Algoritmos Numéricos

Notas de aula sobre Resolução de EDOs via métodos numéricos

1 Introdução

Nestas notas de aulas, inicialmente, serão apresentados alguns métodos para se resolver uma equação diferencial ordinária (EDO) de 1^a ordem, com valor inicial, do tipo abaixo:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

onde $f(x,y)$ é uma função definida em um domínio $D = [a = x_0, b]$.

Num segundo momento, são apresentados métodos para resolver um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1^a ordem.

2 Métodos baseados na série de Taylor

A expansão em série de Taylor de uma função $y(x)$, em torno de x_i, é dada por:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i,y_i) + \frac{1}{2}h^2y''(x_i,y_i) + \frac{1}{3!}h^3y'''(x_i,y_i) + \frac{1}{4!}h^4y^{(iv)}(x_i,y_i) + ...$$

onde x_{i+1} é um ponto vizinho de x_i (a uma distância h).

Para resolver numericamente o seguinte problema

$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

em um domínio $D = [a = x_0, x_1, ..., x_m = b]$ pode-se aproximar o valor de $y(x_{i+1})$ tomando, apenas, alguns termos da expansão de $y(x)$ em série de Taylor, em torno de x_i.

Por exemplo, ao considerar apenas termos até a derivada 3^a, tem-se um método baseado na série de Taylor de 3^a ordem.

$$y(x_{i+1}) \approx y_{i+1} = y(x_i) + hy'(x_i,y_i) + \frac{1}{2}h^2y''(x_i,y_i) + \frac{1}{3!}h^3y'''(x_i,y_i)$$

Como $y' = f(x,y)$ a expressão pode ser rescrita por

$$y(x_{i+1}) \approx y_{i+1} = y(x_i) + hf(x_i,y_i) + \frac{1}{2}h^2f'(x_i,y_i) + \frac{1}{3!}h^3f''(x_i,y_i)$$

2.1 Métodos baseados na série de Taylor de 1^a ordem

Se apenas os dois primeiros termos da expansão em série de Taylor da função $y(x)$ em torno de x_i (ou seja, termos até a derivada de 1^a ordem) forem levados em consideração, a solução numérica em x_{i+1} será dada por

$$y_{i+1} = y_i + hy'(x_i, y_i)$$

que é o método conhecido como método de **Euler**.

O método pode ser expresso usando diretamente a função $y' = f(x, y)$ sendo dado portanto via:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

2.2 Métodos baseados na série de Taylor de 2^a ordem

Se além da inclinação (a derivada 1^a) for levado em consideração, também, a curvatura (isto é, a derivada 2^a) então haverá uma melhor aproximação do que aquela que usa apenas a derivada 1^a. Cada passo será dado por

$$y_{i+1} = y_i + hy'(x_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2 y''(x_i, y_i) = y_i + hf(x_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2 f'(x_i, y_i).$$

Este método é chamado de método baseado na série de Taylor de 2^a ordem.

A curvatura ($y'' = f'$) da função solução pode ser obtida derivando y', isto é, derivando a função $f(x, y)$ fornecida no problema. Portanto, em um ponto x_i

$$y_i'' = f'(x_i, y_i) = (\frac{df}{dx})_i.$$

Usando a regra da cadeia, sabe-se que

$$(\frac{df}{dx})_i = (\frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dx})_i + (\frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx})_i.$$

Como

$$\frac{dx}{dx} = 1, (\frac{dy}{dx})_i = f_i$$

então pode-se escrever que

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2 f'(x_i, y_i).$$

Ou, ainda, que

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2((\frac{\partial f}{\partial x})_i + f_i(\frac{\partial f}{\partial y})_i) \tag{1}$$

3 Métodos de Runge Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são métodos que não necessitam do cálculo das derivadas de ordem maior que 1. Eles obtêm aproximações da solução com a mesma ordem de erro que os métodos baseados na série de Taylor avaliando $y' = f(x,y)$ diversas vezes.

Para calcular a aproximação da solução em x_{i+1} a ideia é fazer várias estimativas da inclinação, isto é, calcular $f(x,y) = y'$ em vários pontos intermediários no passo.

Para cada método baseado na série de Taylor de ordem k há um método de Runge-Kutta que o equivale em precisão.

O desenvolvimento de cada método de ordem k é baseado justamente em se ter uma expressão com erro da mesma ordem de grandeza de um método baseado na série de Taylor de ordem k.

3.1 Métodos de Runge Kutta 2^a ordem

Os métodos de Runge-Kutta de 2^a ordem, por exemplo, calculam duas inclinações (k_1 e k_2) para efetuar o passo. Uma parte do passo (parte a_1) com inclinação k_1, inclinação calculada no ponto de partida do passo (x_i, y_i), e a outra parte do passo (a_2) com inclinação k_2, calculada em um outro ponto $(x_i + p_1 h, y_i + q_1 h k_1)$.
Assim, o método é dado por

$$y_{i+1} = y_i + a_1 h k_1 + a_2 h k_2$$

onde $k_1 = f(x_i, y_i)$ e $k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_1 h k_1)$ são as derivadas nos 2 pontos.

Um método bastante conhecido é aquele que anda meio passo ($a_1 = 1/2$) com inclinação k_1 e a outra metade ($a_2 = 1/2$) com uma outra inclinação (k_2), calculada no ponto vizinho. Assim, neste caso, o método é dado por

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} k_1 + \frac{h}{2} k_2$$

onde

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + h, y_i + h k_1)$$

Que pode, também, ser expresso por

$$y_{i+1} = y_i + h(\frac{k_1 + k_2}{2})$$

Ou seja, neste último "formato" pode-se pensar no método como partindo de y_i e dando um único passo com uma inclinação média entre as inclinações k_1 e k_2.

Equivalência do erro nos métodos de Runge-Kutta e nos métodos da série de Taylor

O desenvolvimento do método Runge-Kutta é feito exigindo se ter uma expressão com erro da mesma ordem de grandeza que o erro do método baseado na série de Taylor de 2^a ordem. A demonstração detalhada do desenvolvimento do métodos de Runge-Kutta de 2^a ordem será apresentada abaixo.

Parte-se de uma expressão genérica de Runge-Kutta de 2^a ordem (onde o ponto intermediário e as proporções a_1 e a_2 e p_1 e q_1, ainda, não foram determinados), ou seja, parte-se de uma expressão do tipo:

$$y_{i+1} = y_i + a_1 h f(x_i, y_i) + a_2 h f(x_i + p_1 h, y_i + q_1 h k_1) \tag{2}$$

e verifica-se quais são as condições para que este método (equação 2) tenha erro da mesma ordem de grandeza do método baseado na série de Taylor de 2^a ordem (equação 1).

Para fazer a comparação da expressão genérica de Runge- Kutta de 2^a ordem com a do método de baseado na série de Taylor de 2^a ordem, é importante relembrar a expansão em série de Taylor de uma função $f(x, y)$ em torno do ponto (x_i, y_i).

A expansão de uma função de duas variáveis em série de Taylor
A expansão de uma função $f(x, y)$ em série de Taylor em torno do ponto (x_i, y_i) é dada por

$$f(x_i + h_x, y_i + hy) =$$
$$f(x_i, y_i) + h_x(\frac{\partial f}{\partial x})_i + h_y(\frac{\partial f}{\partial y})_i + \frac{1}{2}[(h_x)^2(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2})_i + 2h_x h_y(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y})_i + hy^2(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2})_i] + ...$$

Se, desta expansão (série infinita), forem tomados apenas os termos de 1^a ordem, tem-se que

$$f(x_i + h_x, y_i + hy) \approx f(x_i, y_i) + h_x(\frac{\partial f}{\partial x})_i + h_y(\frac{\partial f}{\partial y})_i$$

Assim, o método de Runge-Kutta de 2^a ordem (genérico), é dado por

$$y_{i+1} = y_i + a_1 h f(x_i, y_i) + a_2[h f(x_i + p_1 h, y_i + q_1 h k_1)]$$

que pode ser aproximado por

$$y_{i+1} = y_i + a_1 h f(x_i, y_i) + a_2 h[f(x_i, y_i) + p_1 h(\frac{\partial f}{\partial x})_i + q_1 h(\frac{\partial f}{\partial y})_i k_1] \tag{3}$$

onde os termos de ordem maior que 1 (os termos da expansão de $f(x, y)$ em série de Taylor que são multiplicados por $(p_1 h)^2$, $(q_1 h)^2$ e $(p_1 h)(q_1 h)$) e de ordem maior) foram desconsiderados.

Reescrevendo a equação (3)

$$y_{i+1} = y_i + a_1 h f(x_i, y_i) + a_2 h f(x_i, y_i) + a_2 h p_1 h(\frac{\partial f}{\partial x})_i + a_2 h q_1 h(\frac{\partial f}{\partial y})_i k_1]$$

e, agrupando os termos em h e h^2, tem-se

$$y_{i+1} = y_i + h(a_1 + a_2)[f(x_i, y_i)] + h^2[a_2 p_1(\frac{\partial f}{\partial x})_i + a_2 q_1(\frac{\partial f}{\partial y})_i k_1] \tag{4}$$

Em seguida, compara-se a equação (4) com a expressão do método baseado na série de Taylor 2^a ordem (equação 1), reescrita abaixo,

$$y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2 f'(x_i, y_i) = y_i + h f(x_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2((\frac{\partial f}{\partial x})_i + f(x_i, y_i)(\frac{\partial f}{\partial y})_i)$$

Para que os termos em h e h^2 de (4) e (1) sejam iguais é preciso que

$$(a_1 + a_2) = 1$$

$$(a_2 p_1) = 1/2$$

$$(a_2 q_1) = 1/2.$$

O que nos fornece 3 restrições e quatro parâmetros (incógnitas): há, portanto, um grau de liberdade. Escolhendo, por exemplo, $a_1 = 1/2$ (caso com simétria no passo) então, pelas restrições, tem-se $a_2 = 1/2$, $p_1 = 1$ e $q_1 = 1$. Esta escolha resulta no método de Runge-Kutta de 2^a ordem descrito no início da sessão e é chamado de Euler melhorado. Outras escolhas (para um dos 4 parâmentros) resultam em outros métodos de Runge-Kutta de 2^a ordem.

A demonstração do desenvolvimento dos métodos de Runge-Kutta de 2^a ordem pode ser, tembém, vista no livro do Chapra e Canale (na página 605, 5^a edição). Uma outra demostração pode, ainda, ser encontrada nas páginas 328 e 329, do livro do Frederico Campos (2^a edição).

3.2 Métodos de Runge Kutta 4^a ordem

Os métodos de Runge-Kutta de 4^a ordem calculam quatro inclinações a cada passo, ou seja, calculam 4 derivadas por passo (k_1 e k_2, k_3 e k_4).
Um dos métodos mais conhecidos é dado por

$$y_{i+1} = y_i + h(\frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}).$$

onde

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1)$$
$$k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2)$$
$$k_4 = f(x_{i+1}, y_i + hk_3)$$

Este método tem erro da mesma ordem de grandeza que o erro do método baseado na série de Taylor 4^a ordem.

Os métodos de Runge-Kutta de 4^a e 5^a ordem (cuja expressão pode ser vista no livro de Chapra e Canale) são os métodos mais empregados na prática já que têm grande precisão (o erro do método de 4^a ordem é proporcional a h^4 e erro do método de 5^a ordem é proporcional a h^5) com custo computacional “baixo”. O custo é, essencialmente, o custo da avaliação da função $f(x, y)$, que é avaliada 4 vezes, por passo, nos métodos 4^a ordem e 5 vezes, por passo, nos métodos 5^a ordem.

4 Métodos para resolver sistemas de EDOS de 1^a ordem

4.1 Sistemas de equações diferenciais de 1^a ordem

Seja o sistema de equações diferenciais de 1^a ordem, com valores iniciais, dado abaixo

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = y_1' = f_1(x, y_1, y_2, ..., y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} = y_2' = f_2(x, y_1, y_2, ..., y_n) \\ \vdots \\ \frac{dy_n}{dx} = y_n' = f_n(x, y_1, y_2, ..., y_n) \\ y_1(x_0) = y_{1,0} \\ y_2(x_0) = y_{2,0} \\ \vdots \\ y_n(x_0) = y_{n,0} \end{cases}$$

onde as $f_i(x, y_1, y_2, ..., y_n)$, para $1 \leq i \leq n$, são funções definidas no domínio $D = [a = x_0, b]$, onde se pretende conhecer as soluções.

Para se resolver o sistema de equações diferenciais (ou seja, determinar as n funções y_i) pode-se aplicar qualquer um dos métodos descritos até aqui (pois são métodos que resolvem PVIs de 1^a ordem). Apenas o método de Euler será descrito.

4.2 Método de Euler para resolver sistemas de EDO's de 1^a ordem

O método de Euler para se resolver o sistema de equações diferenciais de 1^a ordem, com valores iniciais, é dado por

$$y_{1,i+1} = y_{1,i} + hf_1(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, ..., y_{n,i})$$

$$y_{2,i+1} = y_{2,i} + hf_2(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, ..., y_{n,i})$$

$$\vdots$$

$$y_{n,i+1} = y_{n,i} + hf_n(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, ..., y_{n,i})$$