Computação Científica com EDOs
Solução numérica de EDOs – II

Prof. Daniel G. Alfaro Vigo
dgalfaro@ic.ufrj.br
DC–IC–UFRJ

CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Parte II

Métodos de passo simples

Métodos de passo simples

- Todos os métodos apresentados podem ser escritos na forma

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t\, \Phi(t_n, y_n, \Delta t)$$

  em que $\Phi()$ representa uma expressão envolvendo a função f e suas derivadas.
- Um método aproximado para resolver um PVI é dito de **passo simples**, se pode ser escrito na forma indicada acima.
- Nesses métodos a aproximação da função incógnita para o tempo t_{n+1} é obtida a partir da aproximação no tempo t_n e as aproximações para tempos anteriores não são usadas explicitamente.

Definição: ordem do método

O método possui **ordem** p se para qualquer solução $y(t)$ da EDO, o **erro local** satisfaz

$$|y(t+\Delta t) - (y(t) + \Delta t\,\Phi(t, y(t), \Delta t))| \leq C(\Delta t)^{p+1},$$

onde a constante C não depende de Δt.

Métodos de passo simples (cont.)

Definição: ordem do método

O método possui **ordem** p se para qualquer solução $y(t)$ da EDO, o **erro local** satisfaz

$$|y(t+\Delta t) - (y(t) + \Delta t\, \Phi(t, y(t), \Delta t))| \leq C(\Delta t)^{p+1},$$

onde a constante C não depende de Δt.

Ordem de convergência

Se as funções f e Φ são suficientemente regulares e o método possui ordem p, então as aproximações satisfazem que

$$E_{global} = \max_{t_0 \leq t_k \leq t_f} |y(t_k) - y_k| \leq A\,(\Delta t)^p$$

em que a constante $A > 0$ não depende de Δt.

Como construir bons métodos de passo simples sem usar as derivadas de f?

Como construir bons métodos de passo simples sem usar as derivadas de f?

- Essa é uma **tarefa bem complicada** se não usamos as derivadas da função f.
- C. Runge e W. Kutta, no período de 1895–1901, mostraram que é possível recuperar com boa precisão o polinômio de Taylor sem usar as derivadas da função f!
- Eles dividiram o cálculo de cada passo em vários estágios, em cada um deles a função f era avaliada em pontos intermediários selecionados apropriadamente.
- Na fase final, a aproximação é obtida fazendo uma média ponderada dos valores calculados.

Métodos de Runge-Kutta (R-K)

Algúns exemplos desse tipo de método.

Método R-K de 1a ordem:

Coincide com o **Método de Euler**

Métodos de Runge-Kutta (R-K)

Algúns exemplos desse tipo de método.

Método R-K de 1a ordem:

Coincide com o **Método de Euler**

Método R-K de 2a ordem: Método de Euler aperfeiçoado (ou Método de Heun)

$$\begin{cases} y_{n+1}^E = y_n + \Delta t\, f(t_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2}\left(f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^E)\right) \end{cases}$$

pode ser re-escrito na forma

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t\, f(t_n, y_n) \\ k_2 = \Delta t\, f(t_{n+1}, y_n + k_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{cases}$$

Integrando $y'(t)$ no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ vamos obter que

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t)\,dt.$$

Usando a regra do trapézio chegamos em

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \frac{\Delta t}{2}\big(y'(t_n) + y'(t_{n+1})\big) - \frac{y'''(\tau_n)}{12}(\Delta t)^3,$$

onde $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Usando a EDO: $y'(t) = f(t, y(t))$ e truncando, temos que

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + \frac{\Delta t}{2}\big(f(t_n, y(t_n)) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))\big).$$

Método de Heun: dedução

Substituindo $y(t_n)$ e $y(t_{n+1})$ pelas suas aproximações, chegamos em

$$\color{blue}{y_{n+1}} \approx y_n + \frac{\Delta t}{2}\big(f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \color{green}{y_{n+1}})\big).$$

Método de Heun: dedução

Substituindo $y(t_n)$ e $y(t_{n+1})$ pelas suas aproximações, chegamos em

$$y_{n+1} \approx y_n + \frac{\Delta t}{2}\big(f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})\big).$$

Para deixar y_{n+1} isolado no lado esquerdo, introduzimos no lado direito uma aproximação intermediária dada pelo método de Euler e obtemos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2}\big(f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^E)\big),$$

onde

$$y_{n+1}^E = y_n + \Delta t\, f(t_n, y_n).$$

Método de Heun: ordem de convergência

Da dedução acima, considerando $y_n = y(t_n)$ obtemos que o erro local satisfaz

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) - y_{n+1} &= \frac{\Delta t}{2}\big(f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, y_n^E)\big) - \tfrac{y'''(\tau_n)}{12}(\Delta t)^3 \\ &= \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, \tilde{y}_n)\left(y(t_{n+1}) - y_n^E\right) - \tfrac{y'''(\tau_n)}{12}(\Delta t)^3 \end{aligned}$$

em que $\tilde{y}_n$ está entre $y(t_{n+1})$ e y_n^E, e $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Método de Heun: ordem de convergência

Da dedução acima, considerando $y_n = y(t_n)$ obtemos que o erro local satisfaz

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) - y_{n+1} &= \frac{\Delta t}{2}\left(f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) - f(t_{n+1}, y_n^E)\right) - \tfrac{y'''(\tau_n)}{12}(\Delta t)^3 \\ &= \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, \tilde{y}_n)\left(y(t_{n+1}) - y_n^E\right) - \tfrac{y'''(\tau_n)}{12}(\Delta t)^3 \end{aligned}$$

em que $\tilde{y}_n$ está entre $y(t_{n+1})$ e y_n^E, e $t_n < \tau_n < t_{n+1}$.

Sabemos que $y(t_{n+1}) - y_n^E = \frac{1}{2}y''(\tilde{\tau}_n)(\Delta t)^2$ onde $t_n < \tilde{\tau}_n < t_{n+1}$.

Logo

$$y(t_{n+1}) - y_{n+1} = \left(\frac{1}{4}y''(\tilde{\tau_n})\frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, \tilde{y}_n) - \tfrac{y'''(\tau_n)}{12}\right)(\Delta t)^3.$$

$\Rightarrow$ Portanto, o método de Heun é de segunda ordem!

Para a EDO $y' = \lambda\, y$, esse método coincide com o método da série de Taylor de segunda ordem.

$$
\begin{aligned}
k_1 &= \lambda\Delta t\, y_n \\
k_2 &= \lambda\Delta t(y_n + k_1) = \lambda\Delta t(y_n + \lambda\Delta t y_n) \\
&= \lambda\Delta t\, y_n + (\lambda\Delta t)^2\, y_n
\end{aligned}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}\left(\lambda\Delta t\, y_n + \lambda\Delta t\, y_n + (\lambda\Delta t)^2\, y_n\right) \\
&= y_n + \frac{1}{2}\left(2\lambda\Delta t\, y_n + (\lambda\Delta t)^2\, y_n\right) \\
y_{n+1} &= y_n \left(1 + \lambda\Delta t + \frac{(\lambda\Delta t)^2}{2}\right)
\end{aligned}
$$

Método R-K de 3a ordem: **Método de Ralston**

$$\begin{cases} \bar{y}_1 = y_n \\ \bar{y}_2 = y_n + \frac{\Delta t}{2}\, f(t_n, \bar{y}_1) \\ \bar{y}_3 = y_n + \frac{3\Delta t}{4}\, f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{y}_2) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{9}\, \big(2f(t_n, \bar{y}_1) + 3f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \bar{y}_2) + 4f(t_n + \frac{3\Delta t}{4}, \bar{y}_3)\big) \end{cases}$$

ou na forma

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t\, f(t_n, y_n) \\ k_2 = \Delta t\, f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = \Delta t\, f(t_n + \frac{3}{4}\Delta t, y_n + \frac{3}{4}k_2) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{9}\,(2k_1 + 3k_2 + 4k_3) \end{cases}$$

Método R-K de 4a ordem: **Método "RK4 clássico"**

$$
\begin{cases}
\bar{y}_1 = y_n \\
\bar{y}_2 = y_n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n, \bar{y}_1) \\
\bar{y}_3 = y_n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{y}_2) \\
\bar{y}_4 = y_n + \Delta t\, f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, \bar{y}_3) \\
y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{6} \big(f(t_n, \bar{y}_1) + 2f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \bar{y}_2) \\
\qquad\qquad +2f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \bar{y}_3) + f(t_n + \Delta t, \bar{y}_4) \big)
\end{cases}
$$

ou na forma

$$
\begin{cases}
k_1 = \Delta t\, f(t_n, y_n) \\
k_2 = \Delta t\, f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\
k_3 = \Delta t\, f(t_n + \frac{1}{2}\Delta t, y_n + \frac{1}{2}k_2) \\
k_4 = \Delta t\, f(t_n + \Delta t, y_n + k_3) \\
y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
\end{cases}
$$

Exemplo

Vamos resolver o exemplo inicial, agora aplicando o método de Ralston.
a) Como $\Delta t = 1$ e $f(t, y) = 0.04\,y$, para $n = 0$ obtemos:

$$
\begin{aligned}
k_1 &= \Delta t\, f(t_0, y_0) = 1 \cdot 0.04 \cdot 1000 = 40 \\
k_2 &= \Delta t\, f(t_0 + \tfrac{1}{2}\Delta t, y_0 + \tfrac{1}{2}k_1) = 1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 40/2) = 40.8 \\
k_3 &= \Delta t\, f(t_0 + \tfrac{3}{4}\Delta t, y_0 + \tfrac{3}{4}k_2) = 1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 3/4 \cdot 40.8) = 41.224 \\
y(1) \approx y_1 &= y_0 + (2k_1 + 3k_2 + 4k_3)/9 \\
&= 1000 + 1 \cdot (2 \cdot 40 + 3 \cdot 40.8 + 4 \cdot 41.224)/9 \\
&= 1040.810666666667
\end{aligned}
$$

$$\boxed{y(1) \approx 1040.810666666667}$$

Para o erro absolutos obtemos

Erro $= |y(1) - y_1| \approx 1.1 \times 10^{-4}$

b) $\Delta t = 0.1$, $N = 10$ e y_{10} será a aproximação de $y(1)$.

$$n = 0: \; k_1 = 0.1 \cdot 0.04 \cdot 1000 = 4$$
$$k_2 = 0.1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 4/2) = 4.008$$
$$k_3 = 0.1 \cdot 0.04 \cdot (1000 + 3/4 \cdot 4.008) = 4.012024$$
$$y_1 = y_0 + (2k_1 + 3k_2 + 4k_3)/9$$
$$= 1000 + 1 \cdot (2 \cdot 40 + 3 \cdot 40.8 + 4 \cdot 41.224)/9$$
$$= 1004.008010666667$$
$$n = 1: \; k_1 = 4.016032042666667, \; k_2 = 4.024064106752$$
$$k_3 = 4.028104234986922, \; y_2 = 1008.032085482837$$
$$n = 2: \; k_1 = 4.03212834193135, \; k_2 = 4.040192598615213$$
$$k_3 = 4.044248919727195, \; y_3 = 1012.072288833795$$

Exemplo: solução (cont.)

$$\vdots$$

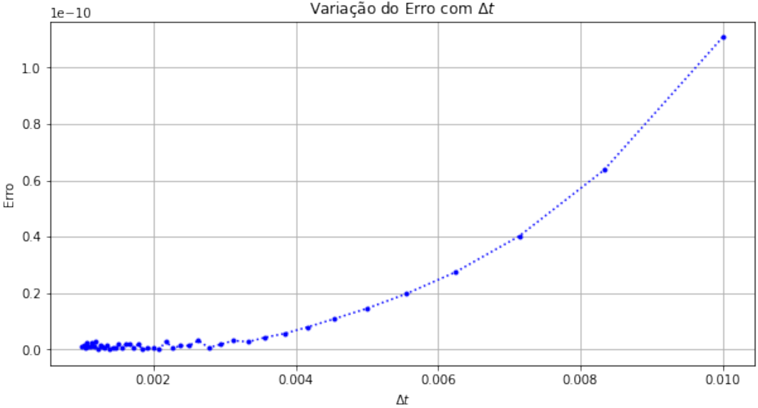
$$n = 7: \; k_1 = 4.113582737379534, \; k_2 = 4.121809902854293$$
$$k_3 = 4.125948167088097, \; y_8 = 1032.517505217292$$
$$n = 8: \; k_1 = 4.130070020869167, \; k_2 = 4.138330160910905$$
$$k_3 = 4.1424850113519, \; y_9 = 1036.655846391723$$
$$n = 9: \; k_1 = 4.14662338556689, \; k_2 = 4.15491663233802 4$$
$$k_3 = 4.159088135463906, \; y_{10} = 1040.810774081723$$

$$\boxed{y(1) \approx 1040.810774081723}$$

Para o erro absoluto obtemos

Erro $= |y(1) - y_{10}| \approx 1.1 \times 10^{-7}$.

Exemplo: discussão



Comportamento do erro: $|y(1) - y_N|$ vs $\Delta t = 1/N$.

Exemplo: Comparação dos métodos de R-K

N	M. Euler	M. Heun	M. Ralston
1	1040	1040.8	1040.810666666667
	0.81	0.011	1.1×10^{-4}
10	1040.72773401891	1040.810663505105	1040.810774081723
	0.083	1.1×10^{-4}	1.1×10^{-7}
100	1040.802449959209	1040.810773082514	1040.810774192259
	8.3×10^{-3}	1.1×10^{-6}	1.3×10^{-10}
1000	1040.809941566347	1040.810774181397	1040.81077419249
	8.3×10^{-4}	1.1×10^{-8}	1.0×10^{-10}

Tabela: Valores aproximados de $y(1)$ e o erro cometido quando variámos o número de passos N.

Um último exemplo

Um biólogo marinho estimou que no inicio do ano a biomassa de hadoque no Golfo do Maine era de $150\,kt$ e a do seu predador natural o cação galhudo de $50\,kt$. Considerando que a variação temporal da população do hadoque (H) e do cação galhudo (C) é governada pelo seguinte sistema de Lotka-Volterra, use o método de Euler para estimar o tamanho dessas populações ao final do ano avançando 5 passos no tempo.

$$\begin{cases} \dfrac{dH}{dt} = H\,(0.5 - 0.01\,C) \\ \dfrac{dC}{dt} = (0.001\,H - 0.2)\,C \end{cases}$$

Um último exemplo: solução

Temos que $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $N = 5$, então $\Delta t = (t_f - t_0)/N = 1/5 = 0.2$. Estamos interessados nas aproximações finais $H(1) \approx H_5$ e $C(1) \approx C_5$ partindo de $H_0 = 150$ e $C_0 = 50$.

Temos que $t_0 = 0$, $t_f = 1$ e $N = 5$, então $\Delta t = (t_f - t_0)/N = 1/5 = 0.2$.
Estamos interessados nas aproximações finais $H(1) \approx H_5$ e $C(1) \approx C_5$ partindo de $H_0 = 150$ e $C_0 = 50$.
Para este sistema a fórmula do método fica na forma vetorial:

$$\overbrace{\begin{bmatrix} H_{n+1} \\ C_{n+1} \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{y}_{n+1}} = \overbrace{\begin{bmatrix} H_n \\ C_n \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{y}_n} + \Delta t \overbrace{\begin{bmatrix} H_n\,(0.5 - 0.01\,C_n) \\ (0.001\,H_n - 0.2)\,C_n \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{y}_n)}.$$

Para $n = 0$ obtemos:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} H_1 \\ C_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 150 \\ 50 \end{bmatrix} + 0.2 \begin{bmatrix} 150\,(0.5 - 0.01 \cdot 50) \\ (0.001 \cdot 150 - 0.2)\,50 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 150 + 0.2 \cdot 150(0.5 - 0.5) \\ 50 + 0.2(0.15 - 0.2)50 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 150 \\ 49.5 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Um último exemplo: solução

Para $n = 1$:

$$\begin{bmatrix} H_2 \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 150 \\ 49.5 \end{bmatrix} + 0.2 \begin{bmatrix} 150\,(0.5 - 0.01 \cdot 49.5) \\ (0.001 \cdot 150 - 0.2)\,49.5 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 150 + 0.2 \cdot 150(0.5 - 0.495) \\ 49.5 + 0.2(0.15 - 0.2)49.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 150.15 \\ 49.005 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

Para $n = 4$:

$$\begin{bmatrix} H_5 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 151.48803794 \\ 47.563855 \end{bmatrix}$$

Concluímos que no final do ano haverá aproximadamente $151.488\,kt$ de biomassa hadoque e $47.564\,kt$ de cação galhudo.

Um último exemplo: gráfico

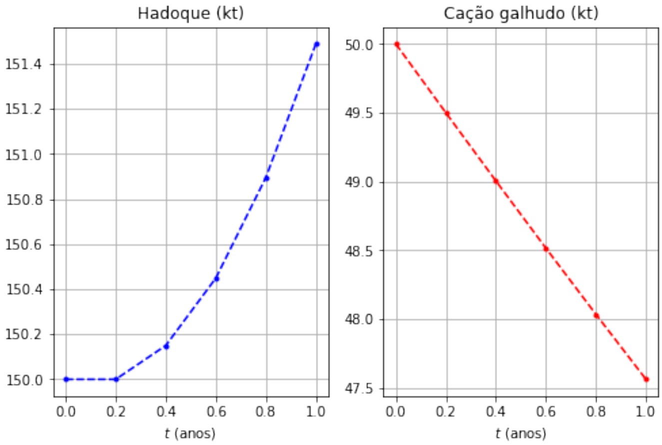


Gráfico da solução aproximada.

Um último exemplo: previsão de longo prazo

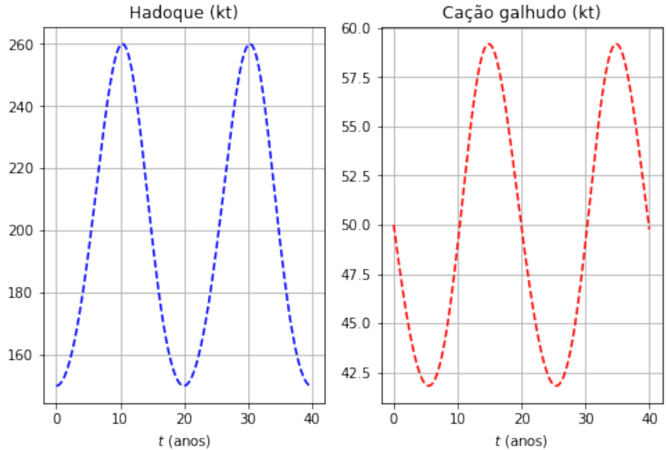


Gráfico da solução aproximada.

Comentários finais

A classe dos métodos de passo simples é muito rica e versátil.

- Métodos com alta ordem de convergência;
- Métodos adaptativos e com passo variável;
- Métodos flexíveis que podem levar em conta as particularidades específicas da EDO.
- O desenvolvimento e análise desse tipo de método é uma área de pesquisa muito ativa!

Comentários finais

A classe dos métodos de passo simples é muito rica e versátil.

- Métodos com alta ordem de convergência;
- Métodos adaptativos e com passo variável;
- Métodos flexíveis que podem levar em conta as particularidades específicas da EDO.
- O desenvolvimento e análise desse tipo de método é uma área de pesquisa muito ativa!

Outras classes de métodos para PVIs

- Métodos lineares de passo múltiplo
- Métodos baseados na fórmula de diferenciação regressiva (BDF)
- Métodos híbridos