Solução numérica de eq. diferenciais ordinárias

$\Longrightarrow$ Derivada: $\quad f'(x) = \dfrac{df}{dx} = \lim\limits_{h \to 0} \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$

Quarteroni 4.2

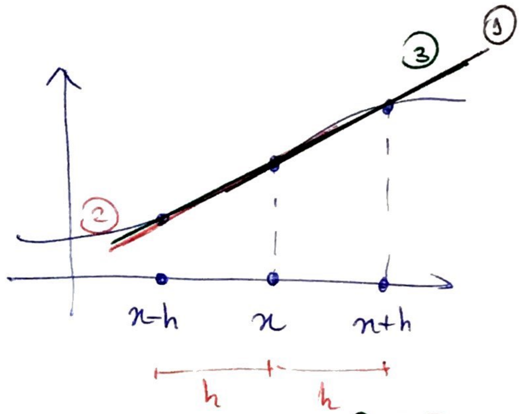
$\Longrightarrow$ aproximação da derivada: $\qquad \Delta x = h \Rightarrow$ finito

- diferença finita progressiva:

$$(1) \quad \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

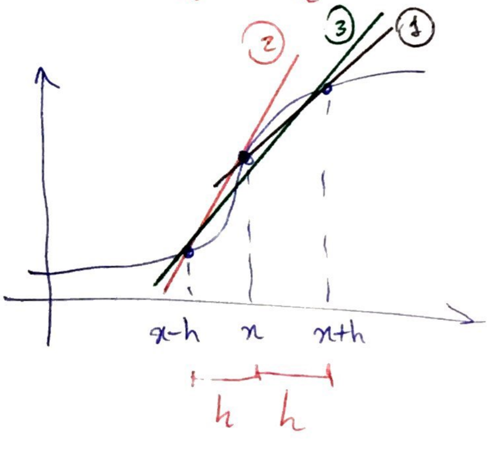
- diferença finita regressiva:

$$(2) \quad \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$



- diferença finita centrada:

$$(3) \quad \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$



usa apenas as informações nos nós.

$\Longrightarrow$ erro: Série de Taylor de $f(x)$ centrada em a

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + f''(a)\frac{(x-a)^2}{2} + f'''(a)\frac{(x-a)^3}{3!} \dots$$

- Série de Taylor de $f(x+h)$ centrada em x:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)(x+h-x) + \frac{f''(x)(x+h-x)^2}{2} \dots$$

$$① \quad f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2} + \frac{f'''(x)h^3}{3!} + \dots$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(x)h}{2} - \frac{f'''(x)h^2}{3!} - \dots$$

D.F. progressiva:

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \underbrace{O(h)}}$$

- termos de ordem h ou menor
- erro em função de h.
- erro de ordem 1 ou h

- Série de Taylor de $f(x-h)$ centrada em x:

$$f(x-h) = f(x) + f'(x)(x-h-x) + \frac{f''(x)(x-h-x)^2}{2} + \dots$$

$$② \quad f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2} - \frac{f'''(x)h^3}{3!} + \frac{f''''(x)h^4}{4!} - \dots$$

D.F. regressiva

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h)}$$

- Diferença finita centrada: 1 − 2

$$f(x+h) - f(x-h) = 2 f'(x) h + \frac{2 f'''(x) h^3}{3!} + \dots$$

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{erro de ordem 2 ou } h^2}}$$

ao reduzir h pela metade, o erro de ordem 1 reduz pela metade, o erro de ordem 2 reduz por 1/4.

- Derivada de ordem 2: diferença finita centrada: 1 + 2

$$f(x+h) + f(x-h) = 2 f(x) + \frac{\cancel{2} f''(x) h^2}{\cancel{2}} + \frac{2 f''''(x) h^4}{4!} + \dots$$

$$\boxed{f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{erro de ordem 2 ou } h^2}}$$

⇒ $\underbrace{\text{Eq. diferenciais}}_{\substack{\text{1 ou mais derivadas} \\ \text{de uma função desconhecida } y = f(t)}}$ $\underbrace{\text{ordinárias}}_{\text{1 variável independente } t}$ (EDO) Quarteroni 8.

- de ordem p: maior ordem dentre as derivadas da eq.

- linear: se é uma comb. linear de $f(t)$ e suas derivadas ex)

- $\frac{dy}{dt} = t + y \rightarrow$ EDO linear de ordem 1

- $\frac{d^2y}{dt^2} = t + y^2 \rightarrow$ EDO não-linear de ordem 2

- $\frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial x} = x + y + t \rightarrow$ EDP linear de ordem 1.

$\Longrightarrow$ Problema de Cauchy: EDO de ordem 1
(problema de valor inicial)

- em geral, infinitas soluções $y(t) + C$, $C \in \mathbb{R}$.

$$y : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(*) \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) & \forall\, t \in I \\ y(t_0) = y_0 \rightarrow \text{condição inicial, fixa uma única solução.} \end{cases}$$

se $f(t, y(t))$ é contínua em relação a t e $y(t)$ e

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leq L\,|y_1 - y_2| \quad \forall\, t \in I, \ \forall\, y_1, y_2 \in \mathbb{R}$$

Lipschitz-contínua, $L \geq 0 \in \mathbb{R}$

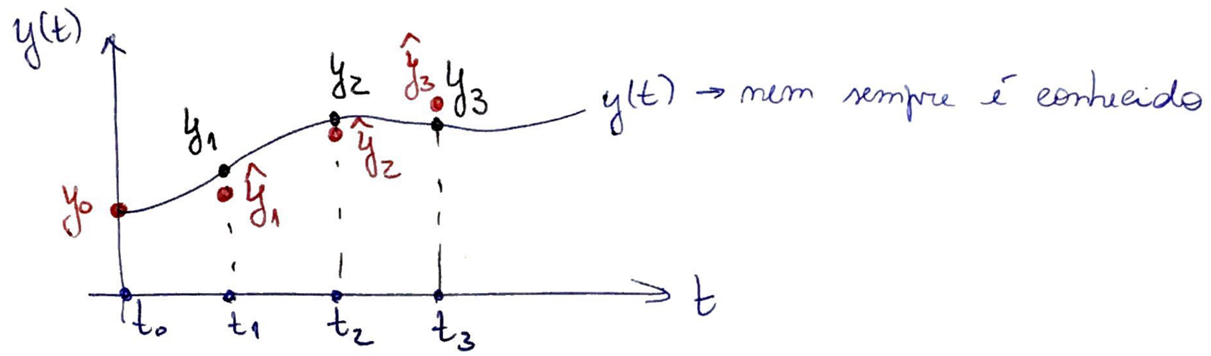
então $y(t)$ solução de $(*)$ existe, é única e $\in C^1(I)$.

- obs: nem sempre é possível encontrar analiticamente.

⇒ solução numérica: $\begin{cases} \text{discretização} \\ \text{eq. diferencial} \Rightarrow \text{eq. algébrica} \end{cases}$

- $y(t) \rightarrow$ contínua, solução analítica
- $y_n = y(t_n) \rightarrow$ discreta, solução exata nos nós t_n
- $\hat{y}_n \simeq y(t_n) \rightarrow$ discreta, solução numérica (aproximada) nos nós t_n.

- $t_n \rightarrow$ nós da discretização, $n = 0, 1, \dots, N$
- $N \rightarrow$ número de nós



Dados do problema: $\begin{cases} \dfrac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \rightarrow \text{num ponto } t \\ y(t_0) = y_0 \rightarrow \text{condição inicial} \end{cases}$

① definir nós da discretização (t_n)

② escrever uma eq. algébrica para $\hat{y}_n$

⇒ Método de Euler:

aproxima $\dfrac{dy}{dt}$ por diferenças finitas progressivas

$$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = \underbrace{f(t, y(t))}_{\text{calculado em qual nó?}}$$

* explícito: $$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = f_n(t_n, \hat{y}_n)$$

$$\boxed{\hat{y}_{n+1} = \underbrace{\hat{y}_n + h f_n(t_n, \hat{y}_n)}_{\text{conhecidos}}}$$

começa em $n=0$, y_0 e t_0 são conhecidos, a cada iteração calcula $y_1, y_2, \ldots, y_N$ diretamente.

* implícito: $$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = f_{n+1}(t_{n+1}, \hat{y}_{n+1})$$

$$\boxed{\hat{y}_{n+1} = \underbrace{\hat{y}_n}_{\text{conhecido}} + h \underbrace{f_{n+1}(t_{n+1}, \hat{y}_{n+1})}_{\text{desconhecido}}}$$

dependendo de $f(t, y(t))$, pode ser possível ou não isolar $\hat{y}_{n+1}$, se sim → método direto, se não → método iterativo (zero de funções não-lineares) a cada iteração n.

$\Longrightarrow$ Propriedades de uma solução numérica:

* consistência: equação aproximada (discretizada) deve se tornar a equação original (analítica) no limite de $h \to 0$.

ex) diferença - finita progressiva:

$$\lim_{h \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{df}{dx} \quad ✓$$

* convergência: solução numérica $\hat{y}_n$ converge para a solução exata y_n no limite $h \to 0$

$$\lim_{h \to 0} \hat{y}_n = y_n \quad \text{ou} \quad |\hat{y}_n - y_n| \leq C(h)$$

onde $\lim_{h \to 0} C(h) = 0$.

- obs: consistência é condição necessária (mas não suficiente) para convergência.

- ordem de convergência (taxa): $h, h^2 \ldots$ (dif. finita)

* estabilidade: método numérico não aumenta os erros de truncamento do computador.

$\Longrightarrow$ Método de Euler p/ EDO de ordem 1:

- consistente e convergente com ordem h, pois diferença finita progressiva é consistente e convergente com ordem h.

(ver detalhes em Quarteroni 8.3.1)

* estabilidade:

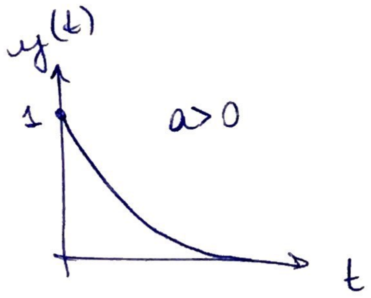
ex) $\begin{cases} \dfrac{dy}{dt} = -ay \\ y(0) = y_0, \quad a>0 \text{ (constante)} \end{cases} \rightarrow \int \frac{dy}{y} = -a \int dt$

$\ln(y) + c_1 = -at + c_2$

$y = c_3 e^{-at}, \quad y(0) = y_0, \quad c_3 = y_0$

$y(t) = e^{-at}$ $\qquad$ $\boxed{y = y_0 e^{-at}}$

* Euler explícito: $\dfrac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = -a\hat{y}_n$



$\hat{y}_{n+1} = \hat{y}_n - ah\,\hat{y}_n$

$\boxed{\hat{y}_{n+1} = (1-ah)\hat{y}_n}, \quad n = 0, 1, \ldots, N$

$n=0: \quad \hat{y}_1 = (1-ah)\hat{y}_0$

$n=1: \quad \hat{y}_2 = (1-ah)\hat{y}_1 = (1-2h)^2\hat{y}_0$

$\vdots$

$n=N-1: \quad \hat{y}_N = (1-ah)^N \hat{y}_0$

$G = (1-ah) \rightarrow$ fator de ganho da solução.

$$\hat{y}_0 = y_0 + \underbrace{e_0}$$

erro de truncamento da representação de y_0 no computador.

$n=0$: $\hat{y}_1 = (1-ah)(y_0+e_0)$

$$= (1-ah)\,y_0 + (1-ah)\,e_0$$

$n=1$: $\hat{y}_2 = (1-ah)\,\hat{y}_1 = (1-ah)^2 y_0 + (1-ah)^2 e_0$

$\vdots$

$n = N-1$: $\hat{y}_N = (1-ah)^N y_0 + (1-ah)^N e_0$

erro evolui com $G = (1-ah)$.

$$\begin{cases} \text{se } |(1-ah)| > 1 \rightarrow \text{cresce (instável)} \\ \text{se } |(1-ah)| \leqslant 1 \rightarrow \text{estável.} \end{cases}$$

* condição de estabilidade:

$|G| = |1-ah| \leqslant 1$

$$\frac{dy}{dt} = -ay \quad , \quad y(0) = y_0$$

$-1 \leqslant 1-ah \leqslant 1$

$-2 \leqslant -ah \leqslant 0$

$+2 \geqslant ah \geqslant 0$

$$\begin{cases} a \geqslant 0 \text{ e } h \geqslant 0 \\ \boxed{h \leqslant \dfrac{2}{a}} \end{cases}$$

logo: método de Euler explícito é condicionalmente estável

(estável para $h \leqslant \frac{2}{a}$)

Caso geral: $h < \dfrac{2}{\max\limits_{t \in [t_0,T]} \left| \dfrac{\partial f}{\partial y}(t, y(t)) \right|}$

$$y'(t) = f(t, y(t))$$

(detalhes em Quarteroni 8.3.1)

* Euler implícito: $$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = -a\hat{y}_{n+1}$$

$$\hat{y}_{n+1} = \hat{y}_n - ah\,\hat{y}_{n+1}$$

$$(1+ah)\,\hat{y}_{n+1} = \hat{y}_n$$

$$\boxed{\hat{y}_{n+1} = \frac{1}{(1+ah)}\,\hat{y}_n} \quad , \; n = 0, 1, \ldots, N$$

(método direto)

* condição de estabilidade:

$$G = \frac{1}{1+ah} \qquad |G| = \left|\frac{1}{1+ah}\right| \leq 1$$

$$-1 \leq \frac{1}{1+ah} \leq 1 \quad \rightarrow \quad 1 + ah > 1 \text{ sempre}$$

(como $a > 0$ e $h > 0$)

logo: método de Euler implícito é incondicionalmente estável (h influencia na acurácia)

obs: em geral métodos implícitos são mais estáveis, mas possuem um custo computacional maior quando um método iterativo é necessário.

Quarteroni 8.6

$\Longrightarrow$ Método de Crank - Nicolson:

$$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = \frac{1}{2}\left[f_n(t_n, \hat{y}_n) + f_{n+1}(t_{n+1}, \hat{y}_{n+1})\right]$$

diferença finita centrada no ponto $n+\frac{1}{2}$, com $h/2$, logo, ordem $\left(\frac{h}{2}\right)^2 = \frac{h^2}{4}$ (ordem 2 ou h^2).

* estabilidade numérica:

$$\text{ex)} \quad \begin{cases} \dfrac{dy}{dt} = -ay, & a > 0 \text{ constante} \\ y(t_0) = y_0, & t_0 = 0 \end{cases}$$

$$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = -\frac{1}{2}a(\hat{y}_{n+1} + \hat{y}_n)$$

$$\hat{y}_{n+1} + h\frac{a}{2}\hat{y}_{n+1} = \hat{y}_n - \frac{ha}{2}\hat{y}_n$$

$$\left(1 + \frac{ah}{2}\right)\hat{y}_{n+1} = \left(1 - \frac{ah}{2}\right)\hat{y}_n$$

$$\hat{y}_{n+1} = \frac{\left(1 - \frac{ah}{2}\right)}{\left(1 + \frac{ah}{2}\right)}\hat{y}_n$$

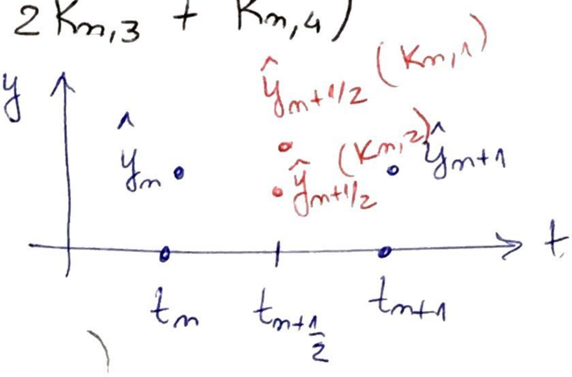
$$|G| = \left|\frac{\left(1 - \frac{ah}{2}\right)}{\left(1 + \frac{ah}{2}\right)}\right| \leq 1 \quad \text{sempre}$$

caso geral: o método é incondicionalmente estável (além de ordem h^2).

⇒ Método de Runge-Kutta : mais alta ordem
família de métodos.

* quarta-ordem (h^4) : (explícito)

$$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = \frac{1}{6}\left(K_{n,1} + 2K_{n,2} + 2K_{n,3} + K_{n,4}\right)$$



$$K_{\underline{n,1}} = f(t_n, \hat{y}_n)$$

avança $\frac{h}{2}$

$$K_{\underline{n,2}} = f\Big(\underbrace{t_n + \frac{h}{2}}_{t_{n+1/2}}, \hat{y}_n + \frac{h}{2}K_{\underline{n,1}}\Big)$$

atualiza

$$K_{\underline{n,3}} = f\Big(\underbrace{t_n + \frac{h}{2}}_{t_{n+1/2}}, \hat{y}_n + \frac{h}{2}K_{\underline{n,2}}\Big)$$

avança $\frac{h}{2}$

$$K_{\underline{n,4}} = f\left(t_{n+1}, \hat{y}_n + hK_{\underline{n,3}}\right)$$

combina a expansão em série de Taylor de y_{n+1} e $K_{n,i}$ para achar os coeficientes e a ordem

$K_{n,i}$ → aproximações para $f(t, y(t))$ atualizando $y(t)$

* condicionalmente estável, menos restritivo que Euler.

⇒ Método preditor-corretor: (Heun), (ponto-médio)

$$\underbrace{\hat{y}^*_{n+1}}_{} = \hat{y}_n + h f_n(t_n, \hat{y}_n) \quad \rightarrow \text{preditor (Euler explícito)}$$

$$\hat{y}_{n+1} = \hat{y}_n + \frac{h}{2} f(t_n, \hat{y}_n) + \frac{h}{2} f(t_{n+1}, \underbrace{\hat{y}^*_{n+1}}_{})$$

↳ corretor (Crank-Nicolson).

ordem de acurácia do corretor (ordem 2), com critério de estabilidade do preditor.

$\Longrightarrow$ Métodos multi-step: usam $y_n, y_{n-1}, y_{n-2} \dots$

* Adams - Bashforth: (AB3, 3 passos) $\rightarrow$ explícito
ordem 3 ou h^3

$$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = \frac{1}{12}\left(23 f_n - 16 f_{n-1} + 5 f_{n-2}\right)$$

menos estável que Runge-Kutta, mas f_{n-1} e f_{n-2} já foi calculado.

* Adams - Moulton: (AM4) $\rightarrow$ implícito.
ordem 5 ou h^5

$$\frac{\hat{y}_{n+1} - \hat{y}_n}{h} = \frac{1}{24}\left(9 f_{n+1} + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}\right)$$

mais estável que AB3 (implícito).

- obs: dá para construir um preditor-corretor com AB3 - AM4.
- obs: coeficientes vem da interpolação de Lagrange de f em t_n, t_{n-1} e t_{n-2} p/ AB3 e $t_{n+1}, t_n, t_{n-1}, t_{n-2}$ p/ AM4.