_n - Y_{n-1}) = 0 \end{cases}$$

que pode ser resolvido, por exemplo, pelo método de Newton modificado. Isto nos dá

$$c_n^{k+1} = c_n^k - (DB_n^0)^+ B_n^k$$

onde $B_n^k = \begin{bmatrix} F(c_n^k) \\ w(c_n^k)(c_n^k - c_{n-1}) \end{bmatrix}$, $DB_n^0 = \begin{bmatrix} \overset{o}{F_T^n} & \overset{o}{F_Y^n} & \overset{0}{F_Z^n} \\ Z_n^0 & -I & T_n^0 - T_{n-1} \end{bmatrix}$, com $\overset{0}{F_\theta^n} = F_\theta(T_n^0, Y_n^0, Z_n^0)$

para $\theta = T, Y, Z$.

Portanto, temos que calcular a inversa de Moore-Penrose de DB_n^0, denotada por $(DB_n^0)^+$, e para isto devemos ter DB_n^0 com posto máximo, o que é garantido pelo resultado a seguir.

Temos que

$$DB_n^0 = A_n^0 - E_n^0 = \begin{bmatrix} F_T^0 & F_Y^0 & F_Z^0 \\ Z_n^0 & -I & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T_{n-1} - T_n^0 \end{bmatrix}$$

onde $A_n^0 = A(c_n^0)$ tem posto máximo, e podemos exigir também que $\|(A_n^0)^+\|\|E_n^0\| < 1$ para h suficientemente pequeno. Então DB_n^0 tem posto máximo e

$$\|DB_n^0\| \le \frac{\|(A_n^0)^+\|}{1 - \|(A_n^0)^+\|\|E_n^0\|}$$

cuja demostração pode ser encontrada em [Allgower/Georg - 90].

Assim, supondo que a decomposição QR de $(DB_n^0)^t$

$$(DB_n^0)^t = Q\begin{pmatrix} R \\ 0^t \end{pmatrix}$$

é dada, temos que $DB_n^0 = \begin{pmatrix} R^t & 0 \end{pmatrix} Q^t$, e como sabemos que

$$(DB_n^0)^+ = (DB_n^0)^t \left(DB_n^0 (DB_n^0)^t\right)^{-1}$$

segue que

$$(DB_n^0)^+ = Q\begin{pmatrix} R \\ 0^t \end{pmatrix}\left[\begin{pmatrix} R^t & 0 \end{pmatrix} Q^t Q \begin{pmatrix} R \\ 0^t \end{pmatrix}\right]^{-1} = Q\begin{pmatrix} R \\ 0^t \end{pmatrix}\left[R^t R\right]^{-1} = Q\begin{pmatrix} R \\ 0^t \end{pmatrix} R^{-1}(R^t)^{-1} = Q\begin{pmatrix} (R^t)^{-1} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Logicamente, nós não inverteremos R^t, calcularemos $\theta = Q(DB_n^0)^+ B_n^k$ resolvendo $R^t \vartheta = B_n^k$, e assim, $\theta = Q\begin{pmatrix} \vartheta \\ 0 \end{pmatrix}$.

Assim, temos que o custo de resolução pelo método de Newton modificado do sistema

$$\begin{cases} F(T_n, Y_n, Z_n) = 0 \\ Z_n(T_n - T_{n-1}) - (Y_n - Y_{n-1}) = 0 \end{cases} \tag{4.2}$$

é aproximadamente $(16m^3 + 4r_1m^2)$, onde r_1 é o número de iterações do método de Newton modificado. No entanto, este custo também pode ser minimizado, pois da segunda equação do sistema (4.2) temos

$$Y_n = Y_{n-1} + Z_n(T_n - T_{n-1})$$

e assim, substituindo isto na primeira equação, obtemos o sistema equivalente,

$$H(T_n, Z_n) = F(T_n, Y_{n-1} + Z_n(T_n - T_{n-1}), Z_n) = 0$$

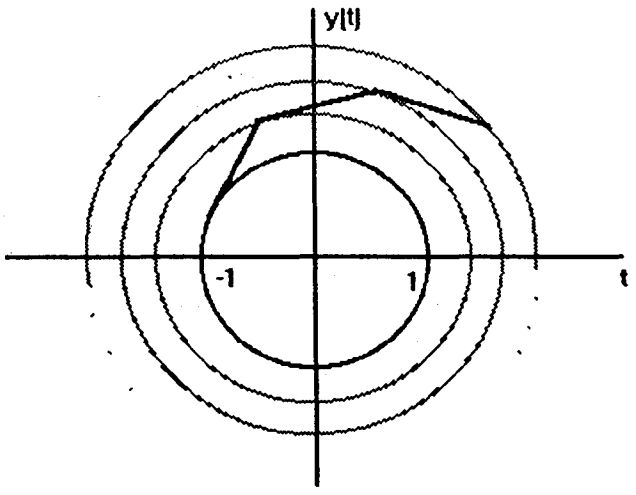
que resolveremos pelo método de Newton modificado.

Para este sistema a matriz a ser decomposta na forma QR é

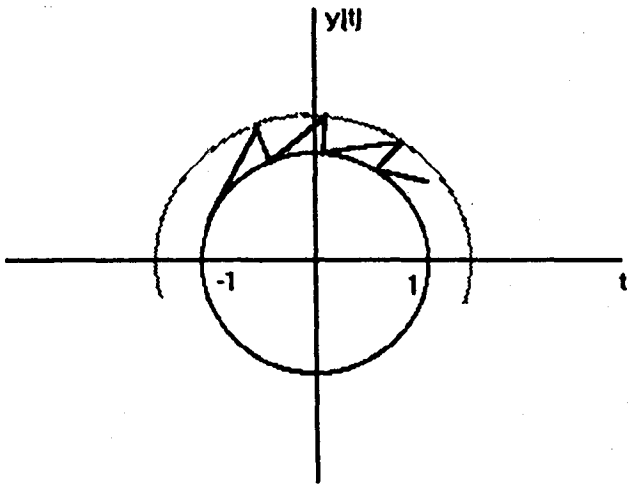
$$DH(T_n^0, Z_n^0) = \begin{pmatrix} F_T + F_Y Z_n^0 & F_Y(T_n^0 - T_{n-1}) + F_2 \end{pmatrix} \in R^{mx(m+1)}.$$

Assim, o custo é aproximadamente $(2m^3 + r_2m^2)$, onde r_2 é o número de iterações do método de Newton modificado para este sistema.

Gostariamos de ressaltar que o passo corretor é essêncial, uma vez que se resolvermos somente o PVI (4.1), ou seja, realizarmos somente o passo preditor, encontraremos uma solução geral c(s), porém poderemos ter problemas de estabilidade, como mostram as ilustrações abaixo, onde a EAD é dada por $(y(t))^2 + t^2 = 1$:



usando somente o passo preditor



usando o par preditor - corretor

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

5.1 Introdução

Nesta seção, apresentaremos alguns resultados numéricos obtidos pelas duas classes de métodos numéricos estudadas nas seções anteriores. Ressaltamos que ambos os programas utilizados, respectivamente para a primeira classe numérica (métodos BDF) e, para a segunda classe numérica, utilizam dois métodos bastante conhecidos e simples, o método de Euler e o método de Newton modificado para resolução de sistemas.

Para as duas classes numéricas os programas utilizam as mesmas estratégias de controle de passo, tanto no método de Euler, quanto no método de Newton modificado.

5.2 Exemplos numéricos

Observação: Os valores expressos nas colunas erro(w) e erro(w') são aproximações para o erro cometido no cálculo de w(t) e w'(t) respectivamente, para w = y, z, nos pontos em que a solução clássica está bem definida. Em negrito destacamos a condição inicial. Além dos apresentados a seguir, outros exemplos que não constam neste trabalho, foram analisados.

Exemplo 5.2.1
$$\begin{cases} (y'(t))^2 = t \\ y(1) = 0.33333 \\ y'(1) = 1 \end{cases}.$$

Este exemplo é uma EAD de índice 0, onde t = 0 é uma singularidade somente para F(t,y,y') = 0.

Solução obtida pela primeira classe numérica:

t	y(t)	erro(y)	y'(t)	erro(y')
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
-0.0088291	-0.3297755		-0.1792389	
-0.0088246	-0.3297763		0.0231341	
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
-0.0074655	-0.3297537		-2.2782609	
-0.0074652	-0.3297543		-4.5581599	
-0.0074651	-0.3297549		-9.1171387	
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
-0.0001941	-0.3297608		-0.0059080	
-0.0001220	-0.3297612		0.0146152	
-0.0000860	-0.3297607		0.0329190	
-0.0000680	-0.3297601		-0.0012909	
0.0000761	-0.3297603	10^{-3}	0.0105030	10^{-3}
0.0005927	-0.3297548	10^{-3}	0.0246592	10^{-4}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.6050000	-0.0185236	10^{-3}	0.7778588	10^{-5}
0.6150000	-0.0107450	10^{-3}	0.7842600	10^{-5}
0.6250000	-0.0029024	10^{-3}	0.7906094	10^{-5}
0.6350000	0.0050036	10^{-4}	0.7969082	10^{-5}
0.6450000	0.0129726	10^{-4}	0.8031577	10^{-5}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.9850000	0.3184175	10^{-5}	0.9924969	10^{-5}
0.9950000	0.3283424	10^{-6}	0.9975031	10^{-6}
1.0000000	**0.3333300**	**0**	**1.0000000**	**0**
1.0050000	0.3383425	10^{-6}	1.0025031	10^{-6}
1.0150000	0.3484174	10^{-5}	1.0074968	10^{-5}
1.0250000	0.3585419	10^{-5}	1.0124472	10^{-5}
1.0350000	0.3687156	10^{-5}	1.0173736	10^{-5}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

5.7249999	8.8057893	10^{-3}	2.3927015	10^{-6}
5.7349999	8.8297372	10^{-3}	2.3947903	10^{-6}
5.7449999	8.8537060	10^{-3}	2.3968773	10^{-6}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

Solução obtida pela segunda classe numérica:

t	y(t)	erro(y)	y'(t)	erro(y')
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.1271359	-0.3657196		-0.3565613	
0.1214881	-0.3637510		-0.3485514	
0.1159193	-0.3618550		-0.3404692	
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.0092695	-0.3366173		-0.0962785	
0.0074735	-0.3364620		-0.0864496	
0.0058656	-0.3363388		-0.0765878	
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.0007241	-0.3360787		-0.0269102	
0.0002865	-0.3360713		-0.0169273	
0.0000481	-0.3360966		-0.0069376	
0.0000093	-0.3360697	10^{-3}	0.0030547	10^{-14}
0.0001701	-0.3360676	10^{-3}	0.0130460	10^{-15}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.6054257	-0.0200448	10^{-4}	0.7780910	10^{-12}
0.6124562	-0.0145428	10^{-4}	0.7825958	10^{-12}
0.6194826	-0.0090125	10^{-4}	0.7870721	10^{-12}
0.6265048	-0.0034543	10^{-4}	0.7915205	10^{-12}
0.6335226	0.0021313	10^{-4}	0.7959413	10^{-12}
0.6405358	0.0077443	10^{-4}	0.8003348	10^{-12}
0.6475443	0.0133840	10^{-4}	0.8047014	10^{-12}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

0.9833214	0.3166960	10^{-5}	0.9916256	10^{-13}
0.9899978	0.3233390	10^{-5}	0.9949863	10^{-13}
0.9966669	0.3299969	10^{-6}	0.9983320	10^{-15}
1.0000000	**0.3333300**	**0**	**1.0000000**	**0**
1.0033336	0.3366636	10^{-6}	1.0016654	10^{-15}
1.0099977	0.3433388	10^{-5}	1.0049864	10^{-13}
1.0166544	0.3500287	10^{-5}	1.0082928	10^{-13}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
5.7210617	8.7858140	10^{-3}	2.3918741	10^{-15}
5.7249065	8.7950103	10^{-3}	2.3926776	10^{-15}
5.7287502	8.8042071	10^{-3}	2.3934800	10^{-15}
5.7325929	8,8134044	10^{-3}	2.3942833	10^{-15}
5.7364344	8.8226021	10^{-3}	2.3950854	10^{-15}
5.7402749	8.8318004	10^{-3}	2.3958870	10^{-15}
5.7441143	8.8409992	10^{-3}	2.3966882	10^{-15}
5.7479526	8.8501984	10^{-3}	2.3974882	10^{-15}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

Exemplo 5.2.2 $\begin{cases} (y'(t))^2 = y(t) \\ y(1) = 4 \\ y'(1) = 2 \end{cases}$

Este exemplo é uma EAD de índice 0, onde $y = 0$ é uma singularidade para $F(t,y,y') = 0$ e para o sistema diferencial associado $\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ w(c(s))c'(s) = 0 \end{cases}$.

Solução obtida pela primeira classe numérica:

t	y(t)	erro(y)	y'(t)	erro(y')
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
-7.4245777	4.9033808		-2.2143691	
-7.4145777	4.8812371		-2.2093634	
-7.4045777	4.8591434		-2.2043578	
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

-3.0212499	0.0000051		-0.0033127	
-3.0199999	0.0000010		-0.0002737	
-3.0174999	0.0000003		-0.0002737	
-3.0162499	0.0000000	10^{-5}	0.0007237	10^{-3}
-3.0149999	0.0000008	10^{-5}	0.0007237	10^{-3}
-3.0137499	0.0000017	10^{-5}	0.0011899	10^{-3}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
-2.9749999	0.0003840	10^{-4}	0.0196806	10^{-3}
-2.9724999	0.0004332	10^{-4}	0.0208929	10^{-3}
-2.9699999	0.0004854	10^{-4}	0.0221074	10^{-3}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.9850000	3.9700872	10^{-5}	1.9925203	10^{-4}
0.9950000	3.9900124	10^{-6}	1.9975046	10^{-5}
1.0000000	**4.0000000**	**0**	**2.0000000**	**0**
1.0050000	4.0100125	10^{-6}	2.0025046	10^{-6}
1.0150000	4.0300877	10^{-5}	2.0075202	10^{-5}
1.0250000	4.0502129	10^{-5}	2.0125264	10^{-5}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
4.2749999	13.2423241	10^{-2}	3.6390072	10^{-3}
4.2849999	13.2787642	10^{-2}	3.6440107	10^{-3}
4.2949999	13.3152544	10^{-2}	3.6490141	10^{-3}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
10.9749999	48.8689900	10^{-2}	6.9906394	10^{-3}
10.9849999	48.9389946	10^{-2}	6.9956412	10^{-3}
10.9949999	49.0089528	10^{-2}	7.0006430	10^{-3}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

Solução obtida pela segunda classe numérica:

t	y(t)	erro(y)	y'(t)	erro(y')
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
-2.9733704	0.0000000	10^{-4}	0.0002655	10^{-2}
-2.9728985	0.0000003	10^{-4}	0.0005908	10^{-2}
-2.9721923	0.0000010	10^{-4}	0.0010417	10^{-2}
-2.9695582	0.0000089	10^{-4}	0.0029954	10^{-2}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
0.9847087	3.9694604	10^{-5}	1.9923504	10^{-6}
0.9890820	3.9781832	10^{-5}	1.9945383	10^{-6}
0.9934517	3.9869083	10^{-6}	1.9967244	10^{-6}
0.9978178	3.9956356	10^{-6}	1.9989086	10^{-7}
1.0000000	**4.0000000**	**0**	**2.0000000**	**0**
1.0021822	4.0043644	10^{-6}	2.0010908	10^{-7}
1.0065448	4.0130944	10^{-6}	2.0032709	10^{-6}
1.0109038	4.0218268	10^{-5}	2.0054492	10^{-6}
1.0152593	4.0305613	10^{-5}	2.0076258	10^{-6}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	
4.2830082	13.2567929	10^{-3}	3.6409879	10^{-4}
4.2856338	13.2663524	10^{-3}	3.6423004	10^{-4}
4.2882584	13.2759122	10^{-3}	3.6436125	10^{-4}
.	.		.	
.	.		.	
.	.		.	

Exemplo 5.2.3
$$\begin{cases} t^2 + (y'(t))^2 = 0.25 \\ (y(t))^2 + (z(t))^2 = 1 \\ y(0) = 0 \\ z(0) = 1 \\ y'(0) = 0.5 \end{cases}$$

Este exemplo é uma EAD de índice 1, onde $t = \pm 0.5$ são singularidades para $F(t,y,y') = 0$ e para o sistema diferencial associado $\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ w(c(s))c'(s) = 0 \end{cases}$

Solução obtida pela primeira classe numérica:

t	y(t)	z(t)	erro(y,z)	y'(t)	erro(y')
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
-0.5031928	-0.1962009	0.9805639		-0.0478155	
-0.5031831	-0.1962014	0.9805642		0.0461442	
-0.5031635	-0.1962005	0.9805635		-0.0467676	
-0.5031538	-0.1962010	0.9805634		0.0264499	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
-0.5001953	-0.1961966	0.9805647		-0.0067991	
-0.5001171	-0.1961971	0.9805647		0.0141303	
-0.5000781	-0.1961966	0.9805645		-0.0036703	
-0.4999218	-0.1961971	0.9805643	10^{-4}	0.0094230	10^{-4}
-0.4998437	-.01961964	0.9805652	10^{-4}	0.0126897	10^{-4}
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
-0.0150000	-0.0074976	0.9999718	10^{-6}	0.4997750	10^{-8}
-0.0050000	-0.0024998	0.9999968	10^{-8}	0.4999750	10^{-10}
0.0000000	**0.0000000**	**1.0000000**	**0**	**0.5000000**	**0**
0.0050000	0.0024998	0.9999968	10^{-8}	0.4999750	10^{-10}
0.0150000	0.0074976	0.9999718	10^{-6}	0.4997750	10^{-8}
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
0.4997917	0.1961893	0.9805645	10^{-4}	0.0154607	10^{-3}
0.5000357	0.1961899	0.9805662		0.0022688	
0.5000686	0.1961894	0.9805657		-0.0140039	
0.5001345	0.1961893	0.9805663		-0.0021957	
0.5001511	0.1961898	0.9805661		0.0333085	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
0.5036211	0.1961746	0.9805687		0.0109145	
0.5036252	0.1961739	0.9805688		-0.1612201	
0.5036334	0.1961736	0.9805689		-0.0430939	
0.5036449	0.1961747	0.9805689		0.0685680	
0.5036829	0.1961740	0.9805682		-0.0200322	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	

Solução obtida pela segunda classe numérica:

t	y(t)	z(t)	erro(y,z)	y'(t)	erro(y')
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
0.4997237	-0.5902034	0.8072545		0.0166187	
0.4999560	-0.5902019	0.8072556		0.0066288	
0.4999886	-0.5902020	0.8072555		-0.0033635	
0.4998216	-0.5901998	0.8072571		-0.0133546	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
-0.4998279	-0.1975389	0.9802950		-0.0131137	
-0.4999902	-0.1975384	0.9802951		-0.0031225	
-0.4999528	-0.1975382	0.9802951	10^{-3}	0.0068698	10^{-12}
-0.4997156	-0.1975342	0.9802959	10^{-3}	0.0168595	10^{-13}
-0.4992789	-0.1975224	0.9802983	10^{-3}	0.0268424	10^{-13}
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
-0.0223348	-0.0111725	0.9999375	10^{-6}	0.4995002	10^{-14}
-0.0134128	-0.0067062	0.9999775	10^{-7}	0.4998200	10^{-15}
-0.0044719	-0.0022359	0.9999975	10^{-8}	0.4999800	10^{-14}
0.0000000	**0.0000000**	**1.0000000**	**0**	**0.5000000**	**0**
0.0044719	0.0022359	0.9999975	10^{-8}	0.4999800	10^{-14}
0.0134128	0.0067062	0.9999775	10^{-7}	0.4998200	10^{-15}
0.0223487	0.0111725	0.9999375	10^{-6}	0.4995002	10^{-14}
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
0.4992789	0.1975224	0.9802983	10^{-3}	0.0268424	10^{-13}
0.4997156	0.1975342	0.9802959	10^{-3}	0.0168859	10^{-13}
0.4999528	0.1975382	0.9802951	10^{-3}	0.0068698	10^{-12}
0.4999902	0.1975384	0.9802951		-0.0031225	
0.4998279	0.1975389	0.9802950		-0.0131137	
0.4994661	0.1975437	0.9802940		-0.0230997	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
-0.4998216	0.5901998	0.8072571		-0.0133546	
-0.4999886	0.5902020	0.8072555		-0.0033635	
-0.4999560	0.5902019	0.8072556		0.0066288	
-0.4997237	0.5902034	0.8072545		0.0166187	
.	.	.		.	
.	.	.		.	
.	.	.		.	

-0.0137710	0.7784871	0.6276605	0.4998103
-0.0059637	0.7823893	0.6227895	0.4999644
0.0018195	0.7862807	0.6178693	0.4999966
0.0095778	0.7901598	0.6129007	0.4999082
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.

6 CONCLUSÃO

Nesta seção concluiremos nosso trabalho, apresentando uma breve comparação entre as duas classes numéricas estudadas.

Vimos que o custo de um passo da primeira classe numérica (os métodos BDF) é aproximadamente $(2m^3 + r_3m^2)$, onde r_3 é o número de iterações do método de Newton modificado, enquanto que o custo de um passo da segunda classe numérica é aproximadamente $(4m^3 + r_2m^2)$, onde r_2 é o número de iterações do método de Newton modificado. Portanto o custo da segunda classe numérica é, aproximadamente, 2 vezes maior que o custo da primeira classe numérica, e lembramos que m é a dimensão de F.

De um modo geral, observando os exemplos apresentados na seção 5.2 vemos que os erros cometidos na avaliação de y(t) e de y'(t) principalmente, pela segunda classe numérica, são inferiores aos cometidos pela primeira classe numérica.

Destacamos, também, outro ponto de grande importância, que se refere às EAD que apresentam singularidades somente para F(t,y,y') = 0. Neste caso, a segunda classe numérica apresenta um melhor desempenho, pois enquanto que a primeira classe numérica nas vizinhanças de tais pontos apresenta problemas, estes mesmos pontos não constituem singularidades para o sistema diferencial associado à EAD F(t,y,y') = 0,

$$\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ w(c(s))c'(s) = 0 \end{cases}$$

que é resolvido pela segunda classe numérica.

Outro problema que ocorre com a primeira classe numérica, dependendo dos parâmetros de implementação, é que ela pode avaliar a solução em pontos onde esta não faz sentido (isto pode ser visto claramente no exemplo 5.2.1).

Do ponto de vista de convergência, temos que ambas as classes são convergentes, porém, espera-se que em um futuro não distante prove-se que a convergência da segunda classe numérica é melhor, quando comparada com a convergência da primeira classe.

Concluiremos nosso trabalho lembrando que em regiões singulares para o sistema diferencial

$$\begin{cases} F(c(s)) = 0 \\ w(c(s))c'(s) = 0 \end{cases}$$

ambas as classes numéricas apresentam problemas, pois tais singularidades implicam em singularidades para a EAD $F(t,y,y') = 0$.

7 BIBLIOGRAFIA

[Allgower/Georg - 90] - Allgower E. L. & Georg K., *Numerical Continuation Methods - An Introduction* - Springer - Verlag - 1990.

[Brenan/Campbell/Petzold - 89] - Brenan K. E. & Campbell S. L. & Petzold L. R., *Numerical Solution of Initial - Value Problems in Differential - Algebraic Equations* - North - Holland - 1989.

[Castelo/Tavares - 94] - Castelo Filho A. & Tavares G., *Differential - Algebraic Equations with Singularities* - 1994 (a publicar).

[Gear - 71] - Gear C. W., *The Simultaneous Numerical Solution of Differential - Algebraic Equations*, IEEE Trans. Circuit Theory, CT - 18 (1971), 89 - 95.

[Gear/Petzold - 83] - Gear C. W. & Petzold L. R., *Differential Algebraic Systems and Matrix Pencils* in Matrix Pencils, edited by B. Kagstrom and A. Ruhe, Lecture Notes in Mathematics 973, Springer - Verlag (1983), 75 - 89.

[Lambert - 73] - Lambert J. D., *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, Wiley, 1973.

[Pires - 93] - Pires A. A., *Métodos Numéricos para a Solução de Equações Algébrico - Differenciais*, Exame Geral de Qualificação, Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos da Universidade de São Paulo, São Carlos, 1993.

[Pires - 94] - Pires A. A., *Métodos Numéricos para a Solução de Equações Algébrico - Differenciais*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos da Universidade de São Paulo, São Carlos, 1994.