

Matemática Computacional

Cap. 6 - Resolução numérica de equações diferenciais ordinárias

Sumário

1	Motivação e recursos computacionais	2
2	Problemas de valor inicial	5
2.1	Teorema de Picard-Lindelöf. Aproximações de Picard	5
2.2	Método de Euler explícito	7
2.2.1	Caso escalar	7
2.2.2	Caso vetorial: sistemas de EDOs	12
2.2.3	Interpretações do método de Euler	15
2.3	Métodos de Taylor. Caso escalar	18
2.4	Métodos implícitos e métodos de predição-correção. Caso escalar	19
2.5	Métodos de Runge-Kutta. Caso escalar	21

1 Motivação e recursos computacionais

Consideremos dois problemas práticos que irão motivar a apresentação de recursos computacionais disponíveis para a resolução de sistemas modelados por equações diferenciais ordinárias bem como dos conceitos matemáticos relativos aos métodos numéricos que serão desenvolvidos a seguir.

Problema 1: Numa comunidade de 800 crianças suscetíveis de contrair varicela, uma delas é diagnosticada com esta doença. Suponhamos que a propagação da doença é modelada pelo sistema de equações diferenciais (modelo SIR)¹

$$\begin{cases} S'(t) = -0.001 S(t) I(t), \\ I'(t) = 0.001 S(t) I(t) - 0.3 I(t), \\ R'(t) = 0.3 I(t), t > 0 \end{cases}$$

onde $S(t)$ é o número de crianças suscetíveis de contrair a doença no momento t , $I(t)$ é o número de infectados na mesma altura, e que podem propagar a doença, e $R(t)$ é o número de recuperados, ou seja, que já contraíram a doença e adquiriram imunidade.

Pretende-se estudar a evolução de (S, I, R) desde o início da epidemia até que esta termina. Começamos por referir alguns recursos computacionais que nos permitem resolver (numericamente) problemas de valor inicial para sistemas de equações diferenciais ordinárias:

Problema 2: De acordo com um modelo de dinâmica de relações [6] ("dynamical models of love"), a evolução dos sentimentos entre duas pessoas, digamos Romeu (R) e Julieta (J), é descrita por um sistema de duas EDOs não-lineares

$$\begin{cases} R'(t) = aR(t) + bJ(t)(1 - |J(t)|), \\ J'(t) = cR(t)(1 - |R(t)|) + dJ(t), t > 0. \end{cases}$$

Neste sistema, $R(t)$ e $J(t)$ representam os níveis de satisfação de Romeu e de Julieta com a sua relação (no dia t), e os sinais dos coeficientes a , b , c , d definem os seus estilos românticos. Por exemplo, Romeu pode ser ansioso/ávido ($a > 0$ e $b > 0$), narcisista ($a > 0$ e $b < 0$), cauteloso ($a < 0$ e $b > 0$) ou tímido ($a < 0$ e $b < 0$). A dinâmica é impulsionada apenas por interação entre os estados emocionais de Romeu e Julieta e as reações daí decorrentes.

¹Os modelos epidémicos têm um grande impacto social, pois fornecem informações para as autoridades de saúde, com a finalidade de melhor compreender os processos de transmissão de doenças, e servem também para prever e auxiliar na decisão sobre as estratégias de controlo de epidemias mais adequadas.

Pretende-se prever a dinâmica da relação de Romeu e Julieta durante (pelo menos) 1 ano, partindo de uma situação de primeiro encontro descrita pelos valores $R(0) = 5.5$ e $J(0) = 4.5$, entre duas pessoas cautelosas caracterizadas por $a = -0.02$, $b = 0.05$, $c = -0.03$, $d = 0.01$.

- No MATHEMATICA a rotina `NDSolve` permite a **resolução numérica de equações diferenciais ordinárias**.
- No MATLAB temos `ode23`, `ode45`, ... como implementação de certos métodos de Runge Kutta (ver Secção 2.5)
- No PYTHON, `odeint` está disponível no pacote `scipy.integrate`.

Exemplo 1.1. *Resolução do Problema 1 recorrendo ao MATHEMATICA*

```
In[1]:= sol = NDSolve[{S'(t)=-0.001S(t)Y(t),
                      Y'(t)=0.001S(t)Y(t)-0.3Y(t),
                      R'(t)=0.3 Y(t),
                      S(0)=799,Y(0)=1,R(0)=0},{S,Y,R},{t,40}]
```

```
Out[1]:= {{ S -> InterpolatingFunction[ (0. 40.),<>],
           Y -> InterpolatingFunction[ (0. 40.),<>],
           R -> InterpolatingFunction[ (0. 40.),<>] }}
```

```
In[2]:= Plot[Evaluate[{S(t),Y(t),R(t)} /. sol,{t,0,40}], Frame->True,
             PlotLegends -> {Suscetíveis,Infetados,Recuperados}]
```

```
Out[2]:= (ver Fig. 1)
```

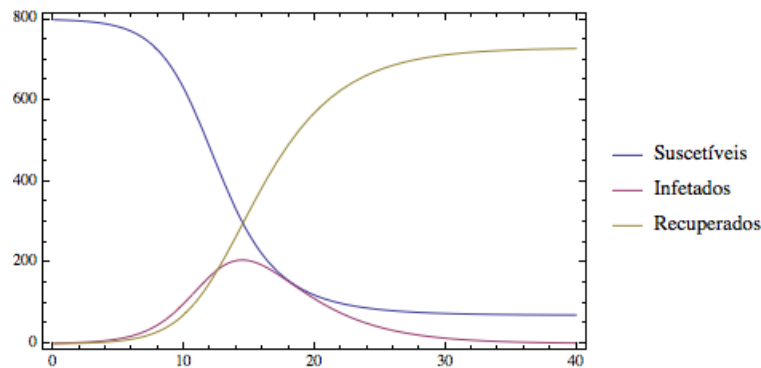


Figura 1: Evolução da propagação da varicela

Exemplo 1.2. *Resolução do Problema 2 recorrendo ao MATHEMATICA*

```
In[1]:= a=-0.02;b=0.05;c=-0.03;d=0.01;
        s1=NDSolve[{R'[t]==a*R[t]+b*J[t]*(1-Abs[J[t]]),
                    J'[t]==c*R[t]*(1-Abs[R[t]])+d*J[t],
                    R[0]==5.5,J[0]==4.5},{R,J},{t,0,570}]
```

```
Out[1]:=
        {{R->InterpolatingFunction[Domain: {{0.,570.}}Output: scalar],
         J->InterpolatingFunction[Domain: {{0.,570.}}Output: scalar]}}
```

```
In[2]:= Plot[Evaluate[{R(t),J(t)} /. s1],{t,0,570},
            PlotStyle -> Automatic, PlotLegends -> {Romeu,Julieta}]
```

```
Out[2]:= (ver Fig. 2)
```

Algumas questões que pretendemos esclarecer ao longo deste capítulo:

- O que está na base da implementação do comando `NDSolve`?
- Por que razão a solução é fornecida em termos de `InterpolatingFunction`?
- O que são métodos de Runge Kutta (relacionados com `ode23`, `ode45`)?

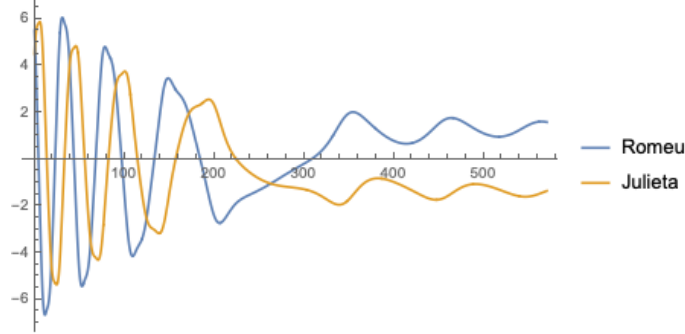


Figura 2: Romeu cauteloso $a = -0.02$, $b = 0.05$; Julieta cautelosa $c = -0.03$, $d = 0.01$

2 Problemas de valor inicial

2.1 Teorema de Picard-Lindelöf. Aproximações de Picard

Consideremos o *problema de valor inicial* genérico

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \\ y(t_0) = y_0. \end{cases} \quad (1)$$

O Teorema de Picard-Lindelöf fornece

- existência e unicidade de solução (local) para o problema (1) com base no Teorema do ponto fixo de Banach;
- um processo iterativo para aproximar a solução de (1).

Teorema 2.1. (*Picard-Lindelöf*) *Seja $D \subset \mathbb{R}^{d+1}$ um domínio e $f : D \rightarrow \mathbb{R}^d$ uma função contínua satisfazendo uma condição de Lipschitz*

$$\exists L_f \geq 0 : \|f(t, y) - f(t, z)\| \leq L_f \|y - z\|, \forall (t, y), (t, z) \in D.$$

Então para cada par de dados iniciais $(t_0, y_0) \in D$, existe um intervalo $[t_0 - a, t_0 + a]$, $a > 0$, tal que o problema (1) tem solução única.

No enunciado do Teorema 2.1, $\|\cdot\|$ representa uma norma em \mathbb{R}^d . No que se segue, usaremos a seguinte notação: $\|u\|_{C([t_0-a, t_0+a])} := \max_{t \in [t_0-a, t_0+a]} \|u(t)\|$ para a norma de funções. A demonstração do Teorema 2.1 assenta no Teorema do ponto fixo de Banach. Mostra-se que a sucessão de funções $\{y^{(k)}\}_{k \in \mathbb{N}}$ definida recursivamente por

$$\begin{cases} y^{(0)}(t) = y_0, \\ y^{(k+1)}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(s, y^{(k)}(s)) ds, \quad |t - t_0| \leq a, \quad k = 0, 1, \dots, \end{cases}$$

converge uniformemente no intervalo $[t_0 - a, t_0 + a]$ para a solução do problema (1) e tem-se a seguinte estimativa de erro

$$\|y - y^{(k)}\|_{C([t_0-a, t_0+a])} \leq \frac{aL_f}{1 - aL_f} \|y^{(k)} - y^{(k-1)}\|_{C([t_0-a, t_0+a])}, k = 1, 2, \dots$$

onde se supõe $aL_f < 1$ (condição de contratividade para se poder aplicar o Teorema do ponto fixo de Banach).

Uma versão global do Teorema de Picard-Lindelöf é:

Teorema 2.2. *Seja I um intervalo compacto de \mathbb{R} e $f : I \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ uma função contínua satisfazendo uma condição de Lipschitz*

$$\exists L_f \geq 0 : \|f(t, y) - f(t, z)\| \leq L_f \|y - z\|, \forall (t, y), (t, z) \in I \times \mathbb{R}^d.$$

Então para cada par de dados iniciais $(t_0, y_0) \in I \times \mathbb{R}^d$, a solução $y = y(t)$ do problema de Cauchy (1) existe, é única e pertence a $C^1(I)$.

Demonstração. Sabemos que nas condições do enunciado, existe uma e uma só solução local. Logo, basta mostrar que existe uma constante $C > 0$ tal que

$$\|y(t)\| \leq C, \forall t \in I.$$

Tem-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|y(t)\|^2 &= f(t, y(t)) \cdot y(t) \leq \|f(t, y(t))\| \|y(t)\| \\ &\leq \|f(t, y(t)) - f(t, y_0)\| \|y(t)\| + \|f(t, y_0)\| \|y(t)\| \\ &\leq L_f (\|y(t)\| + \|y_0\| + \max_{t \in I} \|f(t, y_0)\|) \|y(t)\| \\ &\leq 2L_f \|y(t)\|^2 + \frac{1}{2} \left(\|y_0\|^2 + \max_{t \in I} \|f(t, y_0)\|^2 \right). \end{aligned}$$

Aplicando a desigualdade de Gronwall a

$$\|y(t)\|^2 \leq \|y_0\|^2(1 + t) + Mt + 4L_f \int_0^t \|y(s)\|^2 ds, \quad M := \max_{t \in I} \|f(t, y_0)\|^2,$$

obtem-se

$$\|y(t)\|^2 \leq (\|y_0\|^2(1 + t) + Mt) \exp(4L_f t), \forall t \in I.$$

Isto mostra que a solução fica definida em todo o intervalo I . □

2.2 Método de Euler explícito

2.2.1 Caso escalar

Suponhamos que estamos nas condições do Teorema de Picard-Lindelöf e consideremos o problema de Cauchy para a equação diferencial ordinária, i.e., a solução de (1) para $t > t_0$, dado o seu estado no instante inicial $t = t_0$ (frequentemente t_0 é tomado igual a 0).

Dado $h > 0$, consideremos os pontos equidistantes

$$t_i = t_0 + ih, \quad i = 0, 1, \dots$$

pertencentes a um intervalo onde exista uma e uma só solução de (1). Começa-se por substituir a derivada $y'(t)$ no intervalo $[t_0, t_0 + h]$ por $y'(t_0) = f(t_0, y_0)$, o que em termos geométricos corresponde a substituir a solução pela reta tangente ao gráfico de y no ponto inicial t_0 onde é conhecido $y(t_0) = y_0$. Obtém-se então a seguinte aproximação

$$y(t_1) = y(t_0 + h) \approx y_0 + hf(t_0, y_0)$$

e pomos

$$y_1 := y_0 + hf(t_0, y_0).$$

Continuando este raciocínio, obtemos aproximações para $y(t_i)$, $i = 2, 3, \dots$ através de

$$y(t_i) \approx y_i := y_{i-1} + hf(t_{i-1}, y_{i-1})$$

onde se assume que já foi calculada a aproximação y_{i-1} para $y(t_{i-1})$.

O *método de Euler* (explícito ou progressivo) para a solução numérica do problema de valor inicial (1) consiste em fixar um passo h e construir aproximações y_i , $i = 1, 2, \dots$, para a solução $y(t_i)$ nos pontos $t_i = t_0 + ih$, $i = 1, 2, \dots$, através do processo recursivo

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Tendo obtido a solução numérica $\{y_0, y_1, \dots, y_N\}$, pode-se construir uma função aproximante $y_h = y_h(t)$ no intervalo $[t_0, t_N]$ através de interpolação dos pares (t_i, y_i) , $i = 0, \dots, N$. Em geral é utilizada interpolação seccionalmente linear, designada por interpolação por splines lineares. Isto significa que a função y_h é contínua em $[t_0, t_N]$ e, em cada intervalo $[t_i, t_{i+1}]$, y_h é um polinómio de grau ≤ 1 , tal que $y_h(t_i) = y_i$ e $y_h(t_{i+1}) = y_{i+1}$.

Vamos agora estudar o erro que se comete ao utilizar o método de Euler para aproximar a solução de (1).

Teorema 2.3. *Sejam y_1, y_2, \dots, y_N valores gerados pelo método de Euler para a aproximação de (1) nos pontos equidistantes t_1, \dots, t_N . Se f é uma função nas condições do Teorema 2.2 com $I = [t_0, t_N]$ (e $d = 1$, para simplificar), e se $y \in C^2([t_0, t_N])$ com $\max_{t \in [t_0, t_N]} |y''(t)| \leq M$, então*

$$|y(t_i) - y_i| \leq \frac{hM}{2L_f}(e^{(t_i-t_0)L_f} - 1), \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Demonstração. Seja $e_k := y(t_k) - y_k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$). Atendendo à fórmula de Taylor

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2}y''(\theta_i), \quad t_i < \theta_i < t_{i+1},$$

tem-se

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2}y''(\theta_i), \quad t_i < \theta_i < t_{i+1}.$$

Subtraindo membro a membro a expressão do método de Euler, obtém-se

$$e_{i+1} = e_i + h(f(t_i, y(t_i)) - f(t_i, y_i)) + \frac{h^2}{2}y''(\theta_i)$$

donde

$$|e_{i+1}| \leq |e_i| + hL_f|e_i| + \frac{h^2}{2}M.$$

Consideremos então

$$|e_{i+1}| \leq (1 + hL_f)|e_i| + \frac{h^2}{2}M, \quad i = 0, 1, \dots, N,$$

com $e_0 = 0$, que podemos analisar recorrendo à equação às diferenças

$$\begin{cases} a_0 = 0, \\ a_{i+1} = (1 + hL_f)a_i + \frac{h^2M}{2}, \quad i = 0, 1, \dots \end{cases}$$

Esta equação tem solução²

$$a_i = \frac{hM}{2L_f}(1 + hL_f)^i - \frac{hM}{2L_f}.$$

Tem-se

$$|e_i| \leq a_i, \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, N\},$$

²Recordamos que a solução geral é da forma $a_i = C_1(1 + hL_f)^i + C_2$ e que as constantes C_1 e C_2 são obtidas a partir das condições $C_1 + C_2 = 0$ e $C_1(1 + hL_f) + C_2 = \frac{h^2M}{2}$, o que dá $C_1 = \frac{hM}{2L_f}$ e $C_2 = -\frac{hM}{2L_f}$.

pelo que

$$|e_i| \leq \frac{hM}{2L_f}((1 + hL_f)^i - 1), \forall i \in \{1, \dots, N\},$$

Como $e^x \geq 1 + x$, para $x \geq 0$, tem-se $(1 + hL_f)^i \leq e^{hL_f i}$, $i = 0, 1, \dots$, pelo que

$$|e_i| \leq \frac{hM}{2L_f}(e^{ihL_f} - 1), \forall i \in \{1, \dots, N\}.$$

Atendendo a que $t_i = t_0 + ih \Leftrightarrow ih = t_i - t_0$ vem

$$|e_i| \leq \frac{hM}{2L_f}(e^{(t_i - t_0)L_f} - 1), \forall i \in \{1, \dots, N\}.$$

□

Pelo Teorema anterior, tem-se a seguinte fórmula de majoração do erro das aproximações fornecidas pelo método de Euler:

$$\max_{i \in \{1, \dots, N\}} |y(t_i) - y_i| \leq \frac{M}{2L_f}(e^{(t_N - t_0)L_f} - 1)h,$$

donde se conclui convergência quando $h \rightarrow 0$ (mantendo Nh fixo). Além disso, como existe C independente de h tal que

$$\max_{i \in \{1, \dots, N\}} |y(t_i) - y_i| \leq Ch,$$

diz-se que o método de Euler tem *ordem 1*.

Relativamente à implementação computacional do método de Euler, podemos definir a seguinte função no MATHEMATICA

```
MetEuler[a_, b_, f_, y0_, n_] :=
Module[{h, t, yprox, i},
  h = (b - a)/n;
  t = Range[a, b, h];
  yprox = ConstantArray[0, n + 1];
  yprox[[1]] = y0;
  For[i = 1, i < n + 1, i++,
    yprox[[i + 1]] = yprox[[i]] + h*f[t[[i]], yprox[[i]]];
  yprox]
```

enquanto que em MATLAB temos:

```
function yaprox = met_Euler(a,b,f,y0,n)
h=(b-a)/n;
t=linspace(a,b,n+1);
yaprox=zeros(1,n+1);
yaprox(1)=y0;
for i=1:n
    yaprox(i+1)=yaprox(i)+h*f(t(i),yaprox(i));
end;
end
```

Exemplo 2.1. *Vamos aplicar o programa met_Euler ao problema*

$$\begin{cases} y'(t) = 1 - t^2 + y(t), & t \geq 0 \\ y(0) = 0.5 \end{cases}$$

com os seguintes dados e representações no MATLAB:

$$h = 0.2 \text{ ou } n = 5$$

Em MATLAB

$$t_i = 0.2i, i = 0 : 5$$

$$t(i) = 0.2(i - 1), i = 1 : 6$$

$$y(t_i) \approx y_i, i = 0 : 5$$

$$y(t(i)) \approx yEuler(i)$$

Executamos

```
>> yEuler = met_Euler(0,1,@(x,y)1-x^2+y,0.5,5)
```

obtendo

```
yEuler = 0.5    0.8    1.152    1.5504    1.98848    2.458176
```

Estes resultados são apresentados na Fig.3 (pontos a azul), onde se compara a solução numérica (traçado laranja, resultado de interpolação linear seccional dos pontos a azul) com a solução exata (curva amarela).

Diminuindo o passo h para metade:

$$h = 0.1$$

Em MATLAB

$$t_i = 0.1i, i = 0 : 10$$

$$t(i) = 0.1(i - 1), i = 1 : 11$$

$$y(t_i) \approx y_i, i = 0 : 10$$

$$y(t(i)) \approx yEuler(i)$$

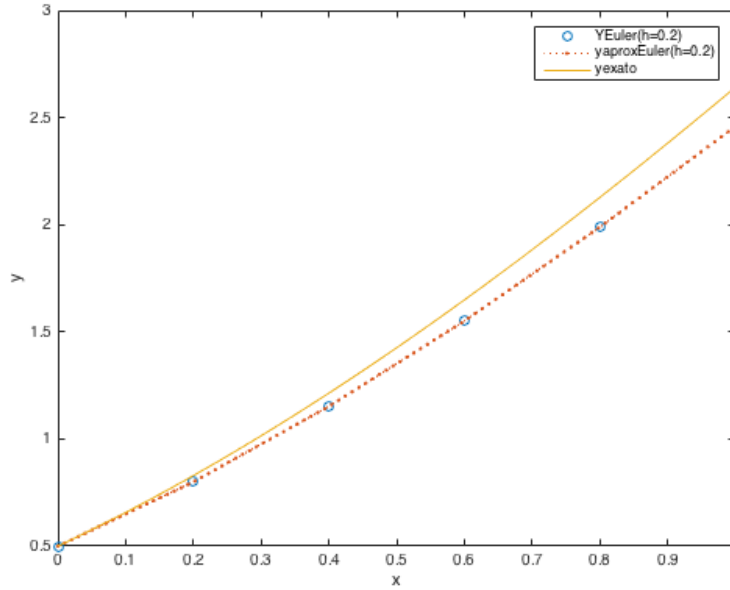


Figura 3: Gráficos de y e de y_h com $h = 0.2$

```
>> yEuler = met_Euler(0,1,@(x,y)1-x^2+y,0.5,10)
```

```
yEuler = 0.5    0.65    0.814    0.9914    1.18154    1.383694    1.5970634
          1.82076974    2.053846714    2.2952313854    2.54375452394
```

obtem-se uma aproximação mais precisa (ver Fig. 4), como também se pode comprovar na tabela que se mostra a seguir

t	$y_h (h = 0.2)$	$y_h (h = 0.1)$	$y (exato)$
0	0.5	0.5	0.5
0.2	0.8	0.814	0.829298620919915
0.4	1.152	1.18154	1.21408765117936
0.6	1.5504	1.5970634	1.64894059980475
0.8	1.98848	2.053846714	2.12722953575377
1.0	2.458176	2.54375452394	2.64085908577048

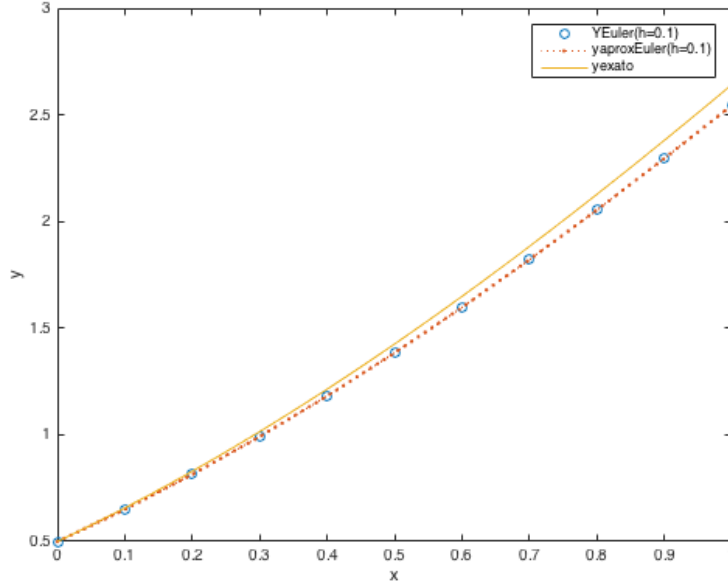


Figura 4: Gráficos de y e de y_h com $h = 0.1$

2.2.2 Caso vetorial: sistemas de EDOs

Voltamos agora ao Problema 2 (relação de Romeu e Julieta). Pretende-se prever a dinâmica da relação de Romeu e Julieta durante (pelo menos) 1 ano, partindo de uma situação de primeiro encontro descrita pelos valores $R(0) = 2.5$ e $J(0) = 1.5$.

De acordo com a referência [6], consideramos vários casos, correspondendo às diferentes personalidades de Romeu e Julieta:

Caso 1: $a = -0.02$, $b = 0.05$, $c = -0.03$, $d = 0.01$;

Caso 2: $a = -0.02$, $b = 0.05$, $c = -0.03$, $d = -0.01$;

Caso 3: $a = -0.02$, $b = 0.05$, $c = 0.03$, $d = -0.01$;

Caso 4: $a = -0.01$, $b = 0.05$, $c = -0.03$, $d = 0.01$.

Definimos a seguinte função vetorial que descreve o sistema de equações diferenciais correspondente à dinâmica da relação

$$F : [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$$

$$F(t, Y) = F\left(t, \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} aY_1 + bY_2(1 - |Y_2|) \\ cY_1(1 - |Y_1|) + dY_2 \end{bmatrix}$$

e o dado inicial

$$Y_0 = \begin{bmatrix} Y_{01} \\ Y_{02} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1.5 \end{bmatrix}.$$

Para resolver sistemas de equações diferenciais ordinárias, podemos usar a seguinte implementação vetorial do método de Euler:

```
function [Yapprox]=Euler_method(f,a,b,Y0,n)
t=linspace(a,b,n+1);
Yapprox=zeros(length(Y0),n+1);
Yapprox(:,1)=Y0;
h=(b-a)/n;
for i=2:n+1
Yapprox(:,i)=Yapprox(:,i-1)+h*f(t(i-1),Yapprox(:,i-1));
end;
end
```

Vamos criar um script para resolver este problema vetorial, recorrendo ao programa MATLAB onde já se implementou o método de Euler:

```
f_RJ = @(a,b,c,d) (@(t,Y) [a*Y(1)+b*Y(2)*(1-abs(Y(2))); ...
                           c*Y(1)*(1-abs(Y(1)))+d*Y(2)]);
Y0 = [2.5; 1.5];
t_final = 600;
pontos = 0:0.05:t_final;
evol = Euler_method(f_RJ(-0.02,0.05,-0.03,-0.01), ...
                    0,t_final,Y0,t_final*20);
evolRomeu = evol(1,:); evolJulieta = evol(2,:);
figure();
hold on;
plot(pontos, evolRomeu, 'Color', 'blue');
plot(pontos, evolJulieta, 'Color', 'red');
legend('Romeu', 'Julieta');
xlabel('tempo'); ylabel('sentimentos')
```

Neste script, os valores de a , ..., d referem-se ao Caso 1. A execução do script produziu o output mostrado na Fig. 5.

Note-se que $(R, J) = (0, 0)$ é uma solução estacionária do sistema de EDOs, mais con-

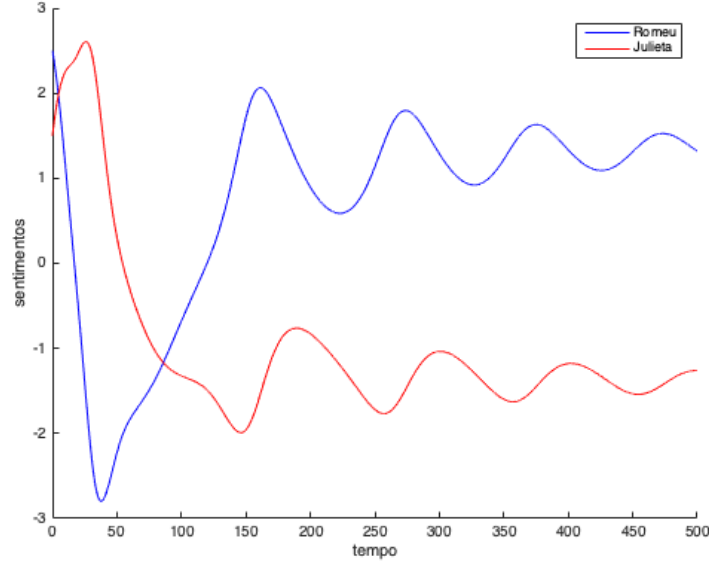


Figura 5: Simulação do Caso 1.

cretamente, $(R, J) = (0, 0)$ é a solução trivial de

$$\begin{cases} aR + bJ(1 - |J|) = 0, \\ cR(1 - |R|) + dJ = 0. \end{cases}$$

Este comportamento é ilustrado na Fig. 6 e verifica-se no Caso 2.

Na Fig. 7 vemos outra situação de equilíbrio do sistema (começa a manifestar-se quando t fica muito grande) que corresponde a outra solução do problema estacionário

$$\begin{cases} aR + bJ(1 - |J|) = 0, \\ cR(1 - |R|) + dJ = 0. \end{cases}$$

Para os valores dos parâmetros fornecidos no Caso 3, tem-se

$$\begin{cases} -2R + 5J(1 - |J|) = 0, \\ 3R(1 - |R|) - J = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} -2R + 15R(1 - |R|)(1 - 3|R(1 - |R|)|) = 0, \\ J = 3R(1 - |R|). \end{cases}$$

A equação

$$-2R + 15R(1 - |R|)(1 - 3|R(1 - |R|)|) = 0$$

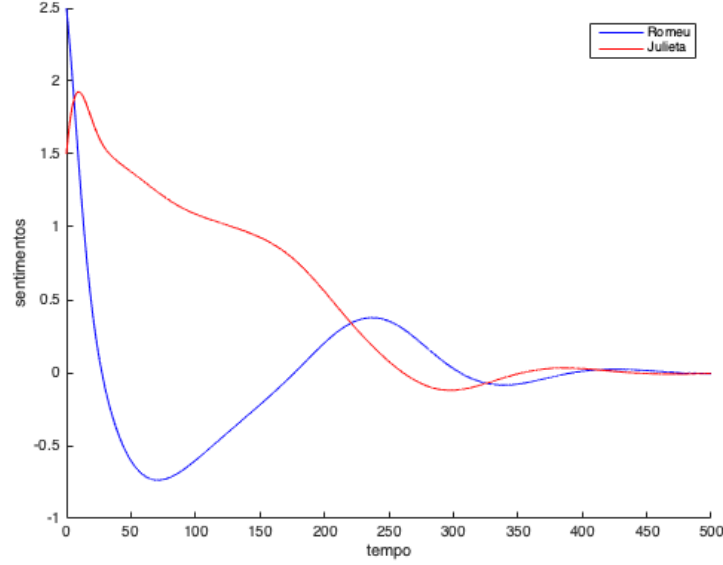


Figura 6: Caso 2, em que se observa convergência (quando $t \rightarrow \infty$) para uma situação de equilíbrio caracterizada por $(R, J) = (0, 0)$.

além da solução trivial $R = 0$, tem uma solução no intervalo $(0.3, 1)^3$ a qual pode ser aproximada pelo método da bisseção, Newton, Steffensen, etc. Obtém-se $R = 0.471732234954834$ e depois usa-se a equação

$$J = 3R(1 - |R|)$$

para obter $J = 0.747602800378054$.

2.2.3 Interpretações do método de Euler

Apresentamos agora várias interpretações do método de Euler, as quais poderão motivar a dedução de outros métodos. A seguir o nosso objetivo será deduzir métodos de ordem superior a 1, com fácil implementação computacional.

1. Fazendo a *aproximação da derivada por uma diferença dividida progressiva*

$$y'(t_i) \simeq \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{t_{i+1} - t_i} = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h}$$

³Há também uma raiz negativa, simétrica desta.

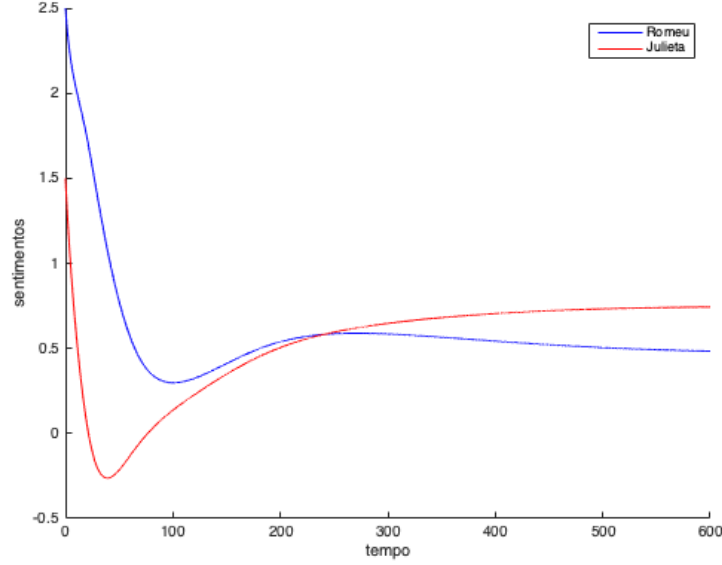


Figura 7: No Caso 3, há convergência para $(R, J) = (0.471732..., 0.74760280...)$.

e atendendo a que, pela própria equação, se tem $y'(t_i) = f(t_i, y(t_i))$, obtém-se

$$\frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} \simeq f(t_i, y(t_i)).$$

o que conduz ao esquema (2).

2. Através da *integração da equação diferencial* obtém-se

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'(t)dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))dt \iff y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))dt$$

e recorrendo à *integração numérica*, por exemplo, à regra do retângulo à esquerda para fazer a aproximação

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))dt \simeq (t_{i+1} - t_i)f(t_i, y(t_i)) = hf(t_i, y(t_i))$$

vem

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) \simeq hf(t_i, y(t_i)).$$

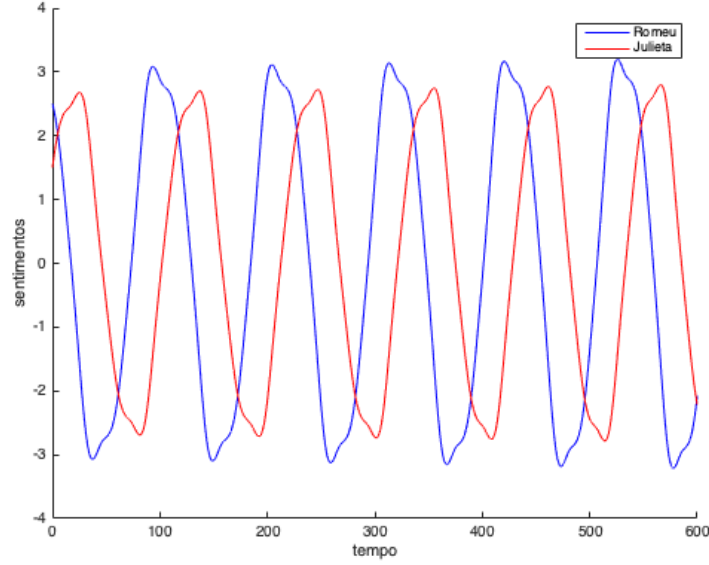


Figura 8: No Caso 4, a solução apresenta um comportamento periódico, traduzindo sentimentos que alternam e se repetem com a mesma frequência ao longo do tempo...

3. Pela *fórmula de Taylor* tem-se

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2}y''(\theta_i) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2}y''(\theta_i), \quad t_i < \theta_i < t_{i+1},$$

e desprezando o termo $\frac{h^2}{2}y''(\theta_i)$, obtém-se

$$y(t_{i+1}) \approx y(t_i) + hy'(t_i) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i))$$

e a aproximação (2). Ao termo

$$\tau(t, h) := \frac{h}{2}y''(\theta), \quad t < \theta < t + h,$$

que foi desprezado na expansão de Taylor acima, chama-se *erro de truncatura local* do método de Euler.

Cada uma destas três interpretações abre possibilidades para melhorar o método de Euler. Em seguida iremos considerar generalizações dos processos acima descritos, com vista a obter métodos mais eficazes, nomeadamente com ordem de convergência superior a 1.

2.3 Métodos de Taylor. Caso escalar

Supondo $y \in C^3([t_0, t_N])$, pela *fórmula de Taylor*, tem-se

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2}y''(t_i) + \frac{h^3}{6}y^{(3)}(\theta_i), \quad t_i < \theta_i < t_{i+1}. \quad (3)$$

Usando

$$\begin{aligned} y'(t_i) &= f(t_i, y(t_i)) \\ y''(t_i) &= \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, y(t_i)) + \frac{\partial f}{\partial y}(t_i, y(t_i))f(t_i, y(t_i)) \end{aligned}$$

e desprezando o termo $\frac{h^3}{6}y^{(3)}(\theta_i)$ em (3), obtém-se a aproximação

$$y(t_{i+1}) \approx y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t}(t_i, y(t_i)) + \frac{\partial f}{\partial y}(t_i, y(t_i))f(t_i, y(t_i)) \right]$$

a qual conduz ao *método de Taylor de ordem 2*:

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial t}(t_i, y_i) + \frac{\partial f}{\partial y}(t_i, y_i)f(t_i, y_i) \right]. \quad (4)$$

Mostra-se que, em condições de regularidade de f e y apropriadas em (3) e (4), existe $C > 0$ independente de h tal que

$$\max_{i \in \{1, \dots, N\}} |y(t_i) - y_i| \leq Ch^2,$$

razão pela qual se diz que o método de Taylor (4) tem *ordem 2*.

Definição 2.1. Diz-se que um método numérico para aproximar a solução de (1) nos pontos $t_i = t_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots$ tem convergência de ordem p se existir $C > 0$ independente de h tal que

$$\max_{i \in \{1, \dots, N\}} |y(t_i) - y_i| \leq Ch^p.$$

De forma análoga, através de expansões de Taylor mais complexas, obtêm-se métodos de Taylor de ordem superior, os quais, por requererem o cálculo das derivadas parciais de f , não são relevantes do ponto de vista das aplicações. Na prática, utilizam-se os métodos de Runge-Kutta, mais convenientes quanto à implementação computacional.

2.4 Métodos implícitos e métodos de predição-correção. Caso escalar

Fazendo a aproximação da derivada pela diferença dividida

$$y'(t_{i+1}) \simeq \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{t_{i+1} - t_i} = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h}$$

e usando $y'(t_{i+1}) = f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))$, obtemos

$$\frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} \simeq f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))$$

o que conduz ao *método de Euler implícito* para a solução numérica do problema de valor inicial (1) nos pontos $t_i = t_0 + ih$, $i = 1, 2, \dots$,

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

Em geral é necessário resolver uma equação não linear para obter y_{i+1} em (5). Consideremos agora as técnicas de integração numérica, começando pela regra do trapézio, para aproximar o integral em

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt.$$

Através da aproximação

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \simeq \frac{(t_{i+1} - t_i)}{2} [f(t_i, y(t_i)) + f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))].$$

obtemos

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) \simeq \frac{h}{2} [f(t_i, y(t_i)) + f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))]$$

o que dá origem a um novo método implícito, o *método de Crank-Nicolson*

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})]. \quad (6)$$

As equações não lineares associadas aos métodos implícitos podem ser resolvidas por aproximações sucessivas (método do ponto fixo) desde que a constante de Lipschitz L de f (relembrar as condições do Teorema 2.2) e o passo h verifiquem certas condições. De facto, tendo já calculada a aproximação y_i no ponto t_i , consideramos a função

$$g(y) := y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y)] \quad (y \in \mathbb{R})$$

e tentamos obter y_{i+1} em (6) como um ponto fixo de g . Atendendo a que

$$|g(y) - g(z)| = \frac{h}{2} |f(t_{i+1}, y) - f(t_{i+1}, z)| \leq \frac{hL_f}{2} |y - z|,$$

g será contrativa (em \mathbb{R}) se

$$\frac{hL_f}{2} < 1 \iff h < \frac{2}{L_f}.$$

Estas considerações levam a definir o chamado *método de predição-correção*

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(t_i, y_i), \\ y_{i+1}^{(k+1)} = y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})], \quad k = 0, 1, \dots, i = 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$

onde se escolheu para iterada inicial para a aproximação de $y(t_{i+1})$ o valor dado pelo método de Euler explícito. O processo iterativo em k será convergente se h for tal que $h < \frac{2}{L_f}$.

Fazendo apenas uma iteração do método de correção obtém-se o *método de Heun*

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_i + hf(t_i, y_i))], \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Recorrendo à regra do ponto médio para aproximar o integral em

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt,$$

obtemos

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) \simeq (t_{i+1} - t_i) f\left(\frac{t_{i+1} + t_i}{2}, y\left(\frac{t_{i+1} + t_i}{2}\right)\right) = hf\left(t_i + \frac{h}{2}, y\left(t_i + \frac{h}{2}\right)\right).$$

Fazendo a aproximação (corresponde ao método de Euler com passo $h/2$)

$$y\left(t_i + \frac{h}{2}\right) \approx y(t_i) + \frac{h}{2}f(t_i, y(t_i)) \approx y_i + \frac{h}{2}f(t_i, y_i)$$

conduz ao *método do ponto médio*

$$y_{i+1} = y_i + hf\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}f(t_i, y_i)\right), i = 0, 1, 2, \dots$$

2.5 Métodos de Runge-Kutta. Caso escalar

O método do ponto médio e o método de Heun fazem parte de uma classe de métodos de segunda ordem, que se chama *métodos de Runge-kutta de ordem 2*. Esta classe pode ser obtida por comparação com o método de Taylor de ordem 2, de modo a evitar o cálculo das derivadas parciais de f . Considera-se um esquema da forma

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h(\gamma K_1 + \delta K_2), \\ K_1 = f(t_i, y_i), \\ K_2 = f(t_i + \alpha h, y_i + \beta h K_1), \end{cases} \quad (7)$$

onde as constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ devem ser determinadas de modo que (7) seja “semelhante” ao método de Taylor de ordem 2. Se f é de classe C^2 , tem-se

$$f(t_i + \alpha h, y_i + \beta h K_1) = f(t_i, y_i) + \alpha h \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, y_i) + \beta h K_1 \frac{\partial f}{\partial y}(t_i, y_i) + \mathcal{O}(h^2).$$

Substitui-se em (7) e despreza-se o termo $\mathcal{O}(h^2)$, o que dá

$$y_{i+1} = y_i + (\gamma + \delta)hf(t_i, y_i) + \alpha\delta h^2 \frac{\partial f}{\partial t}(t_i, y_i) + \beta\delta h^2 \frac{\partial f}{\partial y}(t_i, y_i)f(t_i, y_i).$$

Comparando com (4), obtém-se

$$\begin{cases} \gamma + \delta = 1 \\ \alpha\delta = \frac{1}{2} \\ \beta\delta = \frac{1}{2} \end{cases}$$

ou seja, $\alpha = \beta$, $\delta = \frac{1}{2\alpha}$, $\gamma = 1 - \frac{1}{2\alpha}$.

Daqui e de (7) resulta então a classe de *métodos de Runge-Kutta de ordem 2* definidos pelo parâmetro α

$$\begin{cases} K_1 = f(t_i, y_i), & K_2 = f(t_i + \alpha h, y_i + \alpha h K_1), \\ y_{i+1} = y_i + h \left[\left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right) K_1 + \frac{1}{2\alpha} K_2 \right]. \end{cases}$$

Para terminar, referimos o *método de Runge-Kutta de ordem 4* clássico, dado por

$$\begin{cases} K_1 = f(t_i, y_i), & K_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} K_1\right), \\ K_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} K_2\right), & K_4 = f(t_i + h, y_i + h K_3), \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4). \end{cases}$$

Referências

- [1] R. Kress, Numerical Analysis, Springer-Verlag, 1998.
- [2] J. M. Ortega, Numerical Analysis: a second course, Classics in Applied Mathematics; Vol. 3, SIAM, 1990.
- [3] A. Quarteroni, R. Sacco e F. Saleri, Cálculo Científico com Matlab e Octave, Springer-Verlag, 2007 (traduzido por Adélia Sequeira).
- [4] E. Isaacson and H. B. Keller, Analysis of Numerical Methods, John Wiley and Sons, London, New York (1966).
- [5] P. Linz, *Theoretical Numerical Analysis: An Introduction to Advanced Techniques*, Dover Publications (2001).
- [6] J. C. Sprott, Dynamical Models of Love, *Nonlinear Dynamics, Psychology, and Life Sciences*, **8**, 303-313 (2004).