Introdução ao Cálculo Numérico

Determinação de Parâmetros em EDOs por Mínimos Quadrados

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
UFRGS

Prof. Rudnei Dias da Cunha

- Seja o sistema de EDOs

$$\begin{cases} x' = \alpha x + \beta xy \\ y' = \gamma y + \delta xy \end{cases} \qquad (1)$$

sujeito a condições iniciais $x(0) = x_o$ e $y(0) = y_0$, e se deseja determinar os parâmetros α, β, γ e δ.

- Usando o método de Euler, podemos escrever

$$\begin{cases} x_{j+1} = x_j + \alpha h x_j + \beta h x_j y_j \\ y_{j+1} = y_j + \gamma h y_j + \delta h x_j y_j \end{cases} \qquad (2)$$

- Definindo os resíduos $r(x)$ e $s(y)$, vem

$$\begin{aligned} r(x) &= x_{j+1} - x_j - \alpha h x_j - \beta h x_j y_j \\ s(y) &= y_{j+1} - y_j - \gamma h y_j - \delta h x_j y_j \end{aligned} \qquad (3)$$

- Os parâmetros podem ser obtidos minimizando a função

$$F(\alpha,\beta,\gamma,\delta) = \sum_{j=0}^{m-1} r(x)^2 + s(y)^2 \qquad (4)$$

onde m é a quantidade de valores x_j, y_j disponíveis (podendo ser obtidos inclusive de forma experimental).

- Derivando a Equação (4) em relação a cada um dos parâmetros em questão, e igualando as derivadas parciais a zero, vem:

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha} = 0:$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \frac{\partial}{\partial \alpha} r(x) = 0$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \left(x_{j+1} - x_j - \alpha h x_j - \beta h x_j y_j\right) x_j = 0$$

$$\boxed{\alpha h \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 + \beta h \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 y_j = \sum_{j=0}^{m-1} \left(x_{j+1} - x_j\right) x_j} \qquad (5)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \beta} = 0:$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \frac{\partial}{\partial \beta} r(x) = 0$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} (x_{j+1} - x_j - \alpha h x_j - \beta h x_j y_j) x_j y_j = 0$$

$$\boxed{\alpha h \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 y_j + \beta h \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 {y_j}^2 = \sum_{j=0}^{m-1} (x_{j+1} - x_j) x_j y_j} \qquad (6)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \gamma} = 0:$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \frac{\partial}{\partial \alpha} s(x) = 0$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \left(y_{j+1} - y_j - \gamma h x_j - \delta h x_j y_j\right) y_j = 0$$

$$\boxed{\gamma h \sum_{j=0}^{m-1} {y_j}^2 + \delta h \sum_{j=0}^{m-1} x_j {y_j}^2 = \sum_{j=0}^{m-1} \left(y_{j+1} - y_j\right) y_j} \qquad (7)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \delta} = 0:$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \frac{\partial}{\partial \delta} s(x) = 0$$

$$\sum_{j=0}^{m-1} \left(y_{j+1} - y_j - \gamma h x_j - \delta h x_j y_j\right) x_j y_j = 0$$

$$\boxed{\gamma h \sum_{j=0}^{m-1} x_j {y_j}^2 + \delta h \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 {y_j}^2 = \sum_{j=0}^{m-1} \left(y_{j+1} - y_j\right) x_j y_j} \qquad (8)$$

- Escrevendo em forma matricial as equações (5) a (8), vem

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 & \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 y_j \\ \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 y_j & \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 {y_j}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha h \\ \beta h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{m-1} (x_{j+1} - x_j) x_j \\ \sum_{j=0}^{m-1} (x_{j+1} - x_j) x_j y_j \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{m-1} {y_j}^2 & \sum_{j=0}^{m-1} x_j {y_j}^2 \\ \sum_{j=0}^{m-1} x_j {y_j}^2 & \sum_{j=0}^{m-1} {x_j}^2 {y_j}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma h \\ \delta h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{m-1} (y_{j+1} - y_j) y_j \\ \sum_{j=0}^{m-1} (y_{j+1} - y_j) x_j y_j \end{bmatrix} \quad (10)$$

- Resolvendo as equações (9) e (10), obtemos os valores dos parâmetros, em termos de h.
- Considere então os dados na tabela abaixo, os quais foram obtidos através da Equação (2), com $x(0) = 10, y(0) = 4, \alpha = 2, \beta = 0{,}02, \gamma = -0{,}8,$ $\delta = 0{,}0005$ e $h = 0{,}25$:

i	$t_i = t_{i-1} + h$	x_i	y_i
1	0,25	14,8	3,205
2	0,5	21,96283	2,56992925
3	0,75	32,662030	2,062998
4	1,0	48,6561	1,6588

- Os dois sistemas de equações a serem resolvidos são:

$$\begin{bmatrix} 1868{,}2141 & 4542{,}4935 \\ 4542{,}4935 & 11576{,}0848 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha h \\ \beta h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 596{,}088 \\ 911{,}39459 \end{bmatrix}$$

cuja solução é: $\alpha h = 0{,}5; \beta h = -0{,}005$, e

$$\begin{bmatrix} 37{,}1325 & 596{,}088 \\ 596{,}088 & 11576{,}0848 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma h \\ \delta h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7{,}35199 \\ -117{,}7707 \end{bmatrix}$$

cuja solução é: $\gamma h = -0{,}2;\ \delta h = 0{,}000125$.

Logo,

$$\alpha = 2, \beta = -0{,}02, \gamma = -0{,}8, \delta = 0{,}0005$$

como esperado.■

- A técnica mostrada aqui pode ser usada, então, para se ajustar um modelo expresso por um sistema de EDOs, a um conjunto de dados experimentais, desde que se saiba o valor de h.
- Por exemplo, para tentar modelar a evolução do vírus SARS-CoV-2 (2019), pode-se usar os dados diários relatados pelos órgãos de saúde pública, de onde $h = 1$.
- Caso não se saiba a periodicidade dos dados experimentais, pode-se determinar h através de testes, até o modelo produzir valores compatíveis com os dados.