Equações Diferenciais Ordinárias

INF1608 – Análise Numérica

Departamento de Informática, PUC-Rio

Equação Diferencial Ordinária

Equação diferencial de primeira ordem

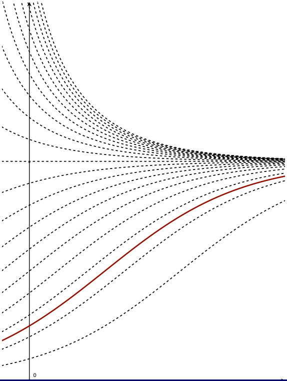
$$y'(t) = f(t, y(t))$$

- Objetiva-se determinar $y(t)$

Exemplo: crescimento populacional com saturação (autonoma)

$$y' = cy(1 - y)$$

- Define um campo direcional



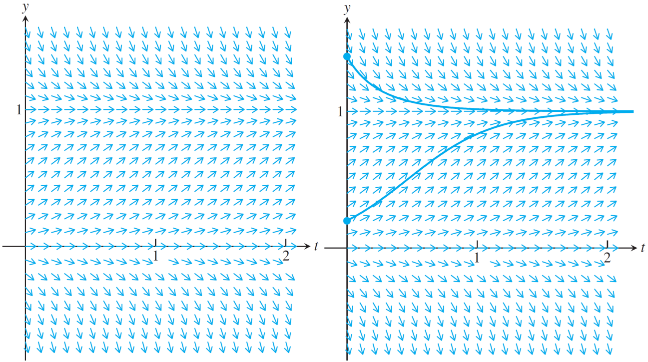
Problema de valor inicial (IVP)

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \\ y(a) = y_a \\ t \in [a, b] \end{cases}$$

Exemplo

Exemplo de equação diferencial autonoma

$$\begin{cases} y' = cy(1-y) \\ y(0) = y_0 \\ t \in [0, T] \end{cases}$$



Método de Euler

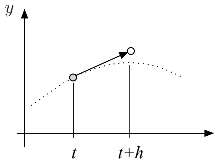
A partir da Série de Taylor

$$y(t+h) = y(t) + h\,y'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \frac{h^3}{3!}y'''(c), \quad c \in [t, t+h]$$

Método de Euler usa apenas os 2 primeiros termos da série

$$y(t+h) = y(t) + h\,y'(t)$$
$$y(t+h) = y(t) + h\,f(t,y)$$

$$\mathbf{y_{i+1} = y_i + h\,f(t_i, y_i)}$$



Características

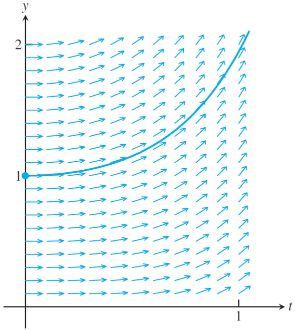
- Assimétrico: usa apenas derivada do início do intervalo
- Impreciso: exige h muito pequeno
  - Erro $= O(h^2)$
- Instável: pode divergir

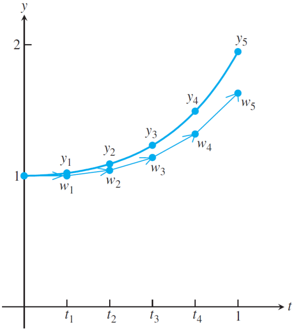
Método de Euler

Exemplo de equação diferencial dependente de t (não autonoma)

$$\begin{cases} y' = ty + t^3 \\ y(0) = y_0 \\ t \in [0,1] \end{cases}$$

w_i é o resultado por Euler, y_i é o resultado real





Método de Euler

Problema de valor inicial

- Dados:
  - $y' = f(t, y)$
  - $y_a = f(t_a)$
- Determinar y_b, onde $t_b > t_a$, com n passos de integração
  - Quanto menor h, menor o erro

$$
\begin{array}{l}
\mathit{Euler}(t_a, t_b, f, y_a, n) \\
\quad h = (t_b - t_a)/n \\
\quad t = t_a \\
\quad y = y_a \\
\quad \textbf{for } i = 1, n \\
\quad\quad y = y + h\, f(t, y) \\
\quad\quad t = t + h \\
\quad \textbf{return } y
\end{array}
$$

Avaliação do Erro

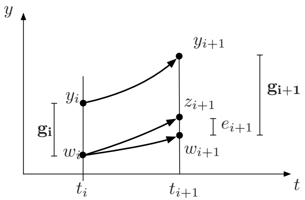
Erro de truncamento **local** e **global**

- Podemos garantir erro abaixo de um limite usando h menores?

Erro local: um passo de avaliação

$$e_{i+1} = |w_{i+1} - z_{i+1}|$$

- z_{i+1}: valor esperado a partir de w_i
- w_{i+1}: valor após uma avaliação do método



Erro global: acumulado e amplificado

$$g_i = |w_i - y_i|$$

- y_i: valor esperado
- w_i: valor após sucessivas avaliações do método

Erro local

Série de Taylor:

$$y(t+h) = y(t) + h\,y'(t) + \frac{h^2}{2}y''(c), \text{ com } c \in [t, t+h]$$

Método de Euler:

$$w_{i+1} = w_i + h\,f(t_i, w_i) + \frac{h^2}{2}f'(c, w(c)), \text{ com } c \in [t_i, t_{i+1}]$$

Logo, erro local:

$$e_i \leq \frac{Mh^2}{2}, \text{ onde } M \text{ é o limite superior de } f' \text{ no intervalo}$$

Erro global

$$g_0 = 0 = |w_0 - y_0| = |y_a - y_a|$$

$$g_1 = e_1 = |w_1 - y_1|$$

$$g_i = ?$$

Erro global

$$g_0 = 0 = |w_0 - y_0| = |y_a - y_a|$$

$$g_1 = e_1 = |w_1 - y_1|$$

$$g_i = ?$$

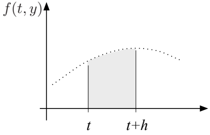
Utilizando Teorema de ampliação do erro (ou estabilidade):

$$g_{i+1} \leq e_{i+1} + g_i e^{Lh}, \text{ onde } L \text{ é a constante de Lipschitz}$$

- Diminuir o passo, diminui o erro
- Pode existir um crescimento exponencial do erro em relação ao número de passos

Método via formulação da integral

$$y(t+h) = y(t) + \int_t^{t+h} f(t, y(t))dt$$



- Aproximação por retângulo (Euler):

$$y_{i+1} = y_i + h\, f(t_i, y_i)$$

- Aproximação por trapézio:

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

Problema: Como avaliar se precisamos de y_{i+1}?

Método de Euler modificado

Aproximação por trapézio

- Usa Euler para estimar y_{i+1}

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

Características:

- Exige duas avaliações de f
- Método de ordem 2
  - Erro local $= O(h^3)$

Métodos explícitos

O Método de Euler e o Método de Euler Modificado
são chamados de **métodos explícitos**

- Usam configuração em t para avaliar em $t + h$

Um método de ordem superior vale a pena?

- Em geral, sim!
  - Mais precisão
  - Mais avaliações de $f(t, y)$

Euler *versus* Euler modificado

- Duas avaliações de $f(t, y)$
  - Euler: dois passos $h/2$, com erro multiplicado por $h^2/4$
  - Euler modificado: um passo h, com erro multiplicado por h^3

$\Rightarrow$ Para h pequeno, método de ordem superior é melhor

Método do ponto médio

Usa o valor da derivada no ponto médio do intervalo

- Avalia passo de Euler: $\Delta y = h\,f(t_i, y_i)$
- Avalia f no ponto médio: $f_{med} = f(t_{i+1/2}, y_i + \Delta y/2)$
- Avança usando f_{med}

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + h\,f_{med}}$$

Características iguais ao do Euler modificado:

- Exige duas avaliações de f
- Método de ordem 2
  - Erro $= O(h^3)$
- Também conhecido como Runge-Kutta de ordem 2

Runge-Kutta de ordem 3

$$k_0 = h\,f(t_i, y_i)$$
$$k_1 = h\,f(t_{i+1/2}, y_i + k_0/2)$$
$$k_2 = h\,f(t_{i+1}, y_i + 2k_1 - k_0)$$

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_0 + 4k_1 + k_2)}$$

Características:

- Exige três avaliações de f
- Erro $= O(h^4)$

Runge-Kutta de ordem 4

$$k_0 = h\,f(t_i, y_i)$$
$$k_1 = h\,f(t_{i+1/2}, y_i + k_0/2)$$
$$k_2 = h\,f(t_{i+1/2}, y_i + k_1/2)$$
$$k_3 = h\,f(t_{i+1}, y_i + k_2)$$

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3)}$$

Características:

- Exige quatro avaliações de f
- Erro $= O(h^5)$
- Método numérico mais popular
  - Precisão & desempenho

Passo adaptativo

Objetivo: assegurar precisão numérica local

- Independente do método
- Usa maior passo possível
  - Respeitando erro local máximo tolerado

Passo adaptativo

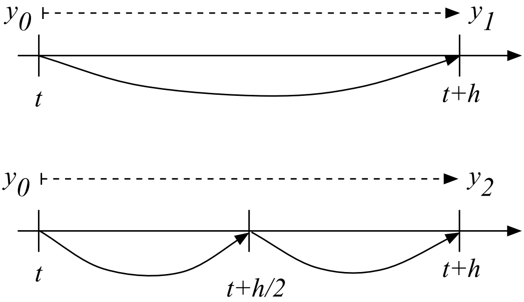
Se erro $= O(h^n)$, então teoricamente:

- Se passo h produz erro e
- Então passo $h/2$ produzirá erro $e/2^n$

Passo adaptativo

Avaliação do erro associado a h

- Estratégia de dobrar o passo



Euler com Passo adaptativo

Estratégia de dobrar o passo

A partir de 1 passo (y_1) e 2 passos (y_2) de Euler:

$$y = y_1 + h^2\,\phi = y_1 + e_{y_1}$$

$$y = y_2 + 2\left(\frac{h}{2}\right)^2 \phi = y_2 + \frac{h^2}{2}\,\phi = y_2 + e_{y_2}$$

$$\Delta = y_2 - y_1$$

Então, igualando as duas equações em y:

$$y_1 + h^2\,\phi = y_2 + \frac{h^2}{2}\,\phi$$

$$y_2 - y_1 = h^2\,\phi - \frac{h^2}{2}\,\phi$$

$\boxed{\Delta = \frac{h^2}{2}\,\phi = e_{y_2}}$ que representa o erro associado a y_2

Como adaptar o passo

Exemplo:

- Erro máximo permitido: $e_{max} = 10^{-4}$

Se erro obtido for $|y_2 - y_1| = 10^{-5}$

- Valida-se o passo: $y = y_2$
- Aumenta-se o passo

$$h_{novo} = \left(\frac{e_{max}}{e}\right)^{1/2} h = 3.16\, h$$

Se erro obtido for $|y_2 - y_1| = 10^{-3}$

- Invalida-se o passo
- Refaz o avanço, diminuindo-se o passo

$$h_{novo} = \left(\frac{e_{max}}{e}\right)^{1/2} h = 0.316\, h$$

Euler com passo adaptativo

Note que:

$$
\begin{aligned}
y &= y_2 + 2\left(\frac{h}{2}\right)^2 \phi + O(h^3) \\
y &= y_2 + \Delta + O(h^3)
\end{aligned}
$$

Logo, pode-se pensar em avaliar a função com erro $O(h^3)$?

$$y = y_2 + \Delta$$

- Em geral, métodos de ordem superior são mais confiáveis
- Neste caso, no entanto, perderíamos o controle do erro

Passo adaptativo para outros métodos

- Erro: $O(h^n)$

$$h_{novo} = \left(\frac{e_{max}}{e}\right)^{1/n} h$$

Euler Adaptativo

Um passo de integração

- Calcular novo y, retornando também novos t e h
  - Erro local máximo tolerado: e_{max}

$$
\begin{array}{l}
OneStep(t, y, h, f, e_{max}) \\
\quad y_1 = y + h\, f(t, y) \\
\quad y_m = y + \dfrac{h}{2}\, f(t, y) \\
\quad y_2 = y_m + \dfrac{h}{2}\, f(t + \dfrac{h}{2}, y_m) \\
\quad \delta = y_2 - y_1; \quad \alpha = \sqrt{\dfrac{e_{max}}{|\delta|}} \\
\quad \textbf{if } \alpha < 1.0 \\
\qquad \textbf{return } OneStep(t, y, \alpha h, f, e_{max}) \\
\quad \textbf{else} \\
\qquad \textbf{return } y_2, t + h, \alpha h
\end{array}
$$

Euler Adaptativo

Determinação de $y(t_1)$

- Dadas as condições iniciais
- Erro local máximo tolerado: e_{max}

$$
\begin{array}{l}
EulerAdaptativo(t, y, h, t_1, f, e_{max}) \\
\quad \textbf{while } t < t_1 \\
\quad\quad \textbf{if } t + h > t_1 \\
\quad\quad\quad h = t_1 - t \\
\quad\quad y, t, h = OneStep(t, y, h, f, e_{max})
\end{array}
$$

Observações

- Em geral, limita-se o aumento do passo: $\alpha \leq 1.2$
- Pode-se não incrementar o passo logo após uma redução
- Na prática, faz-se `OneStep` retornar $y_2 + \delta$

Ponto Médio com Passo Adaptativo

Similar ao que foi feito para Euler adaptativo:

$$y = y_1 + h^3\phi = y_1 + e_{y_1}$$

$$y = y_2 + 2\left(\frac{h}{2}\right)^3\phi = y_2 + \frac{h^3}{2^2}\phi = y_2 + e_{y_2}$$

Igualando y:

$$y_2 + \frac{h^3}{2^2}\phi = y_1 + h^3\phi$$

$$y_2 - y_1 = h^3\phi - \frac{h^3}{2^2}\phi$$

$$\Delta = 4\frac{h^3}{2^2}\phi - \frac{h^3}{2^2}\phi = 3\frac{h^3}{2^2}\phi = 3\ e_{y_2}$$

Logo, para o método do ponto médio, $e_{y_2} = \frac{\Delta}{3}$

Runge-Kutta (RK4) com Passo Adaptativo

Similar ao que fizemos para Euler

$$y = y_1 + h^5\phi = y_1 + e_{y_1}$$
$$y = y_2 + 2\left(\frac{h}{2}\right)^5 \phi = y_2 + \frac{h^5}{16}\phi = y_2 + e_{y_2}$$

Seguindo a mesma ideia de igualar as equações em y:

$$\Delta = y_2 - y_1 = 15\frac{h^5}{16}\phi = 15e_{y_2}$$

Se $\frac{|\Delta|}{15} < e_{max}$, passo validado, se não, refazer o passo:

- Novo passo: $h_{novo} = \left(\frac{15\, e_{max}}{|\Delta|}\right)^{\frac{1}{5}} h$

Número de avaliações de $f(t, y)$? $4 + 3 + 4 = 11$

Embedded Runge-Kutta para avaliação adaptativa

Usa 2 métodos acoplados de RK, de ordens p e p+1.

- Avaliados em "paralelo", compartilhando coeficientes k_i.

Com isso, o erro passa a ser:

$$e_i = |Z_i - W_i|\,,\ Z_i = RK_{p+1},\ W_i = RK_p$$

E cada passo é atualizado a partir da fórmula:

$$h_{i+1} = u_c \left(\frac{e_{max}}{e_i} \right)^{\frac{1}{p+1}} h_i$$

Onde u_c é um controle de usuário, podendo ser algo com 0.8, para controlar o aumento do passo.
Obs: Em alguns casos, usa-se a ideia do erro relativo proporcional à magnitude da solução, onde e_{max} passa a ser $e_{max}\,|W_i|$.

Embedded Runge-Kutta 2/3

Utilizando métodos de ordem 2 e ordem 3.

$$W_{i+1} = W_i + h\frac{k_1 + k_2}{2} \quad e \quad Z_{i+1} = W_i + h\frac{k_1 + 4k_3 + k_2}{6}$$

Onde:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf\left(t_i, W_i\right) \\ k_2 &= hf\left(t_{i+1}, W_i + h\ k_1\right) \\ k_3 &= hf\left(t_{i+\frac{1}{2}}, W_i + \frac{h}{2}\frac{k_1 + k_2}{2}\right) \end{aligned}$$

Apesar do passo ser adaptado considerando W_{i+1}, na prática, o avanço é feito através do método de ordem superior Z_{i+1}.

Embedded Runge-Kutta: método Cash-Karp

Método de ordem 5 embutido com o método de ordem 4.

$$
\begin{aligned}
k_1 &= h\, f(t_i, y_i) \\
k_2 &= h\, f(t_i + a_2 h, y_i + b_{21} k_1) \\
&\vdots \\
k_6 &= h\, f(t_i + a_6 h, y_i + b_{61} k_1 + \cdots + b_{65} k_5)
\end{aligned}
$$

Com isso, calculamos os 2 métodos e a sua respectiva diferença:

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + \sum_{i=1}^{6} c_i k_i + O(h^6) \ \ e \ \ y^*_{i+1} = y_i + \sum_{i=1}^{6} c^*_i k_i + O(h^5) \\
\Delta &= y_{i+1} - y^*_{i+1}
\end{aligned}
$$

a_i, b_{ij}, c_i, c^*_i são parâmetros da tabela *Cash-Karp*

Embedded Runge-Kutta: Tabela *Cash-Karp*

Número de avaliações de $f(t, y)$: 6

Cash-Karp Parameters for Embedded Runga-Kutta Method								
i	a_i	b_{ij}					c_i	c_i^*
1							$\frac{37}{378}$	$\frac{2825}{27648}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{250}{621}$	$\frac{18575}{48384}$
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$			$\frac{125}{594}$	$\frac{13525}{55296}$
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$		0	$\frac{277}{14336}$
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{512}{1771}$	$\frac{1}{4}$
$j =$		1	2	3	4	5		

Tabela extraída de "Numerical Recipes", Vetterling et al., 1992

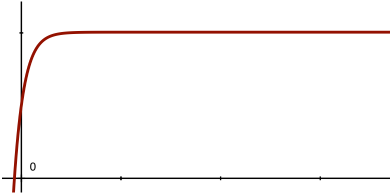
Métodos Implícitos e Sistemas Rígidos

Exemplo:

$$f(t, y) = 10(1 - y)$$

- Solução analítica

$$y(t) = 1 - \frac{e^{-10t}}{2}$$



- Método de Euler:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h\,f(t_i, y_i) \\ &= y_i + 10h(1 - y_i) \\ &= y_i(1 - 10h) + 10h \end{aligned}$$

Métodos Implícitos e Sistemas Rígidos

Neste caso, Euler pode ser visto como Iteração de Ponto Fixo

- Solução converge para $y = 1$

$$g(x) = x(1 - 10h) + 10h$$

- Converge em $x = 1$ se $|g'(1)| = |1 - 10h| < 1$

$$\begin{array}{ccc} 1 - 10h < 1 & \text{e} & 1 - 10h < -1 \\ \therefore h > 0 & & \therefore h < \frac{2}{10} = 0.2 \end{array}$$

- Logo, converge se:

$$0 < h < 0.2$$

Métodos Implícitos e Sistemas Rígidos

De fato, considerando $y_0 = 0$:

$$y_{i+1} = y_i(1 - 10h) + 10h$$

- Para h = 0.15

```
0
1.5
0.75
1.125
0.9375
1.03125
0.984375
1.0078125
0.99609375
1.001953125
0.9990234375
1.00048828125
0.999755859375
1.0001220703125
0.99993896484375
1.0000305175781
```

- Para h = 0.25

```
0
2.5
-1.25
4.375
-4.0625
8.59375
-10.390625
18.0859375
-24.62890625
39.443359375
-56.6650390625
87.49755859375
-128.74633789062
195.61950683594
-290.92926025391
438.89389038086
```

Método de Euler Implícito

$$y_{i+1} = y_i + h \underbrace{f(t_{i+1}, y_{i+1})}_{\text{avaliado no final do intervalo}}$$

No exemplo:

$$y_{i+1} = y_i + 10h(1 - y_{i+1})$$

$$y_{i+1} = \frac{y_i + 10h}{1 + 10h}$$

- Para $h = 0.3$:

$$y_{i+1} = \frac{y_i + 3}{4}$$

  - Vendo como Iteração de Ponto Fixo:

$$g(x) = \frac{x+3}{4} \quad \therefore \quad g'(1) = \frac{1}{4} < 1 \Rightarrow \text{converge}$$

Método de Euler Implícito

Método implícito

- Permite convergencia com passos de integração maiores

Problema:

- Equação implícita $G(Y(t), Y(t+h)) = 0$ nem sempre é simples de ser definida e resolvida
- Necessidade de usar métodos para achar a raiz como Ponto Fixo e Newton Raphson

Método de Euler Implícito

Exemplo com Newton Raphson

$$\begin{cases} y' = y + 8y^2 - 9y^3 \\ y(0) = 1/2 \\ t \in [0, 3] \end{cases}$$

Com isso, temos que Euler implícito é definido por:

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_{i+1}, y_{i+1}) = y_i + h(y_{i+1} + 8y_{i+1}^2 - 9y_{i+1}^3)$$

Não conseguimos isolar y_{i+1} para aplicar ponto fixo, mas podemos igualar equação a zero:

$$9hy_{i+1}^3 - 8hy_{i+1}^2 + (1-h)y_{i+1} - y_i = 0$$

Método de Euler Implícito

Agora, substituindo y_{i+1} por z:

$$9hz^3 - 8hz^2 + (1-h)z - y_i = 0$$

Agora aplicamos o método de Newton Raphson:

$$z_{new} = z - \frac{f(z)}{f'(z)} = z - \frac{9hz^3 - 8hz^2 + (1-h)z - y_i}{27hz^2 - 16hz + 1 - h}$$

Atualizando z com z_{new}, até que $z_{new} - z$ seja pequeno dentro de uma tolerância, ao final $y_{i+1} = z_{new}$.

Chute inicial de z pode ser tanto o valor de y_i quanto o valor aproximado y_{i+1} utilizando Euler explícito.

Exemplo

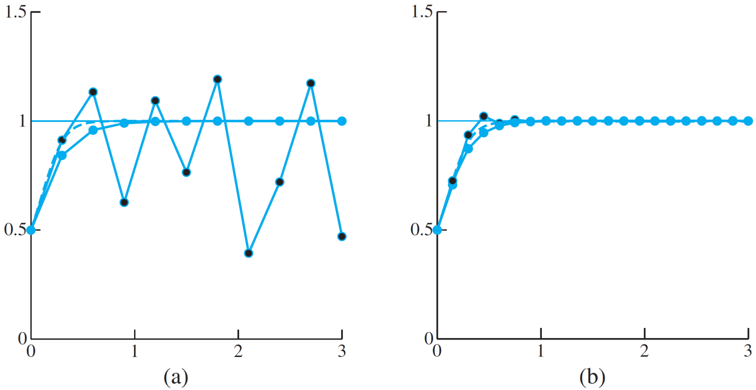


Figure 6.22 Numerical solution of the initial value problem of Example 6.25. True solution is the dashed curve. The black circles denote the Euler Method approximation; the blue circles denote Backward Euler. (a) $h = 0.3$ (b) $h = 0.15$.

Exercícios propostos

1. Considere o Método do Ponto Médio para resolução de Equações Diferenciais Ordinárias. Considere a equação $y' = 1 + y^2$, com $y_0 = 0$. Usando a estratégia de dobrar o passo, calcule o valor de $y(t)$ com passo $t = 0.1$. Qual o erro reportado pelo próprio método? Considerando uma tolerância igual a 10^{-2} para o erro local do método, qual seria o valor do passo h ideal para esse avanço?