Equações Diferenciais Ordinárias

INF1608 – Análise Numérica

Waldemar Celes
celes@inf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio

Equação Diferencial Ordinária

Equação diferencial de primeira ordem

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

- Objetiva-se determinar $y(t)$

Equação Diferencial Ordinária

Equação diferencial de primeira ordem

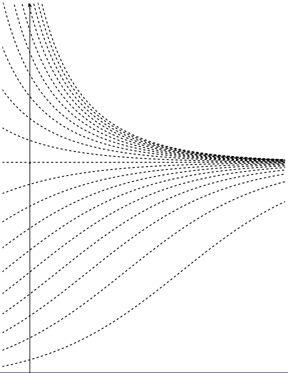
$$y'(t) = f(t, y(t))$$

- Objetiva-se determinar $y(t)$

Exemplo: crescimento populacional com saturação

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

- Define um campo direcional



Equação Diferencial Ordinária

Equação diferencial de primeira ordem

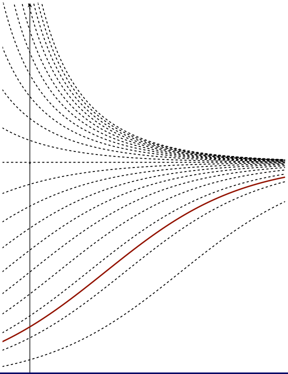
$$y'(t) = f(t, y(t))$$

- Objetiva-se determinar $y(t)$

Exemplo: crescimento populacional com saturação

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

- Define um campo direcional



Problema de valor inicial

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

EDO: Métodos Numéricos

Método de Euler

- 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

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

EDO: Métodos Numéricos

Método de Euler

- Série de Taylor

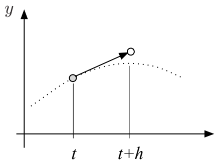
$$y(t+h) = y(t) + h\,y'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \frac{h^3}{3!}y'''(c), \quad c \in [t, t+h]$$

- Método de Euler usa apenas os 2 primeiros termos da série

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

$$y(t+h) = y(t) + h\,f(t,y)$$

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



EDO: Métodos Numéricos

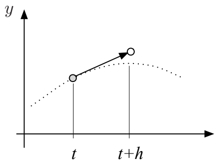
Método de Euler

- 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 problema
  - Impreciso: exige h muito pequeno
    - Erro $= O(h^2)$
  - Instável: pode divergir

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

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

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

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

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

  - Quanto menor h, menor o erro

Avaliação do Erro

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

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

Avaliação do Erro

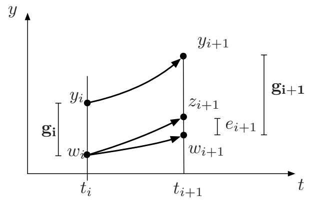
Erro de truncamento **local** e **global**

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

Erro global:

$$g_i = |w_i - y_i|$$

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



Erro local:

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

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

Erro 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

$$g_0 = 0$$

Erro global

$$g_0 = 0$$

$$g_1 = e_1$$

Erro global

$$g_0 = 0$$

$$g_1 = e_1$$

$$g_2 = ?$$

$$|z_2 - y_2| = ? \qquad e_2 = |w_2 - z_2|$$

Erro global

$$g_0 = 0$$

$$g_1 = e_1$$

$$g_2 = ?$$

$$|z_2 - y_2| = ? \qquad e_2 = |w_2 - z_2|$$

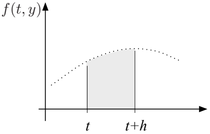
Teorema: ampliação do erro

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

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

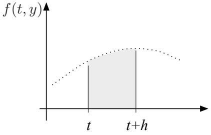
Método via formulação da integral

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



Método via formulação da integral

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

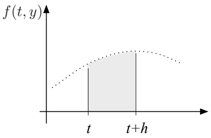


- Aproximação por retângulo (Euler):

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

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}

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

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 $= O(h^3)$

Métodos explícitos

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

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

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?

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 $f(t, y)$

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

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

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

Características:

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

Runge-Kutta de ordem 4

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

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

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

Objetivo: assegurar precisão numérica local

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

Passo adaptativo

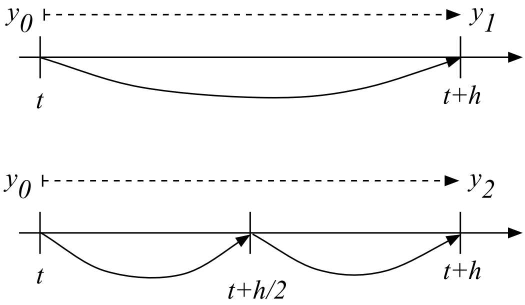
Se erro $= O(h^n)$, então teoricamente:

- 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

$$
\begin{aligned}
y &= y_1 + h^2\,\phi \\
y &= y_2 + 2\left(\frac{h}{2}\right)^2\,\phi
\end{aligned}
$$

$$\Delta = y_2 - y_1$$

Então:

$$
\begin{aligned}
&y_1 + h^2\,\phi = y_2 + \frac{h^2}{2}\,\phi \\
&y_2 - y_1 = h^2\,\phi - \frac{h^2}{2}\,\phi
\end{aligned}
$$

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

Como adaptar o passo

Exemplo:

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

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
- Aumenta-se o passo

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

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
- 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

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}

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

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 $y_2 + \delta$

Runge-Kutta com Passo Adaptativo

Estratégias

- Dobrar o passo
  - Similar ao que fizemos para Euler
- Métodos acoplados
  - Provêem simultaneamente duas avaliações do avanço

Embedded Runge-Kutta

Método de ordem 5 que tem embutido
a avaliação de erro do método de ordem 4

$$
\begin{aligned}
k_1 &= h\,f(t_i, y_i) \\
k_2 &= h\,f(t_i + a_2 h, y_i + b_{21} k_1) \\
&\vdots \\
k_6 &= h\,f(t_i + a_6 h, y_i + b_{61} k_1 + \cdots + b_{65} k_5) \\
y_{i+1} &= y_i + \sum_{i=1}^{6} c_i k_i + O(h^6) \\
y^*_{i+1} &= y_i + \sum_{i=1}^{6} c^*_i k_i + O(h^5) \\
\Delta &= y_{i+1} - y^*_{i+1}
\end{aligned}
$$

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

Embedded Runge-Kutta

Tabela *Cash-Karp*

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

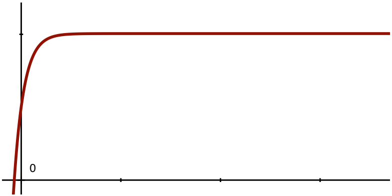
Métodos Implícitos e Sistemas Rígidos

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
```

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

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

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:

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

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

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

- Sempre converge!

Método de Euler Implícito

Método implícito

- Sempre converge!

Problema:

- Em geral, não se consegue expressar a equação implícita original em uma solução explícita
  - Recai em sistemas lineares

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?