

Resolvendo numericamente equações diferenciais com R

Esta é uma breve descrição do que é integração numérica e um tutorial prático de como fazê-la em R.*

Software necessário

Para executar os códigos R deste documento markdown em seu próprio computador, você precisa instalar o seguinte software:

- R, juntamente com os pacotes do CRAN:
 - deSolve, uma biblioteca para resolver equações diferenciais
 - ggplot2, uma biblioteca para plotagem
 - reshape2, para manipular data.frames

Para instalar o R, baixe-o de sua página inicial (Windows ou Mac): <http://www.r-project.org/>. No Linux, você pode instalá-lo usando a maneira preferida de sua distribuição, por exemplo:

- Debian/Ubuntu: `sudo apt-get install r-base`
- Fedora: `sudo yum install R`
- Arch: `sudo pacman -S r`

Para instalar os pacotes, tudo o que você precisa fazer é executar o seguinte no prompt R

```
install.packages(c("deSolve", "ggplot2", "reshape2"))
```

O código R apresentado aqui e alguns exemplos adicionais estão disponíveis em https://github.com/piklpra/do/ode_examples (obrigado, Diogro, e todos mais que desenvolveram estes tutoriais).

Executando comandos deste tutorial

Você pode executar os comandos neste notebook diretamente no R de duas maneiras:

- Abra este documento Rmarkdown no R Studio. Os blocos de código podem ser executados no R.
- Baixe o script com os comandos usados neste documento aqui.
- Copie os trechos de códigos R e cole-os no prompt R.

Como funciona a integração numérica

Digamos que temos uma equação diferencial que não sabemos (ou não queremos) derivar sua solução (analítica). Ainda podemos descobrir quais são as soluções por meio da **integração numérica**. Então, como isso funciona?

A ideia é aproximar a solução em pequenos intervalos de tempo sucessivos, extrapolando o valor da derivada em cada intervalo. Por exemplo, vamos tomar a equação diferencial

$$\frac{dx}{dt} = f(x) = x(1 - x)$$

com um valor inicial $x_0 = 0.1$ em um momento inicial $t = 0$ (ou seja, $x(0) = 0.1$). Em $t = 0$, a derivada $\frac{dx}{dt}$ é igual a $f(0.1) = 0.1 \times (1 - 0.1) = 0.09$. Escolhemos um pequeno passo de tempo, digamos, $\Delta t = 0.5$, e assumimos que esse valor da derivada é uma boa aproximação ao longo de todo este pequeno intervalo de $t = 0$ até $t = 0.5$. Isso significa que neste tempo x vai aumentar $\frac{dx}{dt} \times \Delta t = 0.09 \times 0.5 = 0.045$. Portanto, nossa solução aproximada para x em $t = 0.5$ é $x(0) + 0.045 = 0.145$. Podemos então usar este valor de

$x(0.5)$ para calcular o próximo ponto no tempo, $t = 1$. Em resumo, calculamos a derivada em cada passo, multiplicando o resultado da derivada pelo passo de tempo, e aí somamos o resultado ao valor anterior da solução, conforme tabela abaixo:

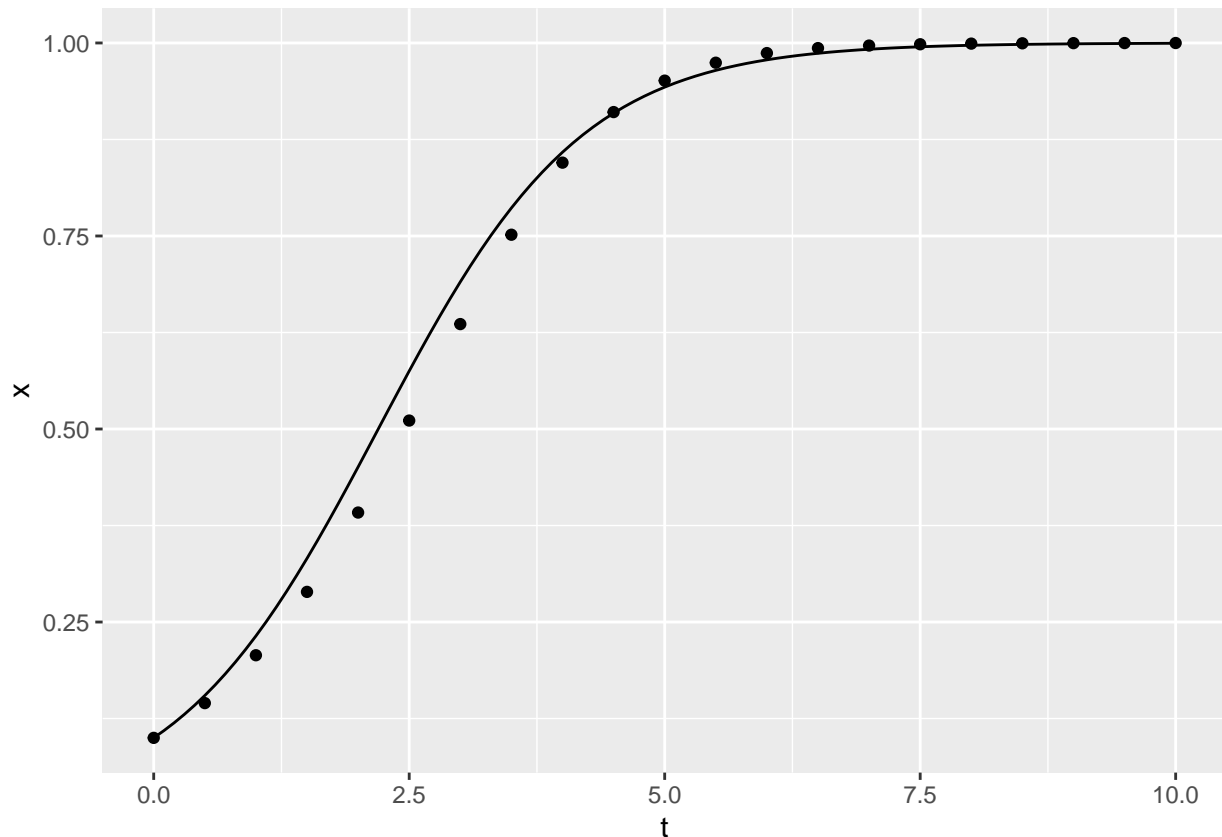
t	x	$\frac{dx}{dt}$
0	0.1	0.09
0.5	0.145	0.123975
1.0	0.206987	0.164144
1.5	0.289059	0.205504
2.0	0.391811	0.238295

Claro, isso é terrivelmente tedioso de fazer à mão, então podemos escrever um programa simples para fazer isso e fazer um gráfico da solução. Abaixo, comparamos com a solução que obtivemos na tabela acima com intervalos de tempo 0.1 com a solução analítica conhecida desta equação diferencial (a *equação logística*). **Não se preocupe com o código ainda:** existem maneiras melhores e mais simples de fazer isso! Os pontos são os valores aproximados para alguns momentos, e a linha mostra a solução analítica.

```
# intervalos de tempo: uma sequência de zero a dez em passos de 0,5
time <- seq(0, 10, by = 0.5)
# condição inicial
x0 <- 0.1
## A função a ser integrada (expressão à direita da derivada acima)
f <- function(x){x * (1.-x)}
## Um vetor vazio para armazenar os resultados
x <- c()
## Armazena a condição inicial na primeira posição do vetor
x[1] <- x0

# loop ao longo do tempo: aproxima a função a cada passo de tempo
for (i in 1:(length(time)-1)){
  x[i+1] = x[i] + 0.5 * f(x[i])
}

## plotando com ggplot2
library(ggplot2) #carrega cada biblioteca uma vez por sessão R
p <- ggplot(data = data.frame(x = x, t = time), aes(t, x)) + geom_point()
analytic <- stat_function(fun=function(t){0.1 * exp(t)/(1+0.1*(exp(t)-1.))})
print(p+analytic)
```



Por que usar bibliotecas científicas?

O método que acabamos de usar acima é chamado de *método de Euler* e é o mais simples disponível. O problema é que, embora funcione razoavelmente bem para a equação diferencial acima, em muitos casos não funciona muito bem. Há muitas maneiras de melhorá-lo: de fato, existem muitos livros inteiramente dedicados a isso. Embora muitos estudantes de matemática ou física aprendam a implementar métodos mais sofisticados, o tópico é realmente profundo. Felizmente, podemos contar com a experiência de muitas pessoas que já criaram bons algoritmos que funcionam bem na maioria das situações. Estes algoritmos estão já disponíveis na maioria das linguagens de programação. Aqui vamos usar uma ótima implementação disponível em R.

Então, como... ?

Vamos demonstrar como usar bibliotecas científicas para integrar equações diferenciais. Embora os comandos específicos dependam do software, o procedimento geral é geralmente o mesmo:

1. Defina os valores dos parâmetros e a condição inicial
2. Escolha um intervalo de tempo ou uma sequência de tempos em que deseja a solução calculada
3. Definir a função derivada na linguagem computacional (o lado direito da equação diferencial)
4. passar a função, sequência de tempo, parâmetros e condições iniciais para uma rotina de computador que executa a integração.

Uma única equação

Então, vamos começar com a mesma equação acima, a equação logística, agora expressa com os parâmetros para taxa de crescimento (r) e capacidade de carga (K):

$$\frac{dx}{dt} = f(x) = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right)$$

E vamos usar o caso em que $r = 2$, $K = 10$ e a condição inicial $x(0) = 0.1$. Mostramos como integrá-lo usando R abaixo:

1. Defina os valores dos parâmetros e condição inicial Crie os seguintes vetores:

```
# parametros: devem estar em um vetor
parameters <- c(r = 1.5, K = 10)

# condições iniciais: também devem estar em um vetor, mesmo que seja um só valor
state <- c(x = 0.1)
```

2. Escolha um intervalo de tempo ou uma sequência de tempos em que deseja a solução calculada Note que estes são momentos no tempo para os quais você quer a solução. Não são os intervalos de integração, que são definidos internamente pela função de integração.

```
## sequência de tempo
time <- seq(from=0, to=10, by = 0.01)
```

3. Defina uma função em R para a EDO ser integrada Vamos definir uma função em R para o lado direito da equação diferencial. Para esta função ser reconhecida pelas rotinas de integração da biblioteca que vamos usar (*deSolve*), esta função em R deve calcular os valores da derivada em um tempo t . Há muitas maneiras de fazer isso, mas o formato recomendado é:

- Faça uma função com três argumentos: sequência de tempo, variáveis de estado e parâmetros, nesta ordem.
- A função deve retornar uma lista com resultados da função a ser integrada.

Para fazer isso use `with(as.list(c(state, parameters)){ ... }` dentro da função R. Inclua entre parênteses a(s) função(ões) a ser(em) integrada(s) e então feche retornando a lista dos valores calculados.

```
## A ODE logística a ser integrada
logistic <- function(t, state, parameters){
  with(
    as.list(c(state, parameters)),{
      dx <- r*x*(1-x/K)
      return(list(dx))
    }
  )
}
```

4. Integrar a função Agora chame a função da biblioteca “deSolve” `ode`. Para realizar a integração, os argumentos básicos da função ‘ode’ são * `y`: o vetor de condições iniciais * `times`: o vetor com a sequência de tempo * `func`: a função R como descrito acima * `parms`: vetor de valores de parâmetro (nomeado)

```
library(deSolve) # Carrega a biblioteca para integração, basta chamar uma vez por sessão do R
## Executa a integração
out <- ode(y = state, times = time, func = logistic, parms = parameters)
```

O objeto resultante tem os valores da integração em cada ponto de tempo no vetor de tempos

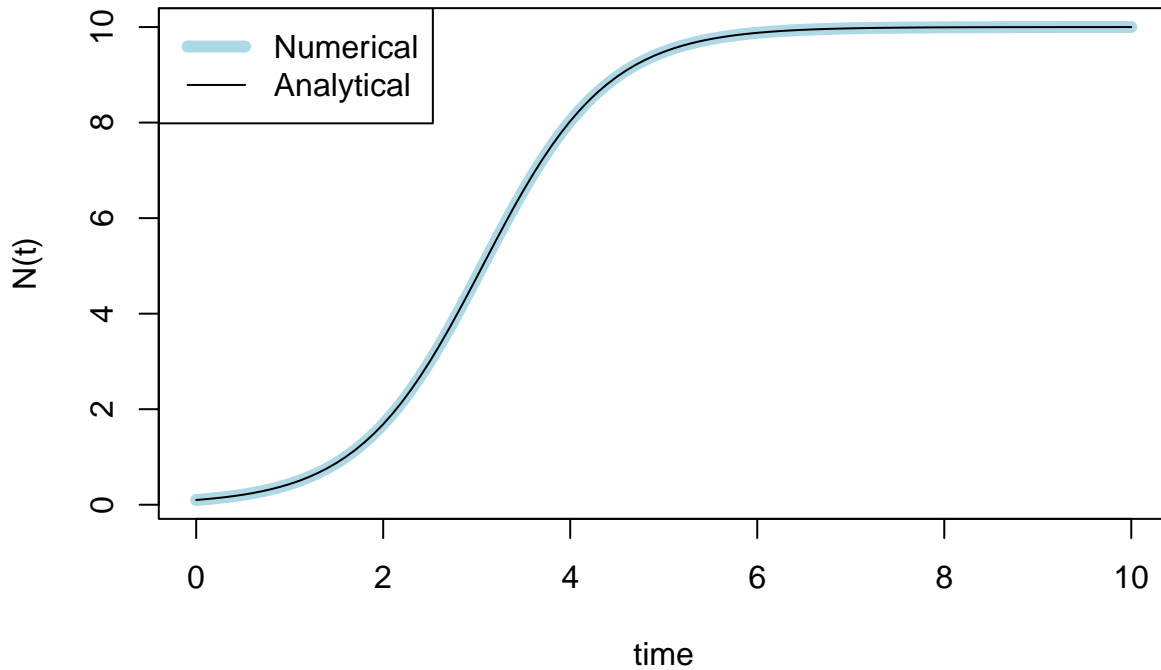
```
head(out) # primeiras 6 linhas
```

```
##      time      x
```

```
## [1,] 0.00 0.1000000
## [2,] 0.01 0.1014960
## [3,] 0.02 0.1030141
## [4,] 0.03 0.1045547
## [5,] 0.04 0.1061181
## [6,] 0.05 0.1077046
```

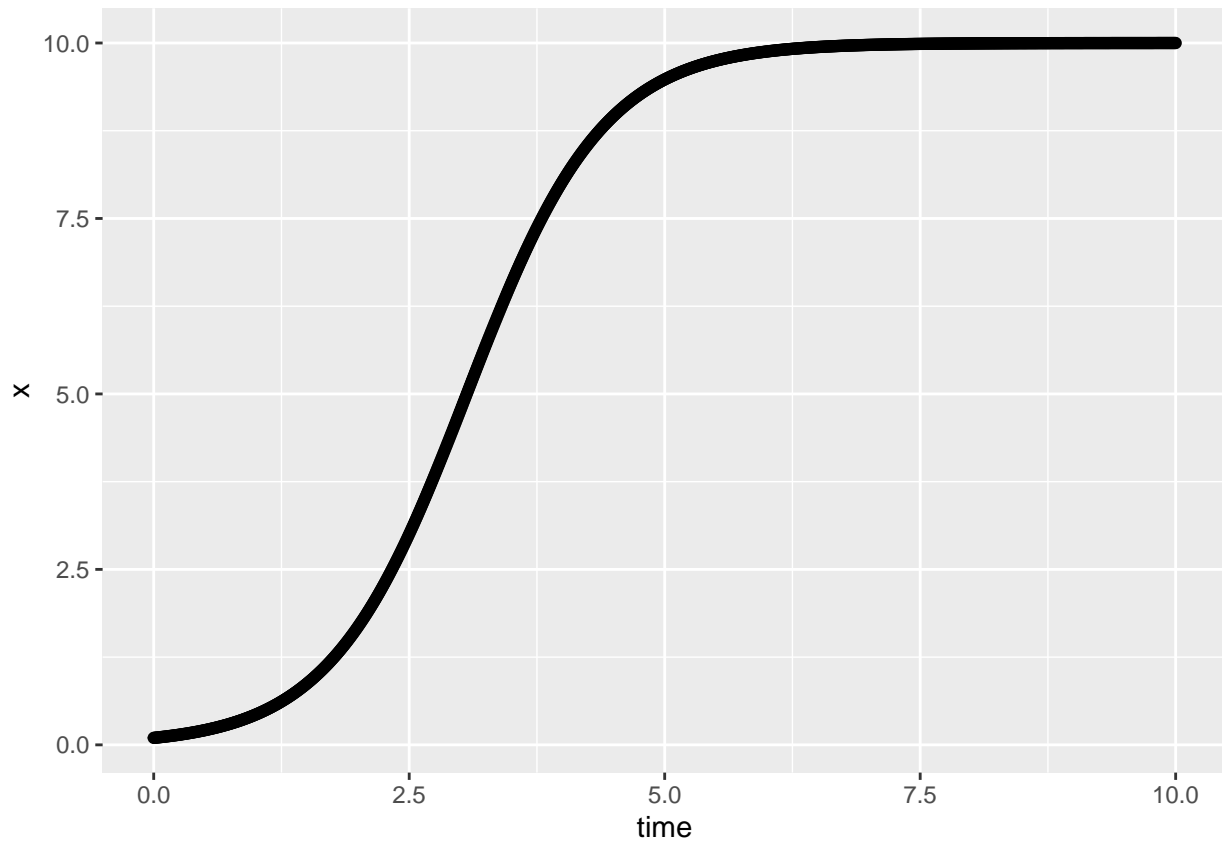
Que podemos plotar

```
plot(out, lwd=6, col="lightblue", main="", ylab="N(t)")
curve(0.1*10*exp(1.5*x)/(10+0.1*(exp(1.5*x)-1)), add=TRUE)
legend("topleft", c("Numerical", "Analytical"), lty=1, col=c("lightblue", "black"), lwd=c(6,1))
```



Temos uma aproximação muito melhor agora, as duas curvas se sobrepõem! Obtenha o mesmo gráfico com o uso do pacote *ggplot2*:

```
## Plotando com o ggplot2
p <- ggplot(data = as.data.frame(out), aes(time, x)) + geom_point()
analytic <- stat_function(fun=function(t){0.1*10*exp(1.5*t)/(10+0.1*(exp(1.5*t)-1))})
print(p+analytic)
```



Um sistema de equações

Agora, e se quiséssemos integrar um sistema de equações diferenciais? Vamos tomar, por exemplo, as equações para o sistema predador-presa de Lotka-Volterra:

$$\begin{aligned}\frac{dV}{dt} &= rV - cVP \\ \frac{dP}{dt} &= ecVP - dP\end{aligned}$$

Tudo o que você precisa fazer é escrever uma função R que retorne os valores de ambas as derivadas, e definir os valores dos parâmetros e das condições iniciais:

```
# Parâmetros: vetor
parameters <- c(r = 2, k = 0.5, e = 0.1, d = 1)

# condições iniciais: vetor
state <- c(V = 1, P = 3)
```

1. Defina valores dos parâmetros e condições iniciais

```
# sequência do tempo
time <- seq(0, 50, by = 0.01)

# Parâmetros: vetor
```

```
parameters <- c(r = 2, k = 0.5, e = 0.1, d = 1)
```

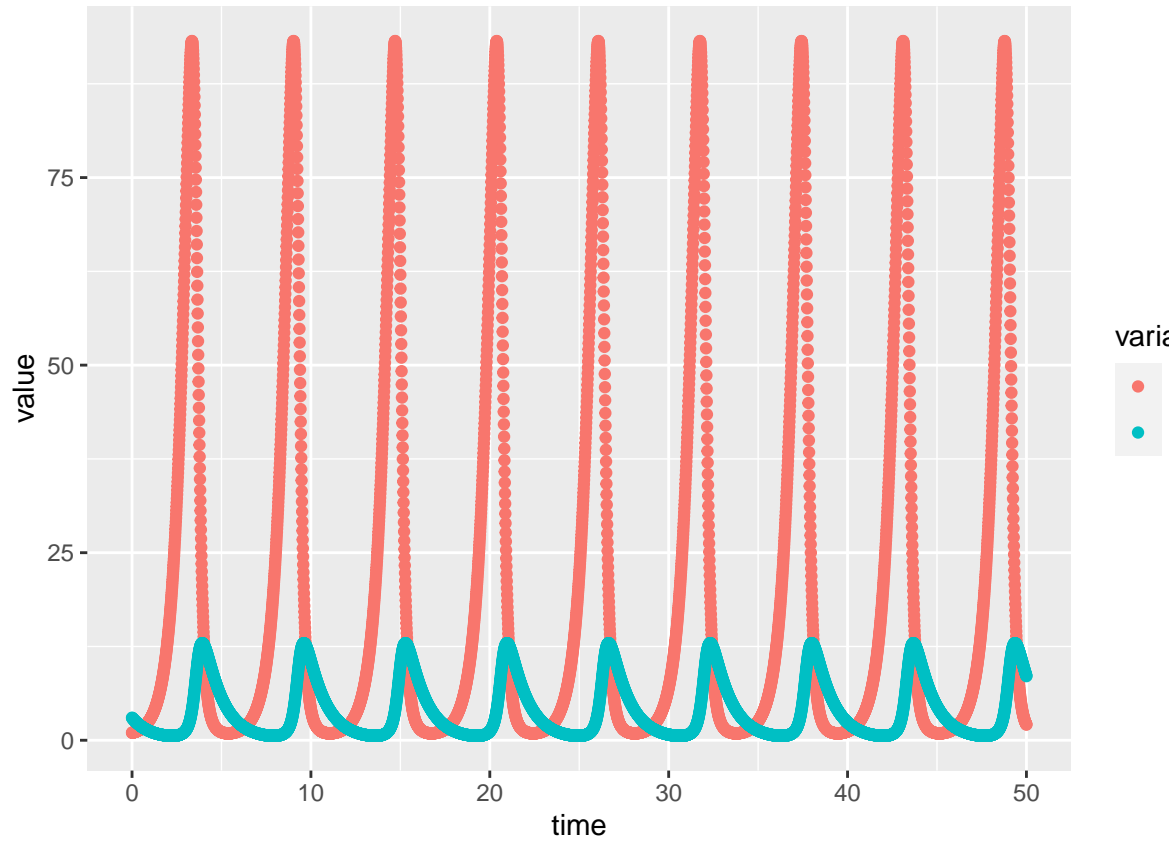
```
# condições iniciais: vetor  
state <- c(V = 1, P = 3)
```

2. Escolha um intervalo de tempo ou uma sequência de tempos em que deseja a solução calculada

```
# Função R para calcular o valor das derivadas a cada valor de tempo  
# Use os nomes das variáveis conforme definido nos vetores acima  
lotkaVolterra <- function(t, state, parameters){  
  with(as.list(c(state, parameters)), {  
    dV = r * V - k * V * P  
    dP = e * k * V * P - d * P  
    return(list(c(dV, dP)))  
  })  
}
```

3. Defina uma função em R para o sistema de EDOs a ser integrado

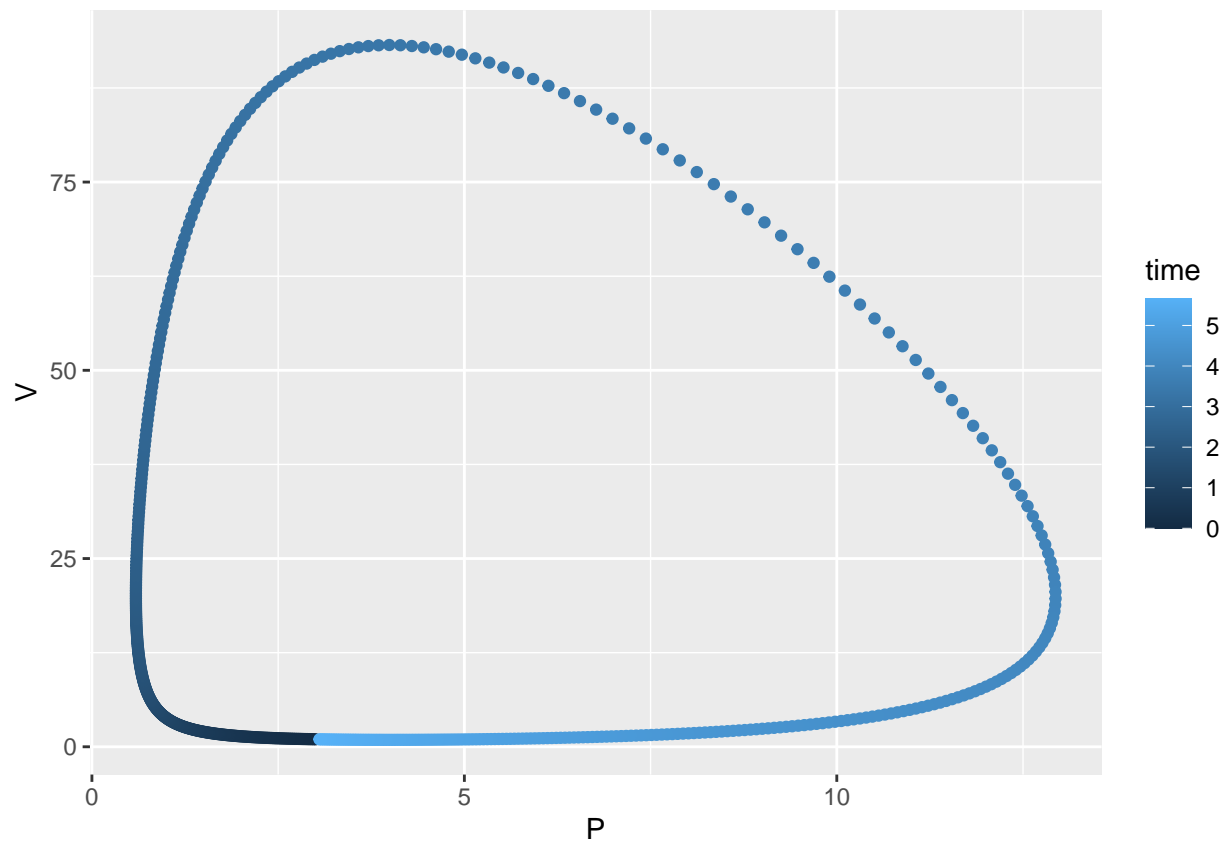
```
## Integração com 'ode'  
out <- ode(y = state, times = time, func = lotkaVolterra, parms = parameters)  
  
## Plotando  
out.df = as.data.frame(out) # exigido pelo ggplot  
library(reshape2)  
out.m = melt(out.df, id.vars='time') # isso facilita a plotagem colocando todas as variáveis em uma única  
  
p <- ggplot(out.m, aes(time, value, color = variable)) + geom_point()  
print(p)
```



4. Integrar a função

Uma coisa interessante a se fazer aqui é dar uma olhada no *espaço de fase*, ou seja, plotar apenas as variáveis dependentes (não o número de presas e de predadores em cada momento). Note que no espaço de fase o tempo está implícito. Para torná-lo um pouco mais explícito, usamos um código de cores, para mostrar em que sentido cada par de valores segue-se a outro no tempo:

```
p2 <- ggplot(data = out.df[1:567,], aes(x = P, V, color = time)) + geom_point()
print(p2)
```

Parabéns: agora você tem os elementos básicos para integrar qualquer sistema de equações diferenciais!

Mais informações

- [Introduction to R](#)
- [Crash course in R](#)
- [ode package](#)
- [Some additional example codes](#)
- [ggplot2 package](#)
- [A R graph gallery](#)
- [Another tutorial on numerical integration in R](#)