

Computação Científica II

Métodos numéricos para resolver equações diferenciais

2020-PLE

Métodos numéricos

- Áte agoram, estudamos 4 métodos para resolver EDOs.

Euler avançado

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n)$$

Euler atrasado

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_{n+1}, u_{n+1})$$

Crank-Nicolson

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})$$

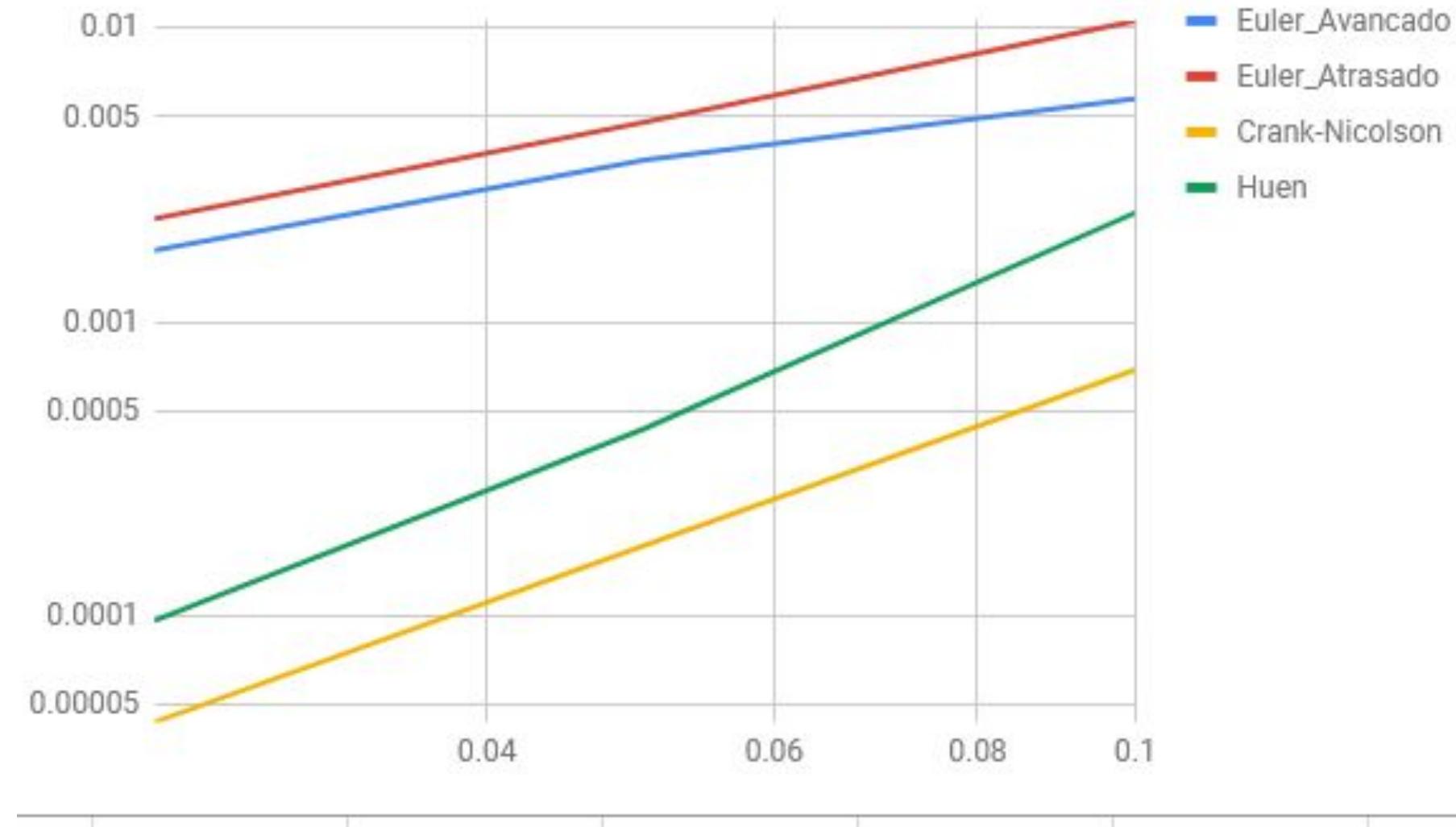
Huen

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}(f_n + f(t_{n+1}, u_n + hf_n))$$

- Euler avançado e Huen são métodos explícitos.
- Euler atrasado e Crank-Nicolson são implícitos.

Ordem dos métodos numéricos

- Os métodos de Euler avançado e atrasado são primeiras ordens.
- Mas os métodos de Crank-Nicolson e Huen são segundas ordens.



Ordem de método numérico

- Como vimos, o erro global é definido como

$$e_k = u(t_k) - u_k$$

- É chamado global, porque mostra o total de erros acumulados durante k passos.
 - Podemos localizar o erro
- $$l(t_k, h) = \textcolor{red}{u}(t_k) - [\textcolor{red}{u}(t_{k-1}) + h \cdot f(t_{k-1}, \textcolor{red}{u}(t_{k-1}))]$$
- Aqui embora usemos o método de Euler avançado, mas a solução exata também é substituída.

Ordem de método numérico

- Podemos localizar o erro

$$l(t_k, h) = \mathbf{u}(t_k) - [\mathbf{u}(t_{k-1}) + h \cdot f(t_{k-1}, \mathbf{u}(t_{k-1}))]$$

- Lembre-se que usamos a expansão de Taylor para derivar o método de Euler. Portanto, o erro de truncamento da expansão será igual ao erro local.

$$l(t_k, h) = \frac{h^2}{2} \frac{d^2 u}{dt^2}(\tau_k), \quad t_{k-1} < \tau_k < t_k$$

Ordem de método numérico

- Podemos localizar o erro

$$l(t_k, h) = \mathbf{u}(t_k) - [\mathbf{u}(t_{k-1}) + h \cdot f(t_{k-1}, \mathbf{u}(t_{k-1}))]$$

- O método de Euler avançado é

$$-u_k + u_{k-1} + h \cdot f(t_{k-1}, u_{k-1})$$

- Vamos adicionar essas equações juntas

$$[u(t_k) - u_k] - [u(t_{k-1}) - u_{k-1}] + h[f(t_{k-1}, u_{k-1}) - f(t_{k-1}, \mathbf{u}(t_{k-1}))] = \dots$$

$$e_k = e_{k-1} - h[f(t_{k-1}, u_{k-1}) - f(t_{k-1}, \mathbf{u}(t_{k-1}))] + l(t_k, h)$$

Ordem de método numérico

- $e_k = e_{k-1} - h[f(t_{k-1}, u_{k-1}) - f(t_{k-1}, \textcolor{red}{u}(t_{k-1}))] + l(t_k, h)$
- Se usamos a expansão de Taylor para f , teremos

$$\begin{aligned} & f(t_{k-1}, \textcolor{red}{u}(t_{k-1})) \\ &= f(t_{k-1}, u_{k-1}) + h \frac{\partial f}{\partial u} (t_{k-1}, u^*) \cdot (u(t_{k-1}) - u_{k-1}) \end{aligned}$$

- Então

$$e_k = e_{k-1} + h \frac{\partial f}{\partial u} (t_{k-1}, u^*) e_{k-1} + l(t_k, h)$$

Ordem de método numérico

- $$e_k = e_{k-1} + h \frac{\partial f}{\partial u} (t_{k-1}, u^*) e_{k-1} + l(t_k, h)$$

- Podemos escrever

$$e_k = e_{k-1} + h \frac{\partial f}{\partial u} (t_{k-1}, u^*) e_{k-1} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 u}{dt^2} (\tau_k)$$

- Agora, se $\frac{\partial f}{\partial u} = 0$, então teremos

$$e_k = e_{k-1} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 u}{dt^2} (\tau_k)$$

- Isso significa que, para este caso especial, o erro global é a soma dos erros locais.

Ordem de método numérico

- $$e_k = e_{k-1} + h \frac{\partial f}{\partial u} (t_{k-1}, u^*) e_{k-1} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 u}{dt^2} (\tau_k)$$
- Se não, vamos supor que $\frac{\partial f}{\partial u} \leq \mu$ na vizinhança da solução, então teremos
$$e_k \leq (1 + h\mu)e_{k-1} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 u}{dt^2} (\tau_k)$$
- Agora, se assumirmos que $h\mu > -1$ e $\max_{1 \leq k \leq n} \left| \frac{d^2 u}{dt^2} (\tau_k) \right| \leq M$, teremos
$$|e_k| \leq (1 + h\mu)|e_{k-1}| + \frac{h^2}{2} M$$

Ordem de método numérico

- $|e_k| \leq (1 + h\mu)|e_{k-1}| + \frac{h^2}{2}M$

- Agora suponha que $e_0 = 0$. temos

$$|e_1| \leq \frac{h^2}{2}M$$

$$|e_2| \leq (1 + h\mu)|e_1| + \frac{h^2}{2}M \leq \frac{h^2}{2}M(1 + h\mu + 1)$$

- Se fizermos isso recursivamente, teremos

$$|e_n| \leq \frac{h^2}{2}M \frac{e^{t_k\mu} - 1}{h\mu} = \mathcal{O}(h)$$

Exercício (recursivamente)

Ordem de método numérico

- Se fizermos isso recursivamente, teremos

$$|e_n| \leq \frac{h^2}{2} M \frac{e^{t_k \mu} - 1}{h \mu} = \mathcal{O}(h)$$

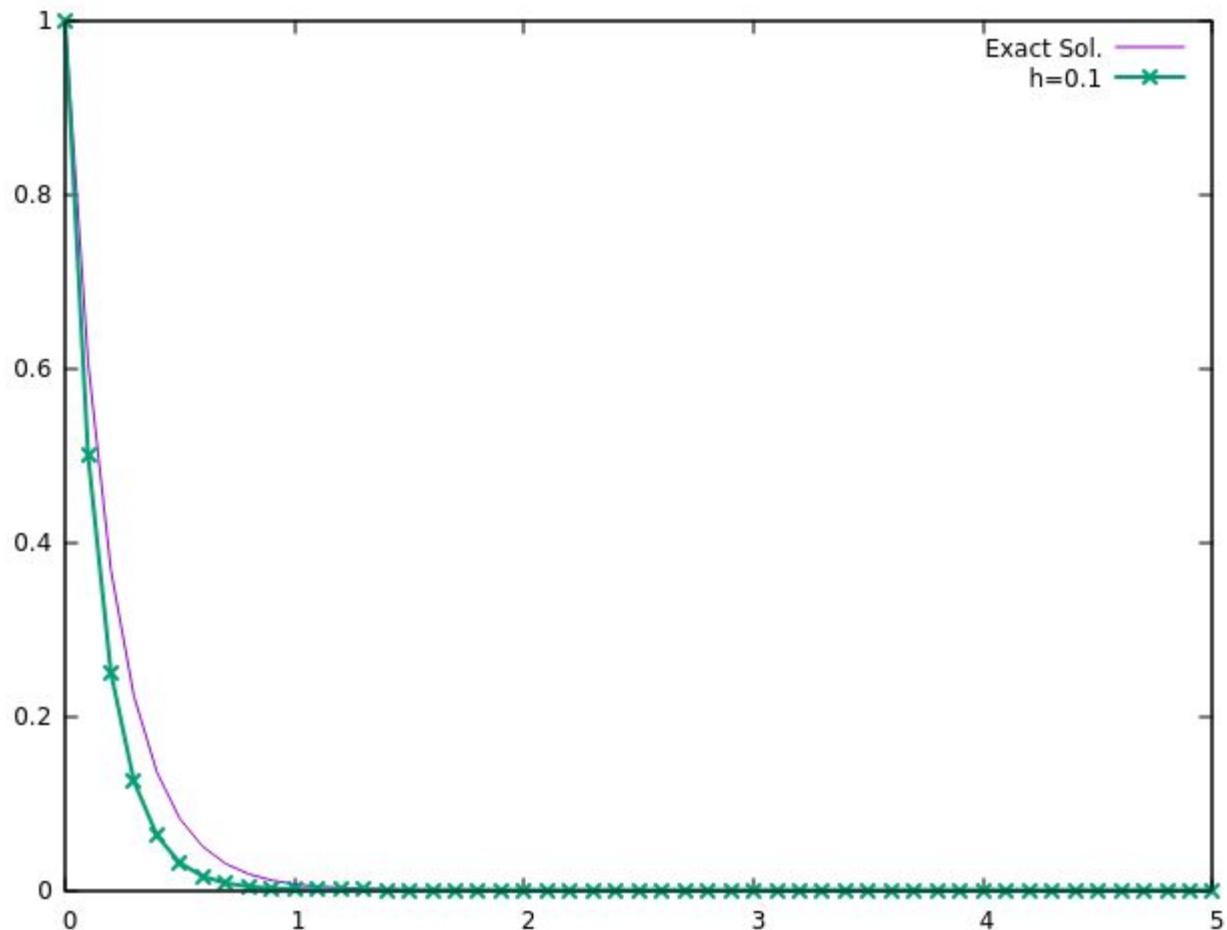
- Portanto, o erro global do método de Euler avançado é perimeira ordem.
- Atenção que o erro local é uma ordem maior que o erro global.
- isso é verdade para a maioria dos métodos de diferenças finitas.

Estabilidade de um método numérico

- Vamos rever nosso exemplo anterior.

$$\frac{du}{dt} = -5u \quad u(0) = 1$$

- Aqui temos a solução numérica com $h = 0.1$.
- Vimos que aumentando o tamanho de passo, a solução numérica se torna instável.

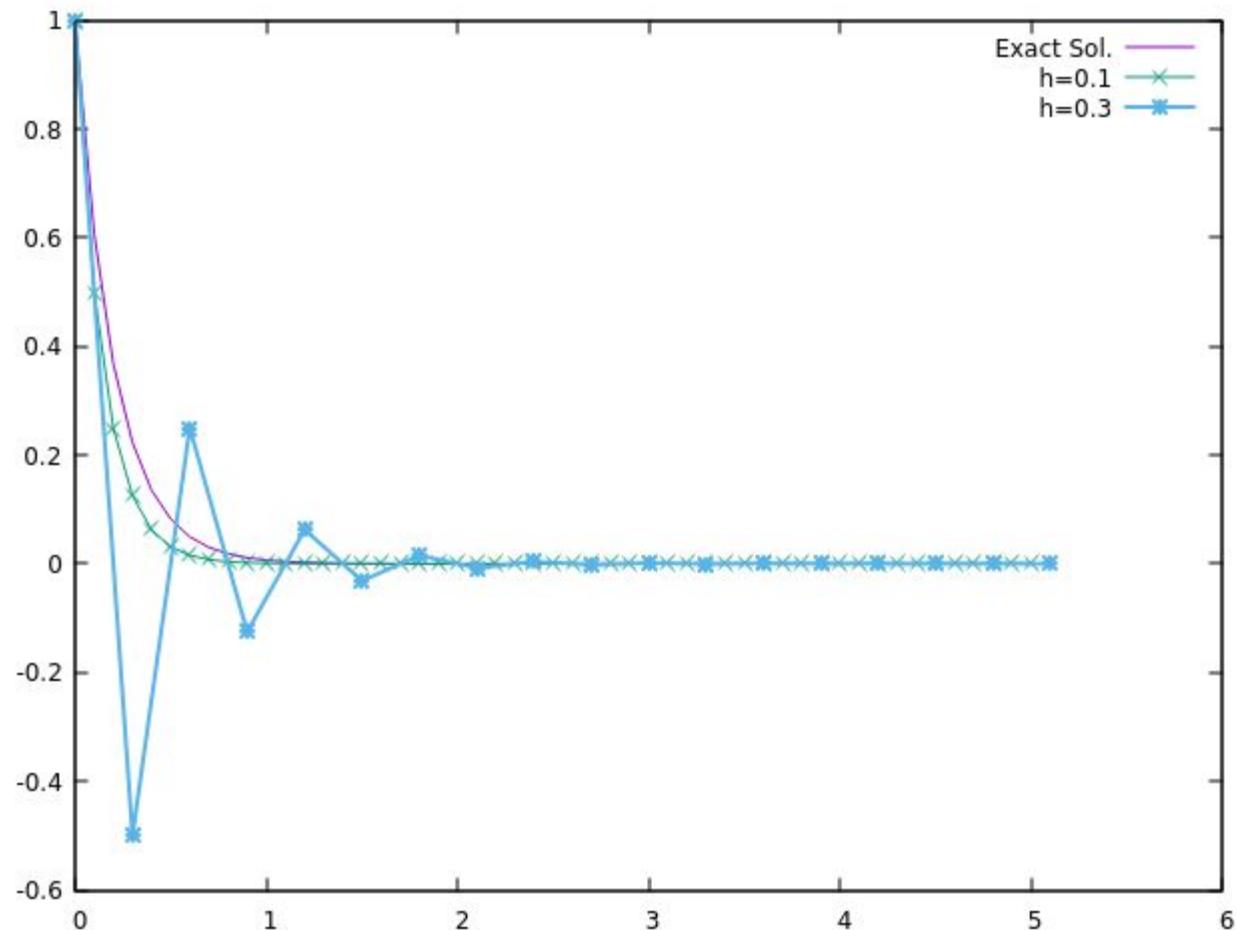


Estabilidade de um método numérico

- Vamos rever nosso exemplo anterior.

$$\frac{du}{dt} = -5u \quad u(0) = 1$$

- Aqui temos a solução numérica com $h = 0.1$.
- Vimos que aumentando o tamanho de passo, a solução numérica se torna instável.

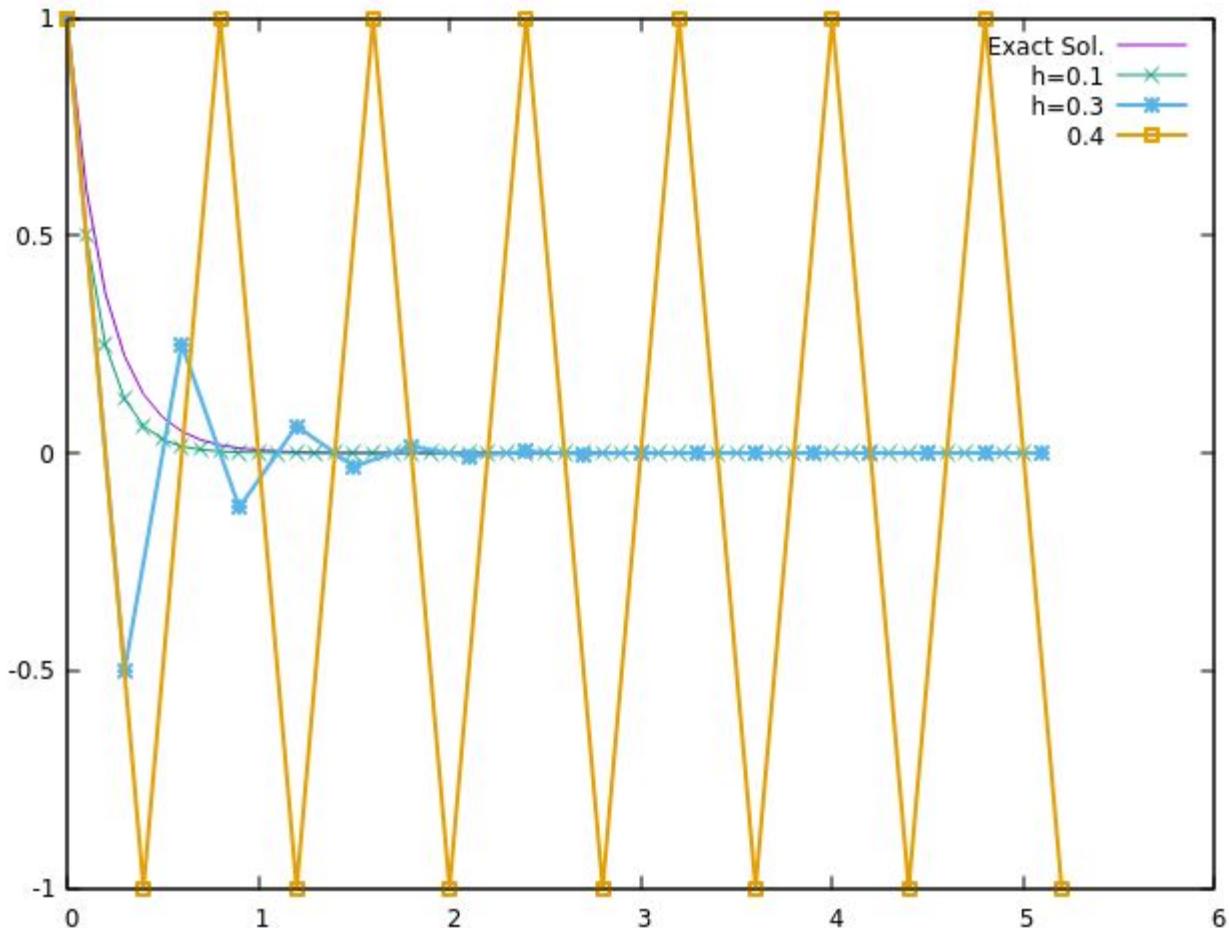


Estabilidade de um método numérico

- Vamos rever nosso exemplo anterior.

$$\frac{du}{dt} = -5u \quad u(0) = 1$$

- Aqui temos a solução numérica com $h = 0.1$.
- Vimos que aumentando o tamanho de passo, a solução numérica se torna instável.



Estabilidade de um método numérico

- Queremos encontrar a região segura para o tamanho de passo.
- Primeiro vamos supor um problema de teste simples

$$\frac{du}{dt} = \lambda u \quad u(0) = 1$$

- Nos chamamos um **problema**, analítico estável se

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(t) = 0$$

- Para este problema de teste ser estável analítico, precisamos

$$Re(\lambda) \leq 0$$

Estabilidade de um método numérico

- $\frac{du}{dt} = \lambda u \quad u(0) = 1 \quad Re(\lambda) \leq 0$
- Vamos encontrar a solução numérica com o método de Euler avançado

$$u_{n+1} = u_n + h \cdot f(t_n, u_n) = u_n + h\lambda u_n = u_n(1 + h\lambda)$$

$$u_1 = u_0(1 + h\lambda) = (1 + h\lambda)$$

$$u_2 = u_1(1 + h\lambda) = (1 + h\lambda)^2$$

$$u_n = (1 + h\lambda)^n$$

Estabilidade de um método numérico

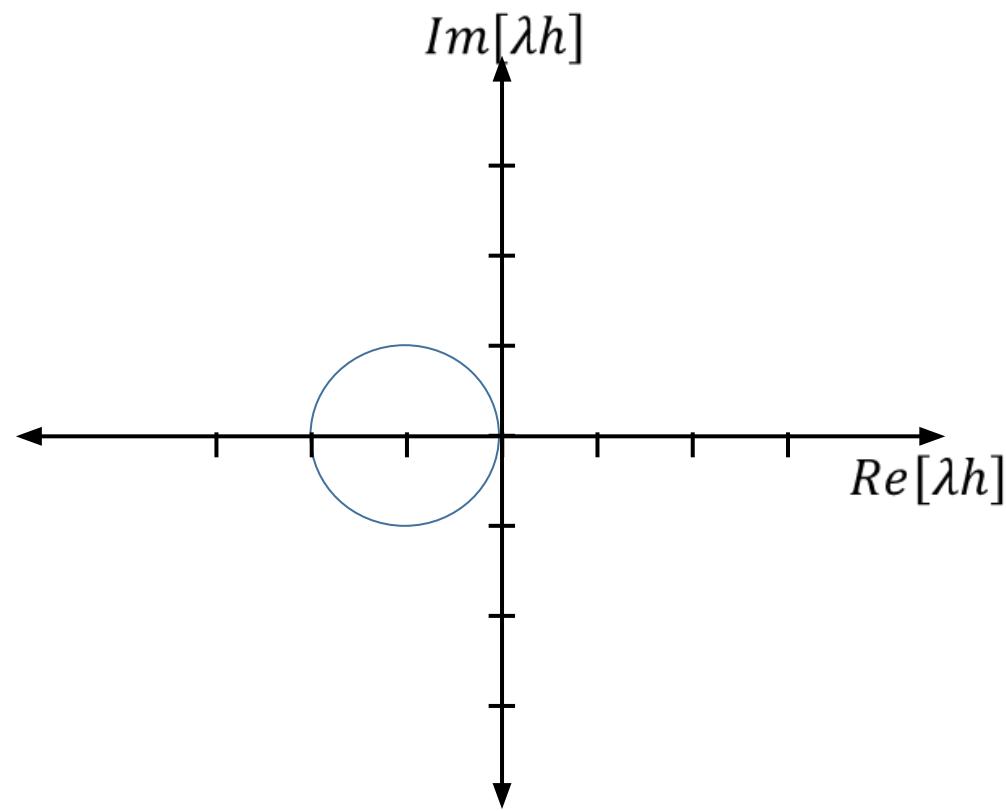
- O problema é $\frac{du}{dt} = \lambda u \quad u(0) = 1 \quad Re(\lambda) \leq 0$
- A solução numérica é $u_n = (1 + h\lambda)^n$
- Agora, esta solução numérica é estável se (como a solução exata)
$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = 0$$
- Para isso precisamos

$$|1 + h\lambda| \leq 1$$

Região de estabilidade

- $|1 + h\lambda| \leq 1$
- Podemos traçar esta condição graficamente no plano complexo.
- Preste atenção que λ pode ser complexo, mas h é real.
- Os valores possíveis para $h\lambda$ estão dentro do circulo.
- Qualquer valor fora do circulo resultará em

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n \neq 0$$

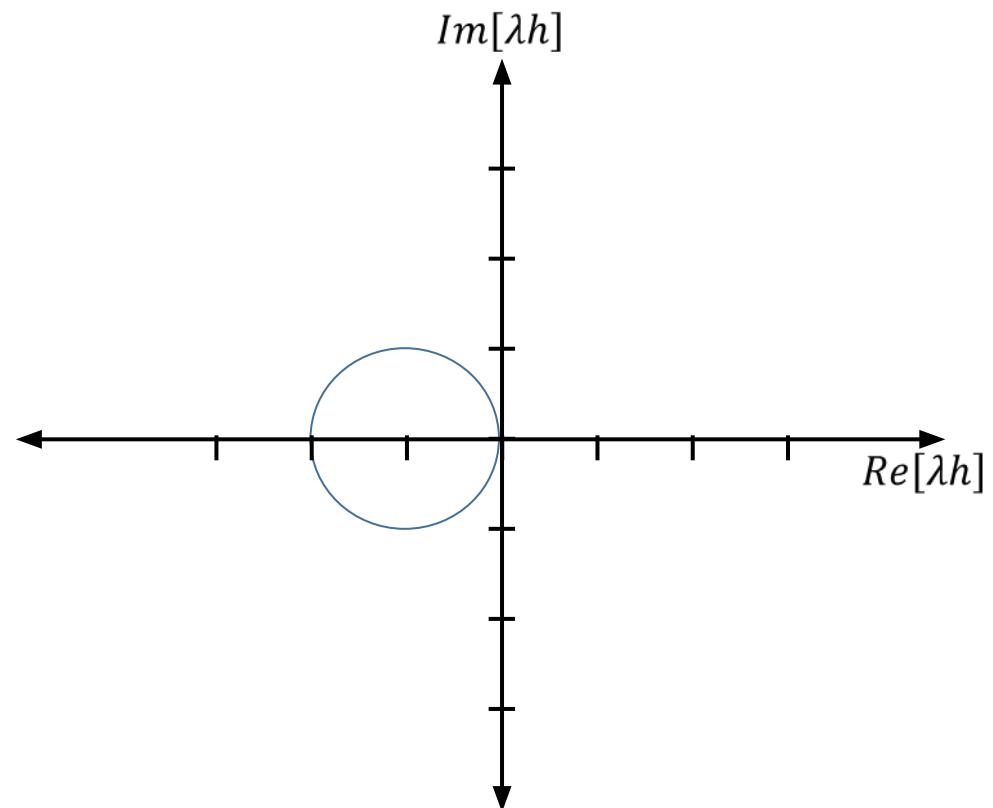


Região de estabilidade

- Qualquer valor fora do círculo resultará em

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n \neq 0$$

- Isso significa que temos oscilação para os valores fora do círculo e soluções não oscilatórias para os valores de dentro.
- Preste atenção que para ter estabilidade analítica precisamos $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$. Portanto, apenas meio plano esquerdo é importante para nós.
- Qualquer valor dentro do círculo afeta somente a precisão da solução numérica.



Stability Region

Estabilidade de um método numérico

- $\frac{du}{dt} = \lambda u \quad u(0) = 1 \quad Re(\lambda) \leq 0$
- Vamos encontrar a solução numérica com o método de Euler atrasado

$$u_{n+1} = u_n + h \cdot f(t_{n+1}, u_{n+1}) = u_n + h\lambda u_{n+1}$$

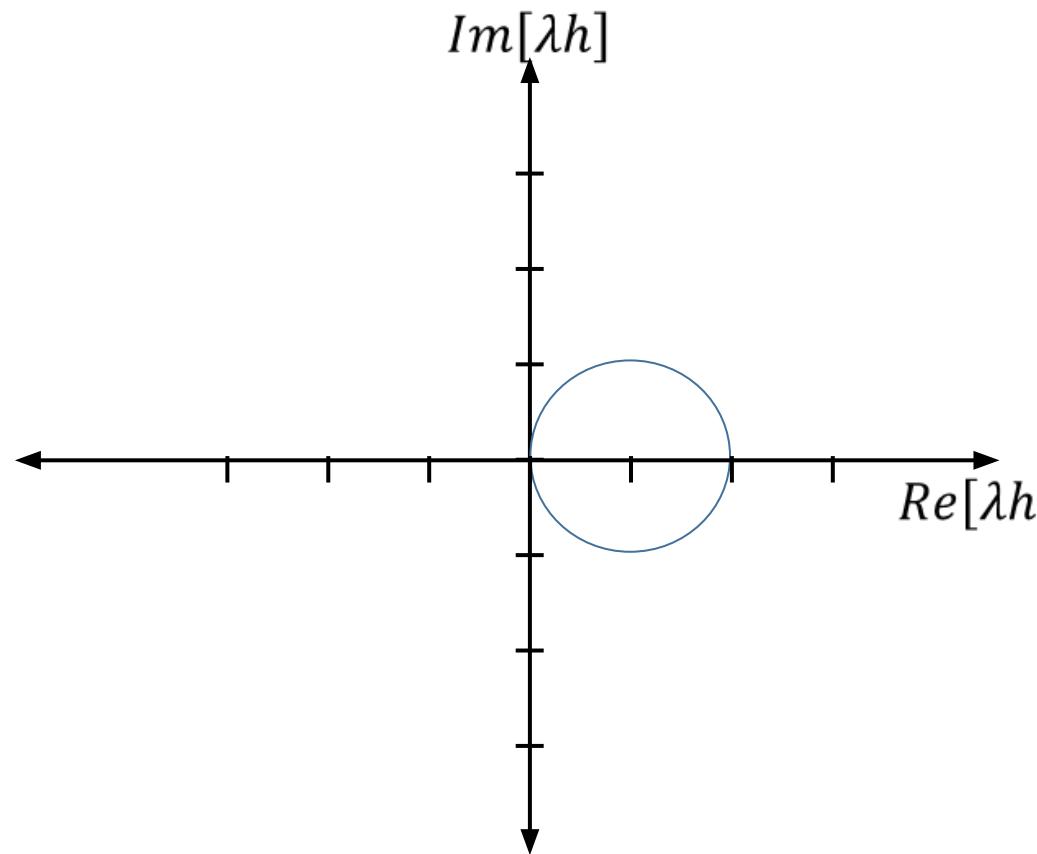
$$u_{n+1} = \frac{u_n}{1 - h\lambda}$$

- Agora é fácil mostrar

$$u_n = \frac{1}{(1 - h\lambda)^n}$$

Região de estabilidade

- $u_n = \frac{1}{(1 - h\lambda)^n}$
- Para ter solução limitada no infinito, precisamos
$$|1 - h\lambda| \geq 1$$
- A região de estabilidade é fora do círculo.
- Como apenas o $\text{Re}(h\lambda)$ é importante para nos, isso significa que a estabilidade do método de Euler atrasado não é **restrita**.



Exemplo 1

- Por que isso é importante?
- Considere as seguintes reações.



- Isso resultará no seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = -k_1 u_1 + k_2 u_2 u_3 & u_1(0) = 1 \quad k_1 = 0,04 \\ \frac{du_2}{dt} = k_1 u_1 - k_2 u_2 u_3 - k_3 u_2^2 & u_2(0) = 0 \quad k_2 = 10^4 \\ \frac{du_3}{dt} = k_3 u_2^2 & u_3(0) = 0 \quad k_3 = 3 \cdot 10^7 \end{cases}$$

Exemplo 1

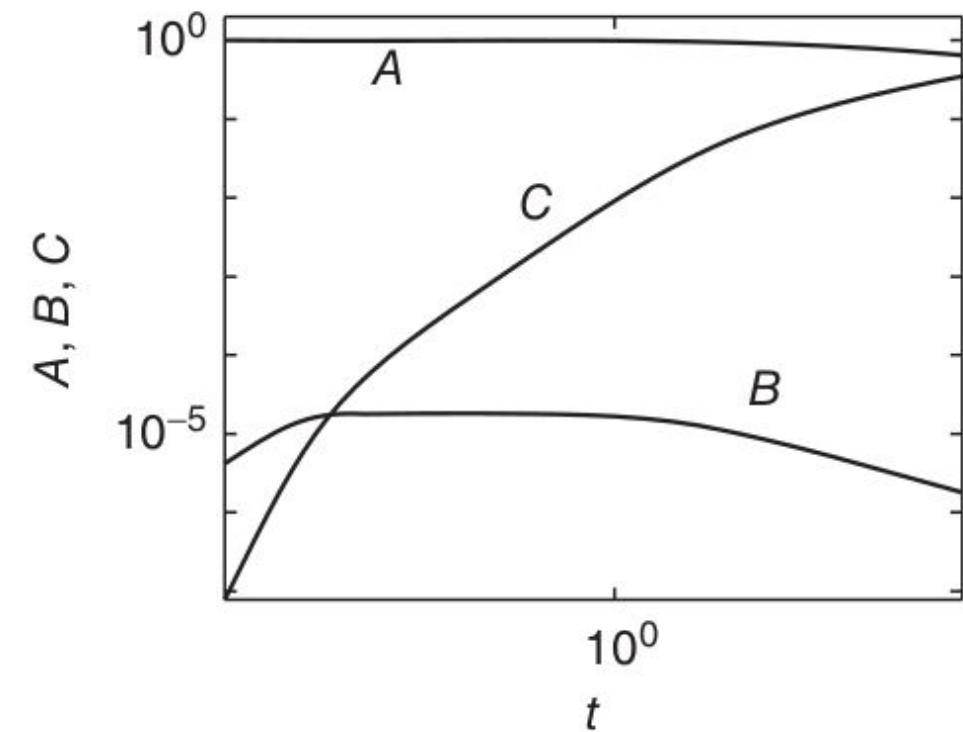
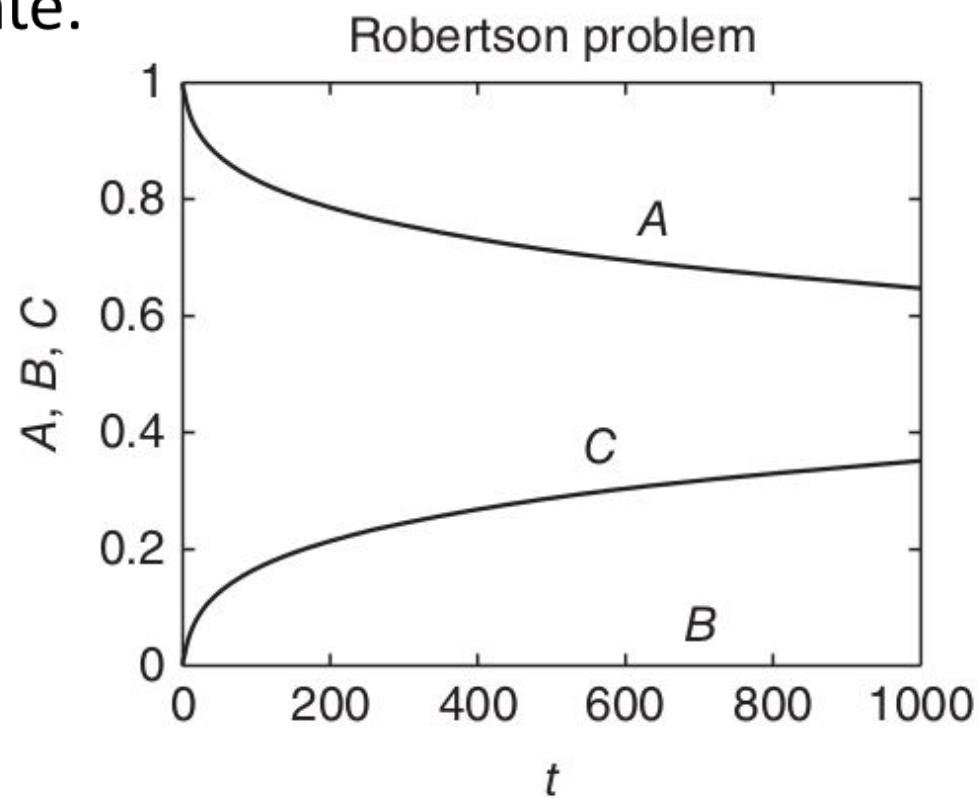
- Agora, se tentamos resolver este sistema de equações com o método de Euler avançado para diferentes tamanhos de passo, teremos

N	h	U(1)
10	0,1	NaN
100	0,01	NaN
1000	0,001	NaN
10000	0,0001	ok

- NaN significa que o método gerou números que são muito grandes para serem armazenados no computador (overflow).

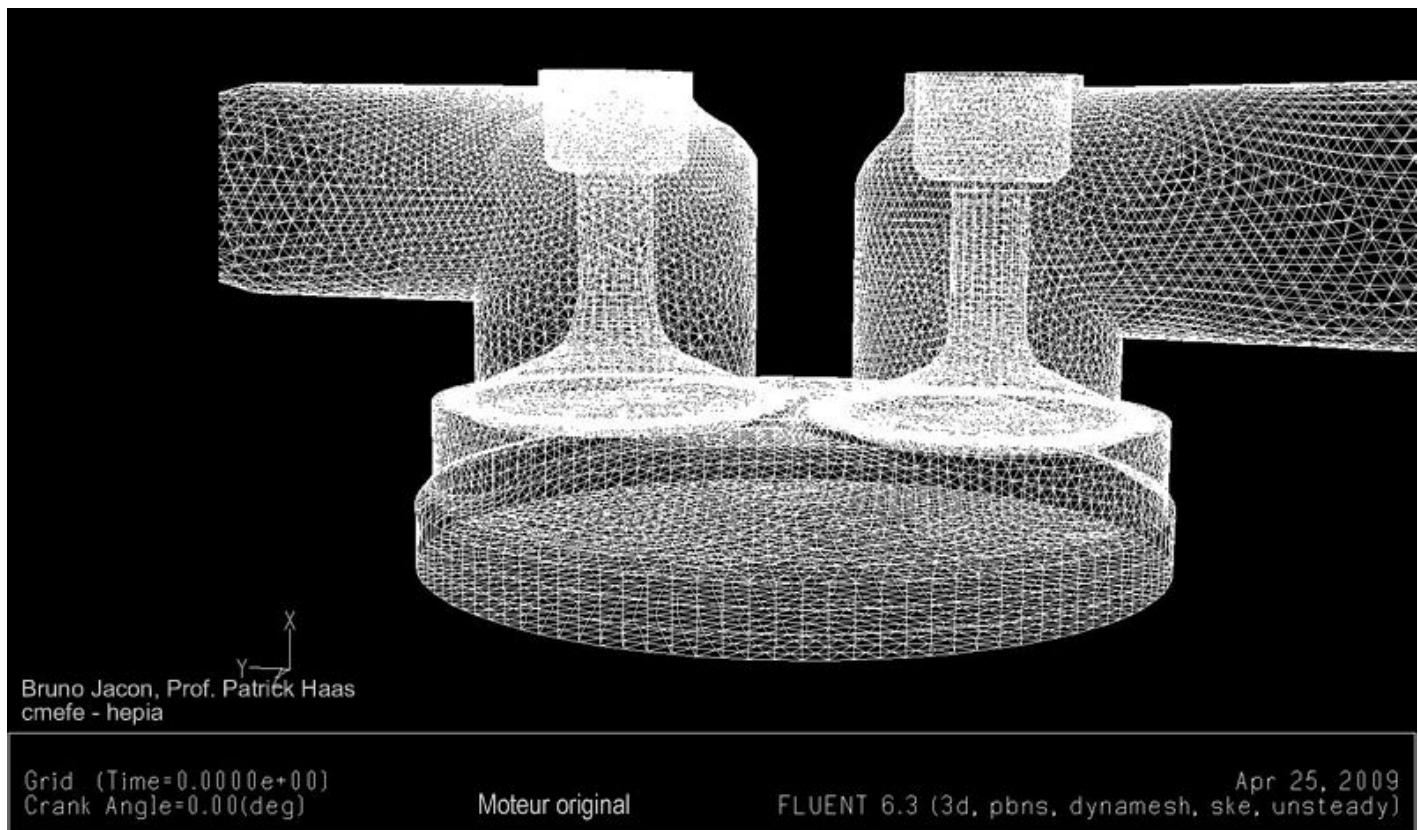
Exemplo 1

- Neste problema, precisamos da solução em $T = 1000$. Isso significa que precisamos de 10^7 etapas para alcançar esse ponto, que é muito ineficiente.



Stiff Equations

- Nos problemas da vida real, precisamos resolver esse sistema para milhões de células em várias etapas.
- Por exemplo, para simular a combustão dentro do motor. Para resolver a dinâmica dos fluidos precisamos de células e dentro de cada célula, precisamos resolver as reações.



Stiff Equations

- Este sistema de exemplo teve apenas 3 reações.
- Mesmo processos simples, como a combustão do hidrogênio no ar, têm dezenas de reações, o que torna o tamanho de passo menor.

	A	n	E	Reference
<i>H₂/O₂ Chain Reactions</i>				
1. H + O ₂ = O + OH	3.55 × 10 ¹⁵	-0.41	16.6	Hessler [16]
2. O + H ₂ = H + OH	5.08 × 10 ⁶	2.67	6.29	Sutherland et al. [44]
3. H ₂ + OH = H ₂ O + H	2.16 × 10 ⁶	1.51	3.43	Michael et al. [45]
4. O + H ₂ O = OH + OH	2.97 × 10 ⁶	2.02	13.4	Sutherland et al. [46]
<i>H₂/O₂ Dissociation/Recombination Reactions</i>				
5. H ₂ + M = H + H + M ^a	4.58 × 10 ¹⁹	-1.40	104.38	Tsang et al. [47]
H ₂ + Ar = H + H + Ar	5.84 × 10 ¹⁸	-1.10	104.38	Tsang et al. [47]
H ₂ + He = H + H + He	5.84 × 10 ¹⁸	-1.10	104.38	See text
6. O + O + M = O ₂ + M ^a	6.16 × 10 ¹⁵	-0.50	0.00	Tsang et al. [47]
O + O + Ar = O ₂ + Ar	1.89 × 10 ¹⁵	0.00	-1.79	Tsang et al. [47]
O + O + He = O ₂ + He	1.89 × 10 ¹⁵	0.00	-1.79	See text
7. O + H + M = OH + M ^a	4.71 × 10 ¹⁸	-1.0	0.00	Tsang et al. [47]
H + OH + M = H ₂ O + M ^b	3.8 × 10 ²²	-2.00	0.00	See text

<i>Formation and Consumption of HO₂</i>						
9. H + O ₂ + M = HO ₂ + M ^c	k _o	6.37 × 10 ²⁰	-1.72	0.52	Michael et al. [19] (M = N ₂)	
H + O ₂ + M = HO ₂ + M ^d	k _o	9.04 × 10 ¹⁹	-1.50	0.49	Michael et al. [19] (M = Ar or He)	
	k _e	1.48 × 10 ¹²	0.60	0.00	Cobos et al. [48]	
10. HO ₂ + H = H ₂ + O ₂		1.66 × 10 ¹⁵	0.00	0.82	Mueller et al. [1]	
11. HO ₂ + H = OH + OH		7.08 × 10 ¹⁵	0.00	0.30	Mueller et al. [1]	
12. HO ₂ + O = OH + O ₂		3.25 × 10 ¹⁵	0.00	0.00	Baulch et al. [34]	
13. HO ₂ + OH = H ₂ O + O ₂		2.89 × 10 ¹⁵	0.00	-0.50	Baulch et al. [34]	
<i>Formation and Consumption of H₂O₂</i>						
14. HO ₂ + HO ₂ = H ₂ O ₂ + O ₂ ^c		4.20 × 10 ¹⁴	0.00	11.98	Hippler et al. [49]	
HO ₂ + HO ₂ = H ₂ O ₂ + O ₂		1.30 × 10 ¹¹	0.00	-1.63		
15. H ₂ O ₂ + M = OH + OH + M ^f	k _o	1.20 × 10 ¹⁷	0.00	45.5	Warnatz [50]	
	k _e	2.95 × 10 ¹⁴	0.00	48.4	Brouwer et al. [51]	
16. H ₂ O ₂ + H = H ₂ O + OH		2.41 × 10 ¹⁵	0.00	3.97	Tsang et al. [47]	
17. H ₂ O ₂ + H = H ₂ + HO ₂		4.82 × 10 ¹⁵	0.00	7.95	Tsang et al. [47]	
18. H ₂ O ₂ + O = OH + HO ₂		9.55 × 10 ⁶	2.00	3.97	Tsang et al. [47]	
19. H ₂ O ₂ + OH = H ₂ O + HO ₂ ^c		1.00 × 10 ¹²	0.00	0.00	Hippler et al. [52]	
		5.8 × 10 ¹⁴	0.00	9.56		

Stiff Equations

- Os problemas que precisam de tamanho de passo muito pequeno para serem resolvidos numericamente são chamados de problemas rígidos.
- Para resolver esses problemas, é mais eficiente usar métodos com regiões de estabilidade maiores. Portanto, podemos usar tamanhos de passo maiores.
- Por exemplo, para o exemplo anterior, é mais adequado usar o método de Euler atrasado.

Estabilidade de um método numérico

- Vamos supor um sistema de teste simples

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = A\mathbf{u} \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$

- é fácil mostrar que para ter um problema estável analítico precisamos ter

$$Re(\lambda_i) \leq 0$$

Onde λ_i são os autovalores da matriz A . Com esta condição teremos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u_i(t) = 0$$

Estabilidade de um método numérico

- $$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = A\mathbf{u} \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$
- A solução numérica deste problema usando o método de Euler avançado é

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + hA\mathbf{u}_n = (I + hA)\mathbf{u}_n$$

- Usando a diagonalização para a matriz A resultará

$$\mathbf{u}_{n+1} = (I + hS\Lambda S^{-1})\mathbf{u}_n$$

Estabilidade de um método numérico

- Usando a diagonalização para a matriz A resultará

$$\mathbf{u}_{n+1} = (I + hS\Lambda S^{-1})\mathbf{u}_n$$

- Lembre-se que para encontrar a solução exata para este sistema, usamos uma mudança de variável como $\mathbf{v} = S^{-1}\mathbf{u}$. Substituir \mathbf{v} por \mathbf{u} resultará

$$S\mathbf{v}_{n+1} = (I + hS\Lambda S^{-1})S\mathbf{v}_n$$

Ou

$$\mathbf{v}_{n+1} = S^{-1}(I + hS\Lambda S^{-1})S\mathbf{v}_n = (I + h\Lambda)\mathbf{v}_n$$

Estabilidade de um método numérico

- $\mathbf{v}_{n+1} = S^{-1}(I + hS\Lambda S^{-1})S\mathbf{v}_n = (I + h\Lambda)\mathbf{v}_n$
- Agora, lembre-se de que Λ é uma matriz diagonal. Portanto, podemos reescrever o sistema como n equações desacopladas.

$$v_{n+1}^i = (1 + h\lambda_i)v_n^i \quad i = 1, \dots, n$$

- Vimos que para ter um método numérico estável, cada equação deve obedecer

$$|1 + h\lambda_i| \leq 1 \quad i = 1, \dots, n$$

Estabilidade de um método numérico

- $|1 + h\lambda_i| \leq 1 \quad i = 1, \dots, n$
- Suponha que todos os autovalores sejam reais e que tenhamos $\lambda_n \leq \lambda_{n-1} \leq \dots \leq \lambda_1 < 0$.
- Agora a condição mais restritiva é $|1 + h\lambda_n| \leq 1$. Porque λ_n é real isso pode ser simplificado como

$$h \leq \frac{2}{|\lambda_n|} = h_{max}$$

Estabilidade de um método numérico

- $$h \leq \frac{2}{|\lambda_n|} = h_{max}$$
- O que? O tamanho do passo deve ser ajustado para a escala de tempo mais rápida?
- O componente mais rápido ($e^{\lambda_n t}$) diminui muito rapidamente para zero e seu valor é muito rapidamente completamente insignificante.
- Surpreendentemente, esse componente coloca a restrição mais severa ao tamanho de passo.

Estabilidade de um método numérico

- Vamos considerar um sistema não linear e Autônomo

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$

- Para usar o mesmo método para analisar a estabilidade do método numérico, usaremos a técnica de linearização. Nesta técnica, estudamos o problema em torno de um ponto (t, \mathbf{b}) em uma trajetória de solução $(t, \mathbf{u}(t))$. Neste ponto temos

$$\frac{d\mathbf{b}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{b})$$

Estabilidade de um método numérico

- Neste ponto temos

$$\frac{d\mathbf{b}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{b})$$

- Agora, considerando $\mathbf{u} = \mathbf{b} + \delta\mathbf{u}$ e usando a expansão de Taylor, teremos

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{d\mathbf{b}}{dt} + \frac{d\delta\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{b} + \delta\mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{b}) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{b})\delta\mathbf{u} + \dots$$

- Subtraindo duas equações resultará

$$\frac{d\delta\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{b})\delta\mathbf{u} = \mathbf{J}\delta\mathbf{u}$$

Estabilidade de um método numérico

- $$\frac{d\delta\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{b})\delta\mathbf{u} = J\delta\mathbf{u}$$
- Aqui J é chamado matriz Jacobiana definida como
$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1}(\mathbf{b}) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial u_n}(\mathbf{b}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial u_1}(\mathbf{b}) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial u_n}(\mathbf{b}) \end{bmatrix}$$
- Preste atenção que a matriz J é agora uma constante.

Estabilidade de um método numérico

- $$\frac{d\delta\mathbf{u}}{dt} = J\delta\mathbf{u}$$
- Portanto, a equação linearizada em torno do ponto \mathbf{b} é a mesma do sistema linear anterior.
- Assim, para ter um método estável, precisamos obedecer à seguinte restrição

$$|1 + h\lambda_i(J)| \leq 1$$

Exemplo 1 (Robertson)

- Vamos ver essas restrições para o problema do Robertson

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = -k_1 u_1 + k_2 u_2 u_3 \\ \frac{du_2}{dt} = k_1 u_1 - k_2 u_2 u_3 - k_3 u_2^2 \\ \frac{du_3}{dt} = k_3 u_2^2 \end{cases}$$

- A matriz jacobiana será

$$J = \begin{bmatrix} -k_1 & k_2 u_3 & k_2 u_2 \\ k_1 & -k_2 u_3 - 2k_3 u_2 & -k_2 u_2 \\ 0 & 2k_3 u_2 & 0 \end{bmatrix}$$

Exemplo 1 (Robertson)

- Vamos calcular essa matriz em alguns pontos e seus autovalores.
- Preste atenção que todos os autovalores são não-positivos. Assim, o problema, na faixa de estudo, é estável analítico.

T	lambda1	lambda2	lambda3
1	0	-0.16	-1090
10	0	-0.06	-1210
100	0	-0.008	-1950
1000	0	-0.0004	-3670

Exemplo 1 (Robertson)

- Todos os autovalores são reais. Com base no que vimos, o tamanho do passo será controlado pelo maior valor próprio.
- Para este problema, o maior autovalor (a escala de tempo mais rápida) é λ_3 .

T	lambda1	lambda2	lambda3	h
1	0	-0.16	-1090	0.0018
10	0	-0.06	-1210	0.0016
100	0	-0.008	-1950	0.0010
1000	0	-0.0004	-3670	0.0005

Exemplo 1 (Robertson)

- Uma técnica para resolver esse problema com o método de Euler avançado é usar o menor tamanho de passo para todas as etapas de tempo.
- O outro é usar um método adaptativo. No método adaptativo, o tamanho do passo pode ser ajustado em cada etapa.
- Mas preste atenção que para ter um método adaptativo, precisamos calcular a matriz jacobiana e seus autovalores em cada etapa.
- Às vezes, esses novos cálculos consomem mais tempo do que apenas usar tamanhos de passo menores.

Definição

- O sistema é rígido (stiff) se
 - Todos os λ_i estão na metade esquerda do plano complexo, $Re(\lambda_i) \leq 0$.
 - $Re(\lambda_i)$ são de tamanho muito diferente, isto é, o sistema contém constantes de tempo de tamanhos variados.

Exercícios

- 3.3.10
- 3.3.11
- 3.3.13

Métodos numéricos

- Áte agoram, estudamos 4 métodos para resolver EDOs.

Euler avançado

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n)$$

Euler atrasado

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_{n+1}, u_{n+1})$$

Crank-Nicolson

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})$$

Huen

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}(f_n + f(t_{n+1}, u_n + hf_n))$$

- Preste atenção que para aumentar a ordem dos métodos, uma técnica é usar mais cálculos de função f .

Método de Runge-Kutta

- Crank-Nicolson
$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} (f_n + f_{n+1})$$
- Preste atenção que para aumentar a ordem dos métodos, uma técnica é usar mais cálculos de função f .
- Por exemplo, no método de Crank-Nicolson (método de segunda ordem), usamos dois cálculos de função, f_n e f_{n+1} .
- No método RK, usamos mais cálculos de função (*entre o tempo t_n e t_{n+1}*) para aumentar a precisão do método.

Método de Runge-Kutta

- Por exemplo, o método clássico RK da ordem 4 ($e_k = \mathcal{O}(h^4)$) é

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Onde

$$k_1 = f(t_n, u_n) = f_n \quad k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{hk_1}{2}\right)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{hk_2}{2}\right) \quad k_4 = f(t_n + h, u_n + hk_3) \approx f_{n+1}$$

Exemplo 2

- Vamos resolver a equação usando RK4,

$$\frac{du}{dt} = -5u \quad u(0) = 1$$

- Com método RK4 temos

$$k_1 = f(t_n, u_n) = -5u_0 = -5$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{hk_1}{2}\right) = -5\left(1 + \frac{0.1 \times -5}{2}\right) = -3.75$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{hk_2}{2}\right) = -5\left(1 + \frac{0.1 \times -3.75}{2}\right) = -4.0625$$

$$k_4 = f(t_n + h, u_n + hk_3) = -5(1 + 0.1 \times -4.0625) = -2.96875$$

Exemplo 2

- $$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$u_1 = 1 + \frac{0.1}{6} (-5 + 2 \times -3.75 + 2 \times -4.0625 - 2.96875) = 0.60677$$
- O mesmo cálculo com o método Crank-Nicolson resultará
- A solução exata é

$$u_1^{CN} = 0.6$$

$$u(0.1) = 0.606531$$

Exercícios

- Encontre e plote a região de estabilidade para o método RK4.