Solução Numérica de Equações Diferenciais

Ordinárias

$$\boxed{y^{(n)} = f(t, y, y', \dots, y^{(n-1)})}$$

- $y' = t + y$
- $y'' = y^2 + y'$

- Linear x Não linear
- Ordem

1

- Determinadas EDO's podem ser solucionadas analiticamente, cuja solução é uma expressão explícita.
- Entretanto, isto nem sempre é possível.
- Portanto, soluções numéricas são bem vindas!

Exemplos:

$$\boxed{y' = y}$$

$$\frac{y'}{y} = 1 \Rightarrow \int \frac{y'}{y}\,dt = \int dt \Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{array}{l} u = y \\ du = y'dt \end{array}}$$

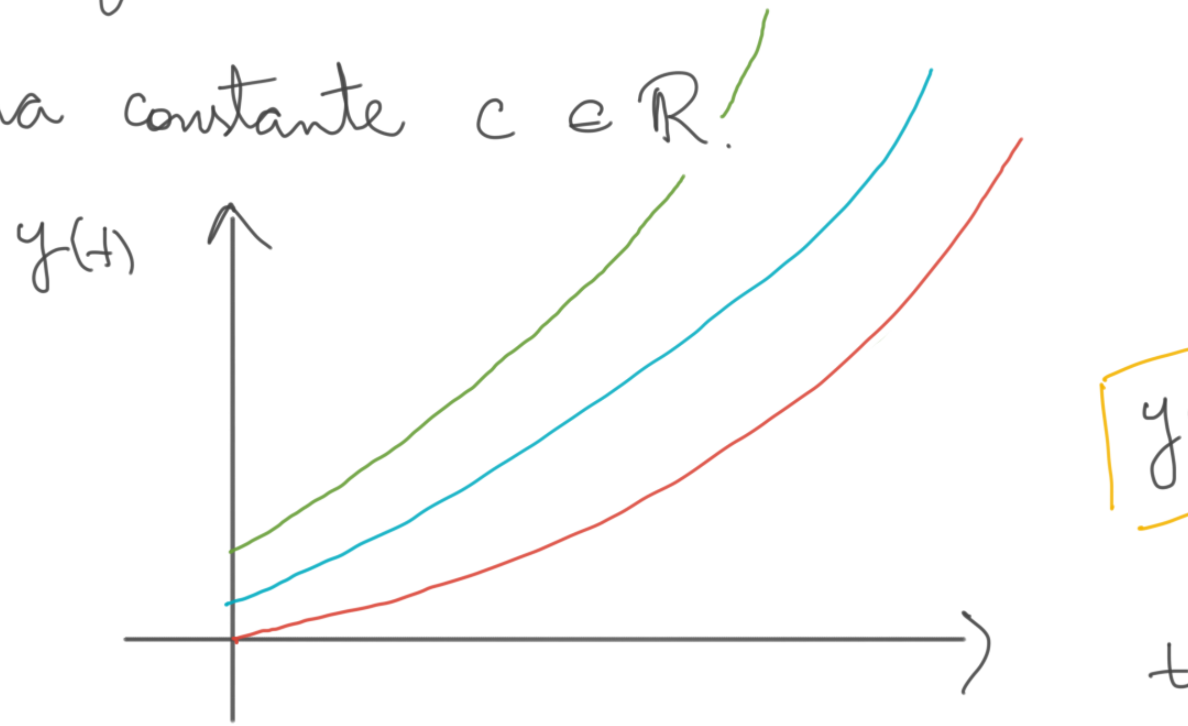
$$\int \frac{du}{u} = t + c \Rightarrow \ln(y) = t + c$$

Solução analítica

$$\boxed{y(t) = c e^{t}, \quad c \in \mathbb{R}}$$

3

- Solução geral: Família de curvas que dependem da constante $c \in \mathbb{R}$.



$$\boxed{y(t) = ce^{t}}$$

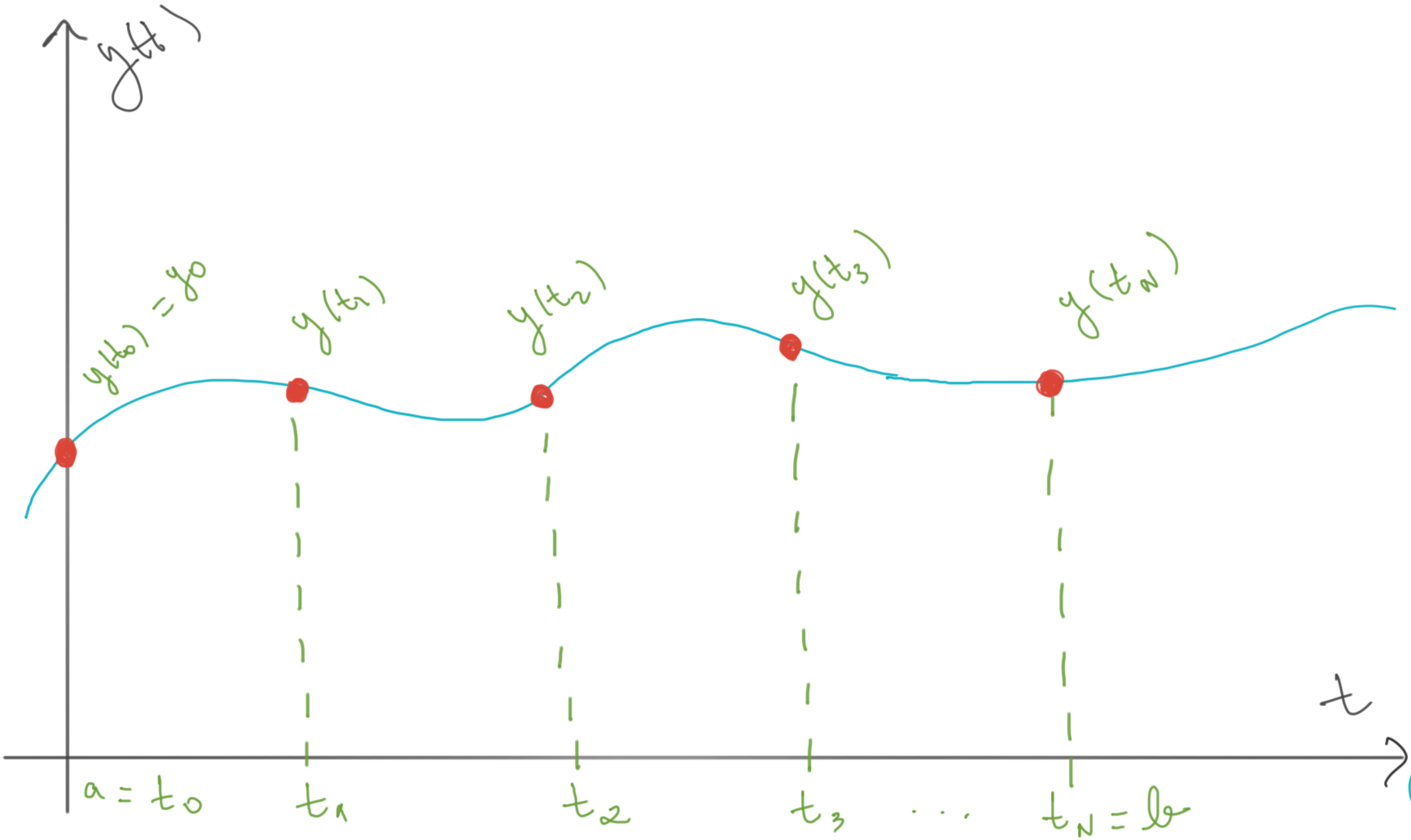
- PVI

Problema de Valor inicial: solução obtida a partir das condições iniciais do problema.

4

Considere o PVI $\begin{cases} y' = f(t,y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ $t \in [a,b]$; $t_0 = a$

Com as condições do teorema de existência e unicidade, este PVI possui uma única solução, conforme ilustraremos a seguir.



6

Consideraremos a sequência de pontos $\{t_n\}$ definida por

$$t_n = t_0 + nh \quad ; \quad n = 0, \dots, N$$

com $t_0 = a$, $t_N = b$ e $N = \dfrac{b-a}{h}$

- h : tamanho do passo
- t_n : pontos da malha
- N : número de passos

Solução Numérica

- Vamos obter uma solução aproximada do PVI em um conjunto discreto de pontos $\{t_n\}$.

- Denotaremos por y_n uma aproximação para a solução teórica (analítica) em t_n, isto é,

$$\boxed{y_n = y(t_n)} \quad e \quad \boxed{f_n = f(t_n, y_n)}$$

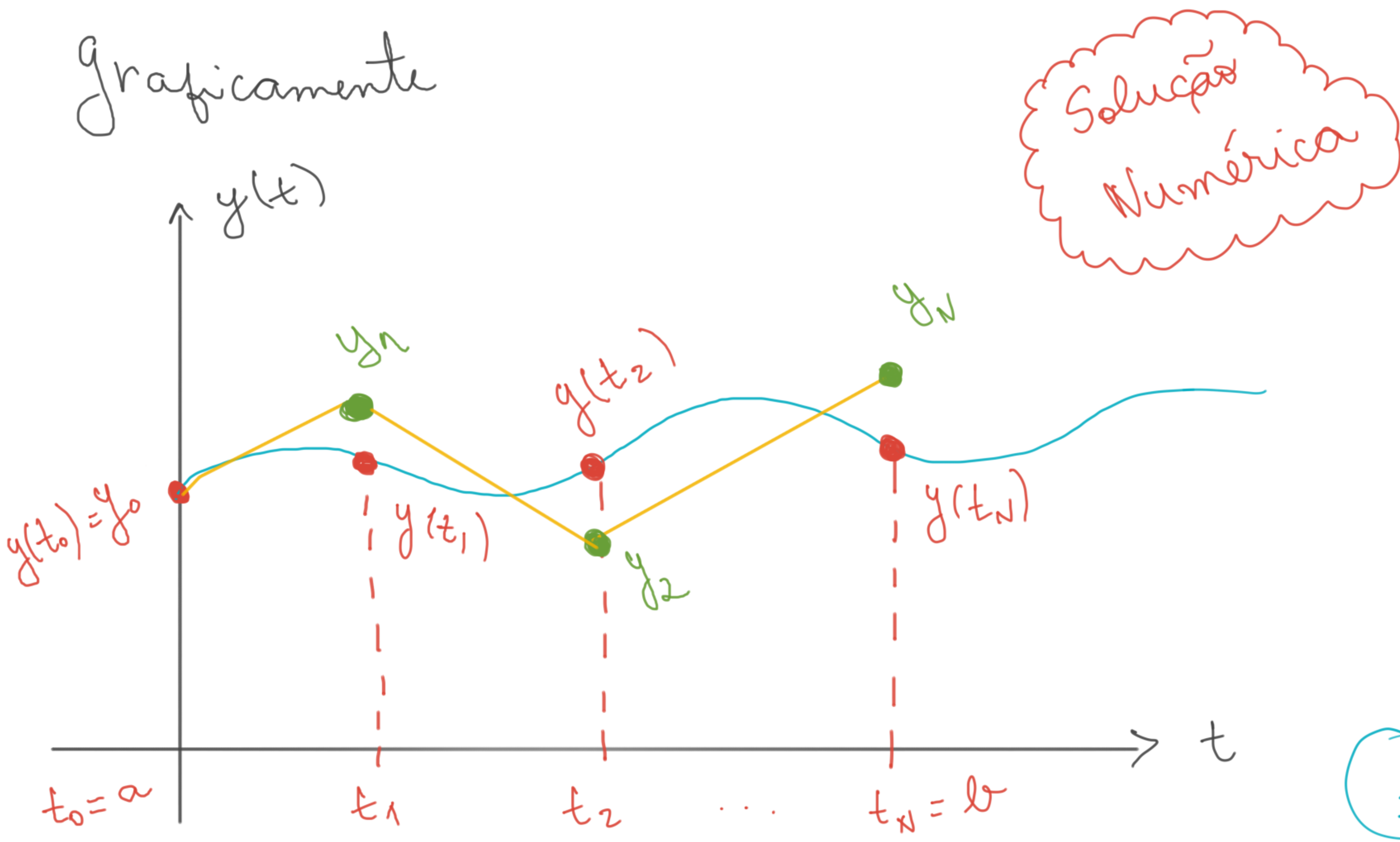
Solução numérica

- Nosso objetivo é determinar aproximações y_n da solução analítica $y(t_n)$ nos pontos da malha. Portanto, a solução numérica será uma tabela de valores da forma

t_n	t_0	t_1	$\dots$	t_N
y_n	y_0	y_1	$\dots$	y_n

Solução Numérica

Graficamente



- Seja f uma função com derivadas de todas as ordens em algum intervalo contendo o ponto t_i em seu interior. A expansão em série de Taylor para $f(t_i+h)$ em torno de t_i é

$$f(t_i+h) = f(t_i) + h f'(t_i) + \frac{h^2}{2!} f''(t_i) + \dots + \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(t_i) +$$

$$+ \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} f^{(k+1)}(c), \text{ com } c \in (t_i, t_i+h)$$

Erro de truncamento

Série de Taylor

Método de Euler

- É o método mais simples. Basta tomar

$k = 1$ expansão de Taylor

$$y(t_i + h) = y(t_i) + h\, y'(t_i)$$

Notação:

$$y'(t_i) = f(t_i, y(t_i)) = f_i$$

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + h f_i}$$

- método de 1-passo (requer informações apenas do passo anterior)
- método explícito

(termos do lado direito dependem apenas de t_i)

Exemplo: Resolva o PVI

$$\begin{cases} y' = -y + t + 2 \\ \underbrace{y(0)}_{y_0} = 2 \end{cases}, \quad t \in [0, 0.3] \quad h = 0.1$$

- $y_1 = y_0 + h f_0$

$f = -y + t + 2 \Rightarrow f_0 = f(t_0, y_0) = f(0, 2) = 0$

$y_1 = 2 + (0.1) \times 0 = 2 \quad \therefore \quad y_1 = 2$

- $y_2 = y_1 + h f_1$

$f_1 = f(t_1, y_1) = f(0.1 ; 2) = 0.1$

$y_2 = 2 + (0.1) \times (0.1) = 2.01$

- $y_3 = y_2 + h f_2$

$f_2 = f(t_2, y_2) = f(0.2 , 2.01) = 0.19$

$y_3 = 2.01 + (0.1) \times (0.19) = 2.019$

Logo, a solução do PVI fornecida pelo método de Euler é

t_n	0	0.1	0.2	0.3
y_n	2	2	2.01	2.019
$y(t_n)$	2	2.00484	2.01873	2.04082

Solução exata do PVI : $y(t) = e^{-t} + t + 1$

O erro no método de Euler é

$$\boxed{\text{Erro} = \frac{h^2}{2} y''(c)} \; ; \quad c \in [t_i, t_i + h]$$

ou ainda $\boxed{\text{Erro} = \frac{h^2}{2} M \; ;}$ em que $M = \max_{t \in [a,b]} |y''(t)|$

EXEMPLO: Considere o PVI $\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$. Determine o número mínimo de passos que se pode usar o método de Euler para aproximar $y(0.04)$ com erro menor ou igual a 5×10^{-4}!

Neste caso, a solução analítica do PVI é

$y(t) = e^t$. Então, $M = \max_{t \in [0, 0.04]} |y''(t)| = e^{0.04} = 1.0408$

$\Rightarrow |y''(c)| \leq M$

Assim, $\text{Erro} \leq \frac{1.0408}{2} h^2 \leq 5 \times 10^{-4} \Rightarrow h^2 \leq \frac{2 \times 5 \times 10^{-4}}{1.0408} = \frac{10^{-3}}{1.0408}$

$\Rightarrow \boxed{h \leq 0.031}$. Considerando pontos igualmente espaçados;

$t_n = t_0 + nh = 0.04 \Rightarrow \boxed{h = \frac{0.04}{n}}$. Assim; $\frac{0.04}{n} \leq 0.031$

$\Rightarrow n \geq \frac{0.04}{0.031} \Rightarrow n \geq 1.29 \Rightarrow \boxed{n \geq 2}$

Método do Trapézio

- Considere o PVI $\begin{cases} y' = f(t,y) & t \in [a,b] \\ y(t_0) = y_0 & t_0 = a \end{cases}$

$$y_{i+2} - y_{i+1} = \int_{t_{i+1}}^{t_{i+2}} f(t,y)\,dt \approx h\left[f_{i+1} C_0^1 + f_{i+2} C_1^1 \right]$$

$$y_{i+2} - y_{i+1} = \frac{h}{2}\left[f_{i+1} + f_{i+2} \right] \Rightarrow \boxed{y_{i+2} = y_{i+1} + \frac{h}{2}\left[f_{i+1} + f_{i+2} \right]}$$

- método implícito de 1-passo

Método de Simpson

$$y_{i+2} - y_i = \int_{t_i}^{t_{i+2}} f(t, y)\,dt \approx \frac{h}{3}\left[f_i + 4 f_{i+1} + f_{i+2} \right]$$

$$\Rightarrow \boxed{y_{i+2} = y_i + \frac{h}{3}\left[f_i + 4 f_{i+1} + f_{i+2} \right]}$$

- método implícito de 2-passos

Métodos de Runge Kutta

- Considere o PVI $\begin{cases} y' = f(t,y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ $\quad t \in [a,b]$, $t_0 = a$

Forma geral de Runge Kutta de R estágios

$$y_{i+1} = y_i + h\,F(t_i, y_i, h) \;;\quad \text{em que}$$

$$F(t_i, y_i, h) = \sum_{n=1}^{R} c_n k_n \quad \text{com} \quad \sum_{n=1}^{R} c_n = 1 \;;$$

com

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + h a_2, y_i + b_{21} h k_1) \qquad a_2 = b_{21}$$

$$k_3 = f\left(t_i + h a_3, y_i + h[b_{31} k_1 + b_{32} k_2]\right) \qquad a_3 = b_{31} + b_{32}$$

$$k_4 = f\left(t_i + h a_4, y_i + h\left[b_{41} k_1 + b_{42} K_2 + b_{43} K_3\right]\right) \qquad a_4 = b_{41} + b_{42} + b_{43}$$

$$\vdots$$

$$K_R = f\left(t_i + h a_R, y_i + h\left[b_{R1} k_1 + \dots + b_{R\,R-1} k_{R-1}\right]\right)$$

$$a_R = b_R + \dots + b_{R\,R-1}$$

Para $\boxed{R=1}$, temos

$$y_{i+1} = y_i + h\, c_1 k_1 \quad ; \quad \text{em que } c_1 = 1$$
$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

Isto é,

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

; que coincide com o <u>método de Euler</u>.

Runge Kutta de ordem 1

23

$\boxed{R = 2}$

$$y_{i+1} = y_i + h\,F(t_i, y_i, h) \quad ; \quad \text{com} \quad F(t_i, y_i, h) = c_1 k_1 + c_2 k_2$$

$$c_1 + c_2 = 1$$

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + h a_2 \, , \, y_i + h\, b_{21} k_1) \quad ; \quad a_2 = b_{21}$$

utilizando a expansão de Taylor de ordem 2 em k_2 ;

podemos determinar c_1, c_2 e a_2.

Este cálculo nos dará $\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = \frac{1}{2} \end{cases}$

Método de Euler Modificado

$c_1 = 0 \Rightarrow c_2 = 1$ e $a_2 = \frac{1}{2}$

Método de Euler Melhorado

$c_1 = \frac{1}{2} \Rightarrow c_2 = \frac{1}{2}$ e $a_2 = 1$

Runge Kutta de Ordem 2

Método de Euler Modificado $\left(c_1 = 0 \Rightarrow c_2 = 1 \text{ e } a_2 = \frac{1}{2} \right)$

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

$$F(t_i, y_i, h) = c_1 k_1 + c_2 k_2$$

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + a_2 h,\ y_i + a_2 h k_1)$$

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + h k_2 \ ; \ k_1 = f(t_i, y_i) \ ; \ k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2} ;\ y_i + \frac{h}{2} k_1\right)}$$

Método de Euler Melhorado $\left(c_1 = \frac{1}{2} \Rightarrow c_2 = \frac{1}{2} \text{ e } a_2 = 1 \right)$

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

$$F(t_i, y_i, h) = c_1 k_1 + c_2 k_2$$

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + h a_2, y_i + h a_2 k_1)$$

$$\boxed{\begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \;;\; k_1 = f(t_i, y_i) \\ k_2 = f(t_i + h, y_i + h k_1) \end{array}}$$

Runge Kutta de Ordem 4 $(R = 4)$

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

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2} ; y_i + \frac{1}{2} h k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2} ; y_i + \frac{1}{2} h k_2\right)$$

$$k_4 = f\left(t_i + h ; y_i + h k_3\right)$$

Vamos mostrar que o método de Euler melhorado é um método de ordem 2.

Em outras palavras, vamos encontrar o maior valor p tal que $|y(t_i+h) - y_{i+1}| \le C h^{p+1}$, para algum $C > 0$ supondo que $y_i = y(t_i)$.

Expandindo $y(t_i+h)$ em série de Taylor em torno de t_i, temos $y(t_i+h) = y(t_i) + h\,y'(t_i) + \frac{h^2}{2}\,y''(t_i) + \frac{h^3}{6}\,y'''(\xi)$; para algum ξ entre t_i e t_i+h.

$y'(t_i) = f(t_i, y_i) = f$ e $y''(t_i) = f'(t_i, y_i) = f_t(t_i, y_i) + f_y(t_i, y_i)\,y'(t_i) = f_t + f_y f$. Assim;

$$\boxed{y(t_i+h)} = y_i + hf + \frac{h^2}{2}(f_t + f_y f) + \underbrace{c_1}_{= y'''(\xi)/6} h^3 \quad (1)$$

Sabemos também que $y_{i+1} = y_i + hF(t_i, y_i, h)$

$= y_i + h\left[af + bf\underline{\underline{(t_i + ch,\, y_i + chf)}}\right]$ em que

$f = f(t_i, y_i)$. Supondo que f é diferenciável, temos

$\underline{\underline{f(t_i + ch,\, y_i + chf)}} = f(t_i, y_i) + f_t(t_i, y_i)\,ch + f_y(t_i, y_i)\,chf$

$+ C_2 h^2$, em que C_2 depende das derivadas parciais de ordem 2 de f. Assim, $\boxed{y_{i+1}} = y_i + ahf + b(f + f_t ch + f_y chf$

$+ c_2 h) = \underline{y_i + (a+b)fh + bc(f_t + f_y f)h^2 + bc_2 h^3}$. (2)

Combinando os resultados (1) e (2), o erro local é:

$$|y(t_i+h) - y_{i+1}| = \left|(1-a-b) f h + \left(\frac{1}{2} - bc\right)(f_t + f_y f) h^2 + (c_1 - b C_2) h^3\right|.$$

Portanto, como $a+b=1$ e $2bc=1$ temos que $\boxed{|y(t_i+h) - y_{i+1}| \leq C h^3}$ para algum $C \geq |c_1 - b c_2|$.

Lembre-se que no método de Euler melhorado $a = 1/2$; $b = 1/2$ e $c = 1$

31

Analogamente, pode-se mostrar que o método de Runge-Kutta de ordem 4 satisfaz

$$\boxed{\left| y(t_i+h) - y_{i+1} \right| \leq c h^5}\,; \text{ para algum } c>0.$$

Métodos do tipo Previsor - Corretor

Idéia: usar um método explícito (previsor) para aproximar uma determinada quantidade e um método implícito (corretor) para refiná-la.

$$\begin{cases} y' = f(t,y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}, \quad \begin{matrix} t \in [a,b] \\ t_0 = a \end{matrix}$$

Como calcular y_{i+1}?

Aproximamos y_{i+1} através do seguinte processo iterativo

1) Por meio de um método explícito $\boxed{P}$ encontramos

$$y_{i+1}^{(k)} \approx y_{i+1}$$

2) Calculamos $f_{i+1}^{(k)} \approx f(t_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})$

3) Melhoramos a aproximação de y_{i+1} utilizando f_{i+1} do passo 2 e um método implícito $\boxed{C}$ para obter $y_{i+1}^{(k+1)}$.

4) Volte ao passo 2 até que $|y_{i+1}^{(k+1)} - y_{i+1}^{(k)}| < \varepsilon$ ou se atinja um kmáx.

EXEMPLO

$$\begin{cases} y' = -y + t + 2 \\ y(0) = 2 \end{cases} \qquad t \in [0, 0.3] \qquad h = 0.1 \qquad \varepsilon < 10^{-3}$$

P: método de Euler : $y_{i+1} = y_i + h f_i$

C: método do Trapézio : $y_{i+2} = y_{i+1} + \frac{h}{2}\left[f_{i+1} + f_{i+2} \right]$

$y_1 = y_0 + h f_0$, $f_0 = f(t_0, y_0) = f(0,2) = 0$ $\therefore$ $y_1 = 2$

$f_1 = f(0.1, 2) = -2 + 0.1 + 2 = 0.1$

- $y_2^{(0)} = y_1 + h f_1 = 2 + (0.1)\times(0.1) = 2.01$

$$f_2^{(0)} = f(t_2, y_2^{(0)}) = f(0.2\,,\,2.01) = -2.01 + 0.2 + 2 = 0.19$$

$$y_2^{(1)} = y_1 + \frac{h}{2}\left[f_1 + f_2^{(0)}\right] = 2 + \frac{0.1}{2}\left[0.1 + 0.19\right] = 2.0145$$

$$\left| y_2^{(1)} - y_2^{(0)} \right| = \left| 2.0145 - 2.01 \right| = 0.0045$$

$$f_2^{(1)} = f(t_2, y_2^{(1)}) = f(0.2\,,\,2.0145) = -2.0145 + 0.2 + 2 = 0.1855$$

$$y_2^{(2)} = y_1 + \frac{h}{2}\left[f_1 + f_2^{(1)}\right] = 2 + \frac{0.1}{2}\left[0.1 + 0.1855\right] = 2.014275$$

$$\left| y_2^{(2)} - y_2^{(1)} \right| = 0.000225 < 0.001 = 10^{-3}$$

$y_2 = 2.014275$

- $y_3^{(0)} = y_2 + h f_2 = 2.014275 + 0.1\, f(0.2, 2.014275)$

$f(0.2, 2.014275) = -2.014275 + 0.2 + 2 = 0.185725$

$y_3^{(0)} = 2.014275 + (0.1) \times 0.185725 = 2.0328475$

$$y_3^{(1)} = y_2 + \frac{h}{2}\left[f_2 + f_3^{(0)}\right] = 2.014275 + \frac{0.1}{2}\left[0.185725 + \underbrace{f(0.3, y_3^{(0)})}_{\substack{-2.0328475+0.3+2 \\ = 0.2671525}}\right]$$

$= 2.03691875$

$|y_3^{(0)} - y_3^{(1)}| = 0.00404 > 10^{-3}$

$$y_3^{(2)} = y_2 + \frac{h}{2}\left[f_2 + f_3^{(1)}\right] = 2.014275 + \frac{0.1}{2}\left[0.185725 + \underbrace{f(0.3, y_3^{(1)})}_{\substack{-2.03691875+0.3+2 \\ = 0.26308125}}\right]$$

$= 2.0367153063$

$y_3 = 2.0367153063$

$$\left| y_3^{(2)} - y_3^{(1)} \right| = 0.0002035 < 10^{-3}$$

Portanto, a solução numérica do PVI é:

t_i	0	0.1	0.2	0.3
y_i	2	2	2.014275	2.036715
$y(t_i)$	2	2.0048	2.01873	2.04082

Sistemas de Equações Diferenciais Ordinárias de 1ª ordem

$$\begin{cases} y_1' = f_1(t, y_1, \dots, y_n) \\ y_2' = f_2(t, y_1, \dots, y_n) \\ \vdots \\ y_n' = f_n(t, y_1, \dots, y_n) \\ y_1(t_0) = y_{01}, \dots, y_n(t_0) = y_{0n} \end{cases} \iff \begin{cases} Y' = F(t, Y) \\ Y(t_0) = Y_0 \end{cases}$$

com

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} \text{ e } Y_0 = \begin{pmatrix} y_{01} \\ \vdots \\ y_{0n} \end{pmatrix}.$$

Exemplo: Modelo Epidêmico SIR

Usando uma população fixa $N = S(t) + I(t) + R(t)$

$$\begin{cases} S' = -\beta S I \\ I' = \beta S I - \gamma I \\ R' = \gamma I \end{cases}$$

β, γ : parâmetros do modelo.

$\boxed{S(t)}$: indivíduos não infectados no instante t, suscetíveis à doença.

$\boxed{I(t)}$: indivíduos infectados no instante t capazes de transmitir a doença aos suscetíveis.

$\boxed{R(t)}$: indivíduos recuperados no instante t, que não podem ser infectados novamente nem são capazes de transmitir a doença.

Assim, $Y' = F(t, Y)$ com $Y(t) = \begin{pmatrix} S(t) \\ I(t) \\ R(t) \end{pmatrix}$

e $F(t, Y(t)) = \begin{pmatrix} -\beta S(t) I(t) \\ \beta S(t) I(t) - \gamma I(t) \\ \gamma I(t) \end{pmatrix}$. A condição inicial

$Y_0 \in \mathbb{R}^3$ varia de acordo com a quantidade de indivíduos suscetíveis, infectados e recuperados no instante inicial.

Por exemplo: $S(t_0) = 99$; $I(t_0) = 1$; $R(t_0) = 0$.

Por exemplo, o método de Euler pode ser usado da seguinte forma

$$Y_0 = \begin{pmatrix} S_0 \\ I_0 \\ R_0 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{Y_{i+1} = Y_i + h F_i}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} S_{i+1} \\ I_{i+1} \\ R_{i+1} \end{pmatrix}}_{Y_{i+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} S_i \\ I_i \\ R_i \end{pmatrix}}_{Y_i} + h \overbrace{\begin{pmatrix} -\beta S_i I_i \\ \beta S_i I_i - \gamma I_i \\ \gamma I_i \end{pmatrix}}^{F_i}$$

Equações de Ordem Superior

$$\boxed{y^{(n)} = f(t, y, y', \ldots, y^{(n-1)})} \quad ; \quad \text{com}$$

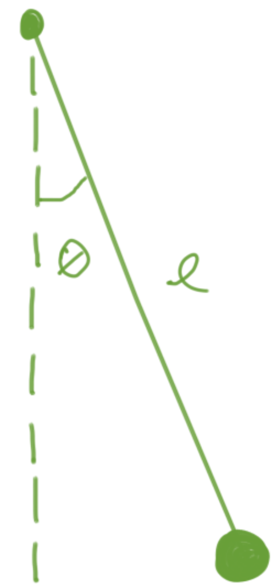
$$y(t_0) = y_0 \; ; \; y'(t_0) = y'_0 \; ; \; \ldots \; , \; y^{(n-1)}(t_0) = y_0^{(n-1)} .$$

Como resolver esta equação para obter $y(t)$?

Vamos transformá-la em um sistema de 1ª ordem!

EXEMPLO: Equação do pêndulo

$$\boxed{\theta''(t) + \frac{g}{l}\,\text{sen}\,\theta(t) = 0 \qquad g: \text{aceleração gravidade}}$$



- Equação não linear de 2ª ordem.

$\theta(t_0) = \theta_0$; $\theta'(t_0) = v_0$ (condição inicial)

- Aproximação linear : $\boxed{\theta'' + \frac{g}{l}\theta = 0}$ (pequenas oscilações $\theta \approx 0 \therefore \text{sen}\,\theta \approx \theta$)

Eq. linear de 2ª ordem homogênea

Fazendo a mudança de variáveis

$$\begin{cases} \theta = y_1 \\ \theta' = y_2 \end{cases} \quad ; \quad \text{temos} \quad \begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -\dfrac{g}{l} \operatorname{sen} y_1 \end{cases} \quad ; \quad \text{com}$$

$$\begin{cases} y_1(t_0) = \theta_0 \\ y_2(t_0) = v_0 \end{cases}$$

Sistema de $1^{\underline{a}}$ ordem