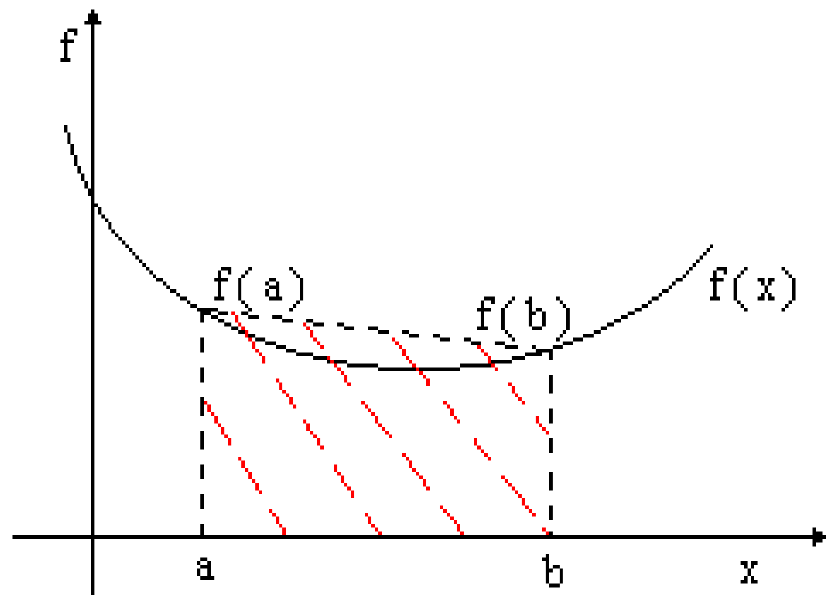
Métodos Numéricos para Problemas de Valor Inicial e aplicações

Professor: Fabrício Murai Ferreira

Disciplina: Análise Numérica

Nas aulas anteriores

- Integração Numérica
  - Fórmulas de Newton-Cotes
    - Fórmula dos Trapézios
    - Regra do 1/3 de Simpson
    - Regra dos 3/8 de Simpson
  - Quadratura Gaussiana



Na aula de hoje: Equações Diferenciais

Motivação: por quê estudar equações diferenciais?

Parte Técnica
- Tipos de Equações Diferenciais
- Equações Diferenciais Ordinárias
- Problemas de Valor Inicial e Problemas de Valor de Contorno
- Método de Euler
- Métodos de Runge-Kutta

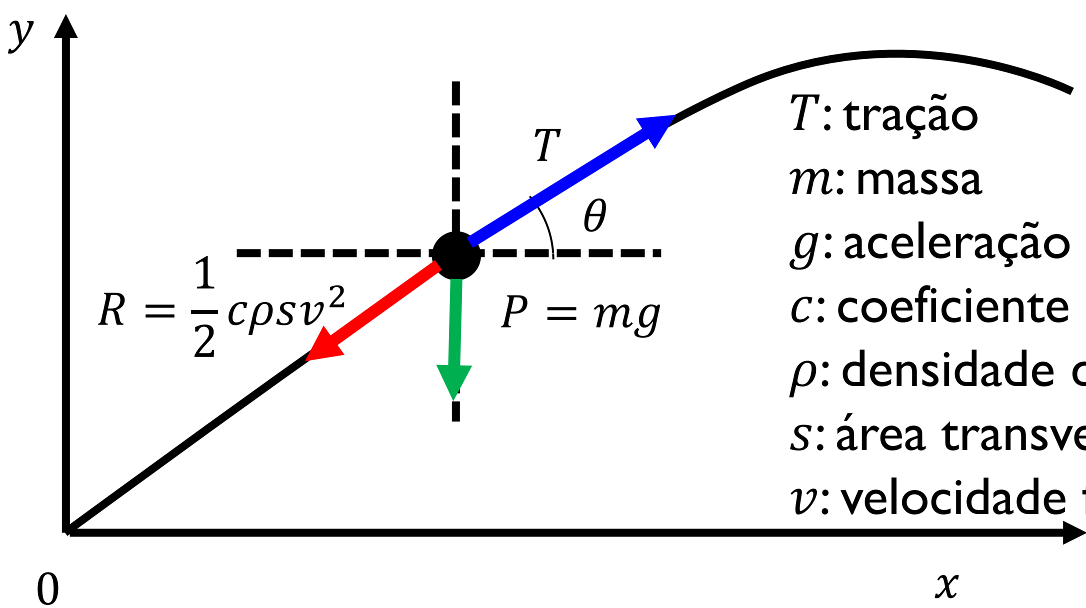
Aplicação: Epidemiologia
- Modelo SI
- Modelo SIR (exercício para próxima aula)
- Modelo SIS
- Considerações sobre modelos epidêmicos

Motivação

Descrição de sistemas físicos geralmente se dá em função da forma como variáveis **mudam ao longo do tempo**

Ex: lançamento de foguete (assumindo massa constante)

Equações diferenciais envolvem derivadas de uma função desconhecida



T: tração
m: massa
g: aceleração gravidade
c: coeficiente resistência
ρ: densidade do ar
s: área transversal foguete
v: velocidade foguete

$$\vec{F} = \vec{T} + \vec{R} + \vec{P}$$

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt}$$

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m} \vec{F}(t, \vec{v})$$

Tipos de Equações Diferenciais

- Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs): todas derivadas em relação à **única** variável independente

$$\frac{dy}{dt} = y - t$$

y é função de t; t é única variável independente

$$\frac{t^2}{2}\frac{d^2y}{dt^2} + t\frac{dy}{dt} - y = 0$$

y é função de t; t é única variável independente

Equações diferenciais de ordem mais alta podem ser transformadas em sistemas de EDOs de primeira ordem

$$\frac{d^k y}{dt^k} = F\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2y}{dt^2}, \ldots, \frac{d^{k-1}y}{dt^{k-1}}\right)$$

EDO **de ordem k**

Tipos de Equações Diferenciais

- Equações Diferenciais Parciais (EDPs):
  mais de uma variável independente

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \Rightarrow$$ x e y são variáveis independentes

Solução de EDOs

- Solução Analítica

$$\frac{dy}{dt} = y$$

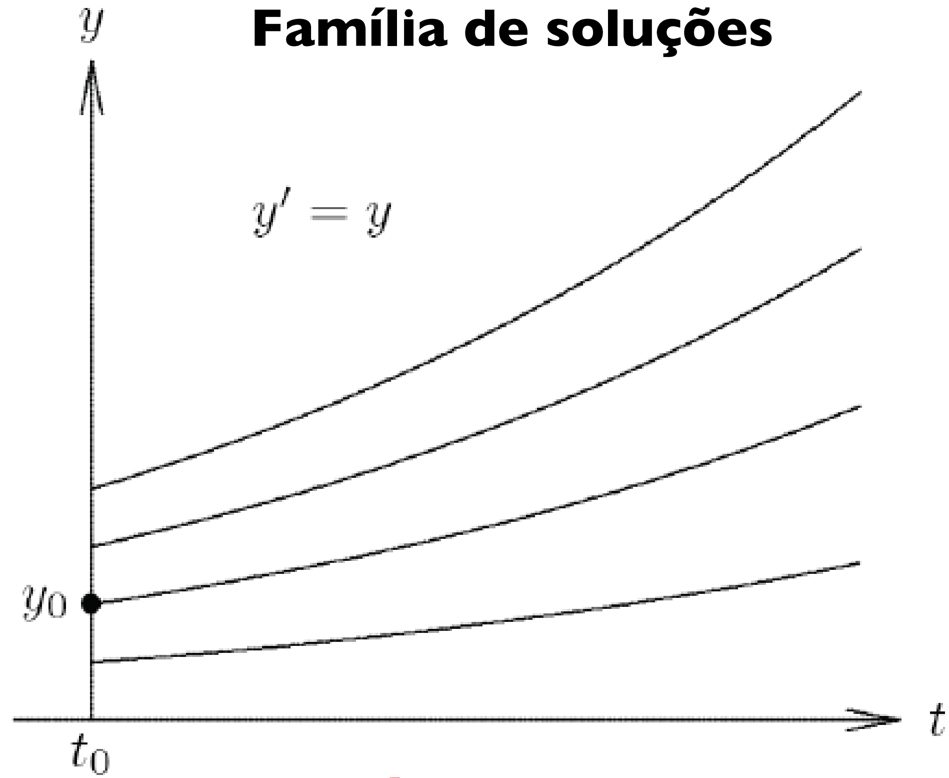
$$\frac{dy}{y} = dt$$

$$\int \frac{dy}{y} = \int dt$$

$$\ln(y) + c_1 = t + c_2$$

$$y(t) = e^{t+c} = ae^t$$

Família de soluções



Necessário especificar pontos para obter solução específica

Problema de Valor Inicial e Problema de Valor de Contorno

Problema de Valor de Inicial: especifica ponto de partida. Exemplo:

Dada EDO $y' = f(t, y)$ e *ponto inicial* (t_0, y_0), *qual valor de* $y(t)$*?*

Problema de Valor de Contorno: especifica conjunto de pontos a serem satisfeitos pela função. Exemplo:

Dada EDO $y'' = f(t, y, y')$, *determine* $y(t)$ *dados* $y(t_0) = y_0$ e $y(t_1) = y_1$.

Problema de Valor Inicial (PVI)

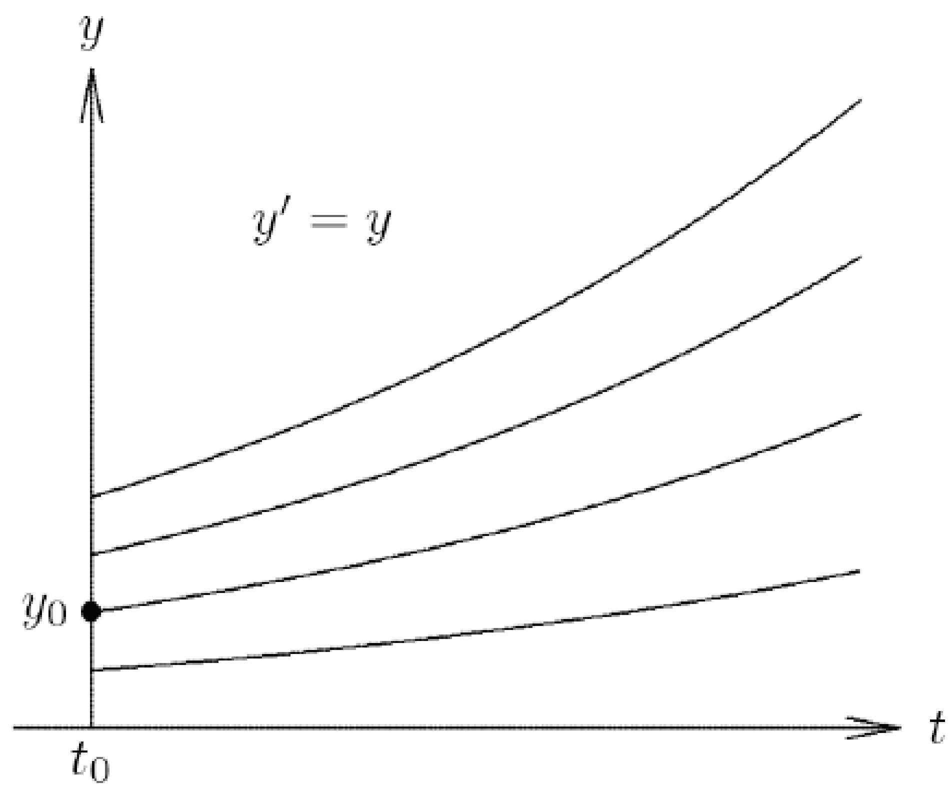
Dada EDO $y' = f(t,y)$ e *ponto inicial* (t_0, y_0), *qual valor de* $y(t)$*?*

Exemplo:

$$y' = y$$

$$t_0 = 0 \text{ e } y_0 = 2$$

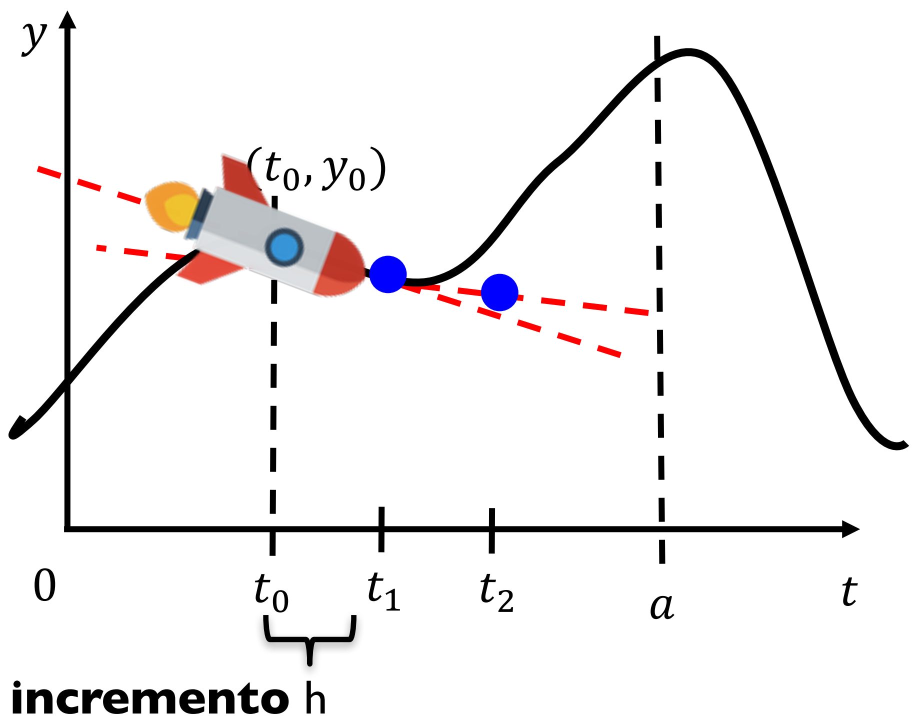
$$y(t) = ae^t \therefore y(t) = 2e^t$$



Solução analítica não é conhecida para todas as EDOs!

Métodos Numéricos para PVI

- Conheço $y(t_0)$, quero determinar $y(a)$
- Aproximar y em uma sequência de pontos $t_1, t_2, \dots, t_n = a$ usando $y' = f(t, y)$.



Método de Euler

- Para EDOs gerais do tipo $y' = f(t, y)$, considere a série de Taylor

$$\begin{aligned} y(t+h) &= y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \cdots \\ &= y(t) + hf\big(t, y(t)\big) + \cancel{\frac{h^2}{2}y''(t) + \ \dots} \end{aligned}$$

- **Método de Euler** é obtido ao ignorar termos de ordem maior ou igual a 2 para obter solução aproximada

$$y_{k+1} = y_k + h\boxed{f(t_k, y_k)}$$

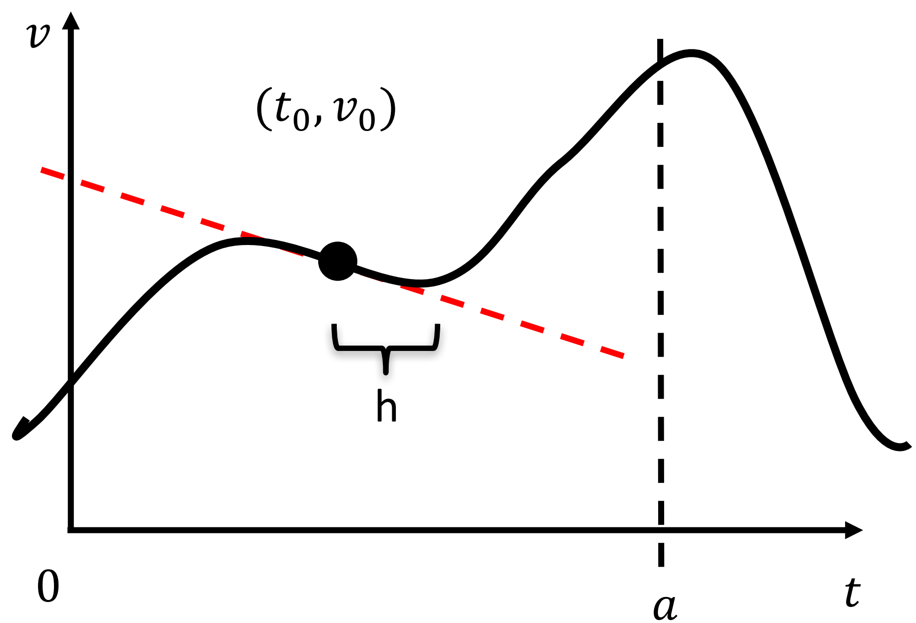
derivada no ponto (t_k, y_k)

Euler é de **1ª ordem**

Método que aproxima série de Taylor até termos de ordem n é de **n-ésima ordem**

Método de Euler e Lançamento do foguete

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{m}F(t,v)$$



Equação de iteração:

$$v_{k+1} = v_k + hf(t_k, v_k)$$

Método de Euler: Intuição

- Método de Euler progride extrapolando solução ao longo da linha reta cuja inclinação é dada por $f(t_k, y_k)$
- É método de **passo único** pois depende da informação em um único ponto para progredir para próximo ponto

Método de Euler

Exemplo 1. Encontre y(0.6), dado o PVI

$$y' = 2t - y + 1 \qquad y(0) = 1$$

através do método de Euler com h=0.2.

$$t_0 = 0 \qquad y_0 = 1$$

$$y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) = 1 + 0.2 \cdot (2 \cdot 0 - 1 + 1) = 1$$

$$t_1 = 0.2 \qquad y_1 = 1$$

$$y_2 = y_1 + hf(t_1, y_1) = 1 + 0.2 \cdot (2 \cdot 0.2 - 1 + 1) = 1.08$$

$$t_2 = 0.4 \qquad y_2 = 1.08$$

$$y_3 = y_2 + hf(t_2, y_2) = 1 + 0.2 \cdot (2 \cdot 0.4 - 1.08 + 1) = 1.224$$

$$t_3 = 0.6 \qquad y_3 = 1.224$$

Método de Euler

Exemplo 2. Encontre y(0.6), dado o PVI

$$y' = 2t - y + 1 \qquad y(0) = 1$$

através do método de Euler com h=0.1.

$t_0 = 0 \qquad y_0 = 1$

$y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) = 1 + 0.2 \cdot (2 \cdot 0 - 1 + 1) = 1$

$t_1 = 0.1 \qquad y_1 = 1.0$

$t_2 = 0.2 \qquad y_2 = 1.02$

$t_3 = 0.3 \qquad y_3 = 1.058$

$t_4 = 0.4 \qquad y_4 = 1.112$

$t_5 = 0.5 \qquad y_5 = 1.181$

$t_6 = 0.6 \qquad y_6 = 1.263$

Avaliando Erro do Método de Euler

- **Erro para h=0.1 é aproximadamente metade daquele para h=0.2**

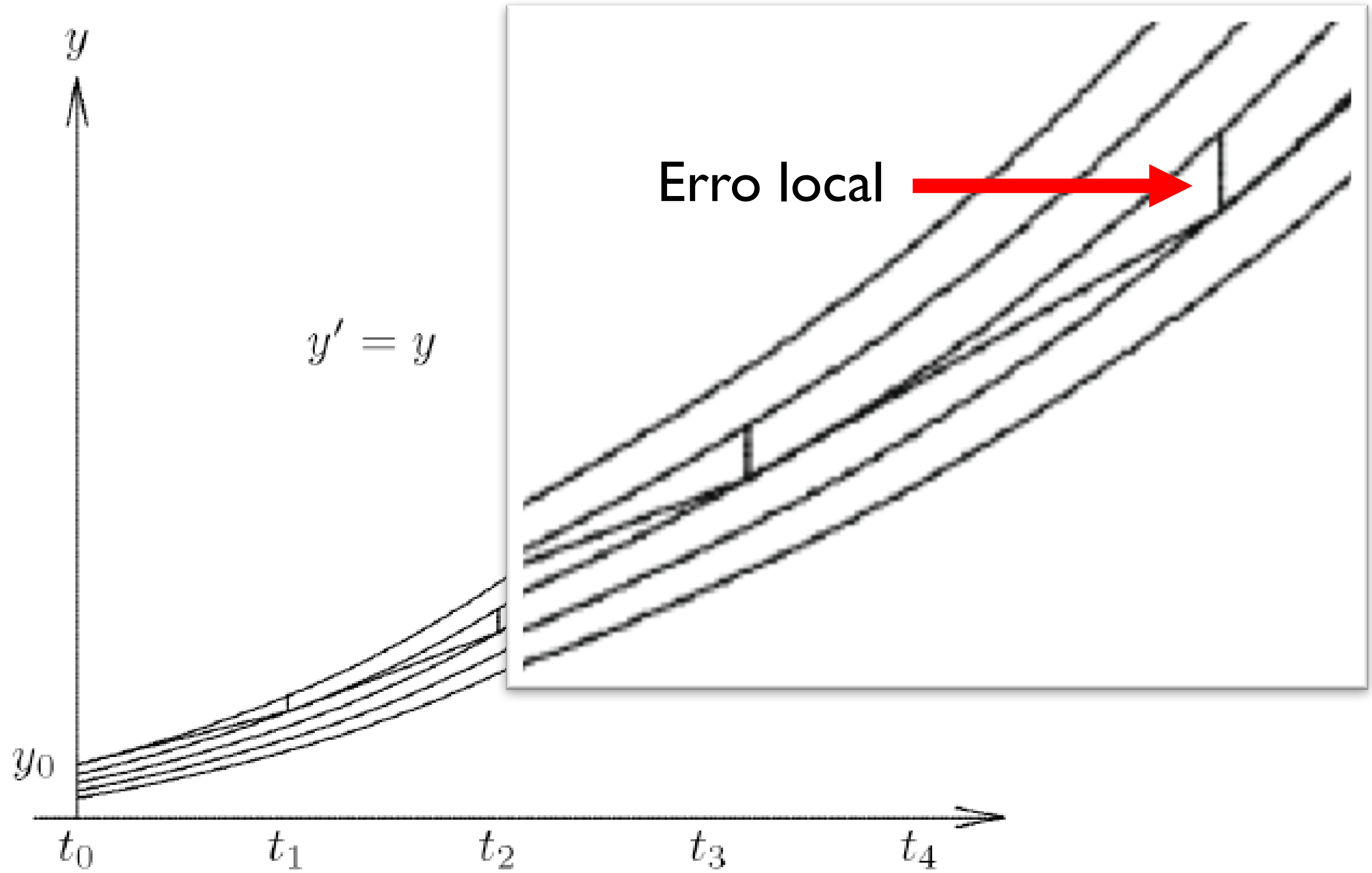
t	Solução exata	Euler h=0.2	Euler h=0.1	Erro h=0.2	Erro h=0.1
0.2	1.0375	1.0000	1.0200	0.0375	0.0175
0.4	1.1406	1.0800	1.1122	0.0606	0.0284
0.6	1.2976	1.2240	1.2629	0.0736	0.0347

IR PARA APPLET

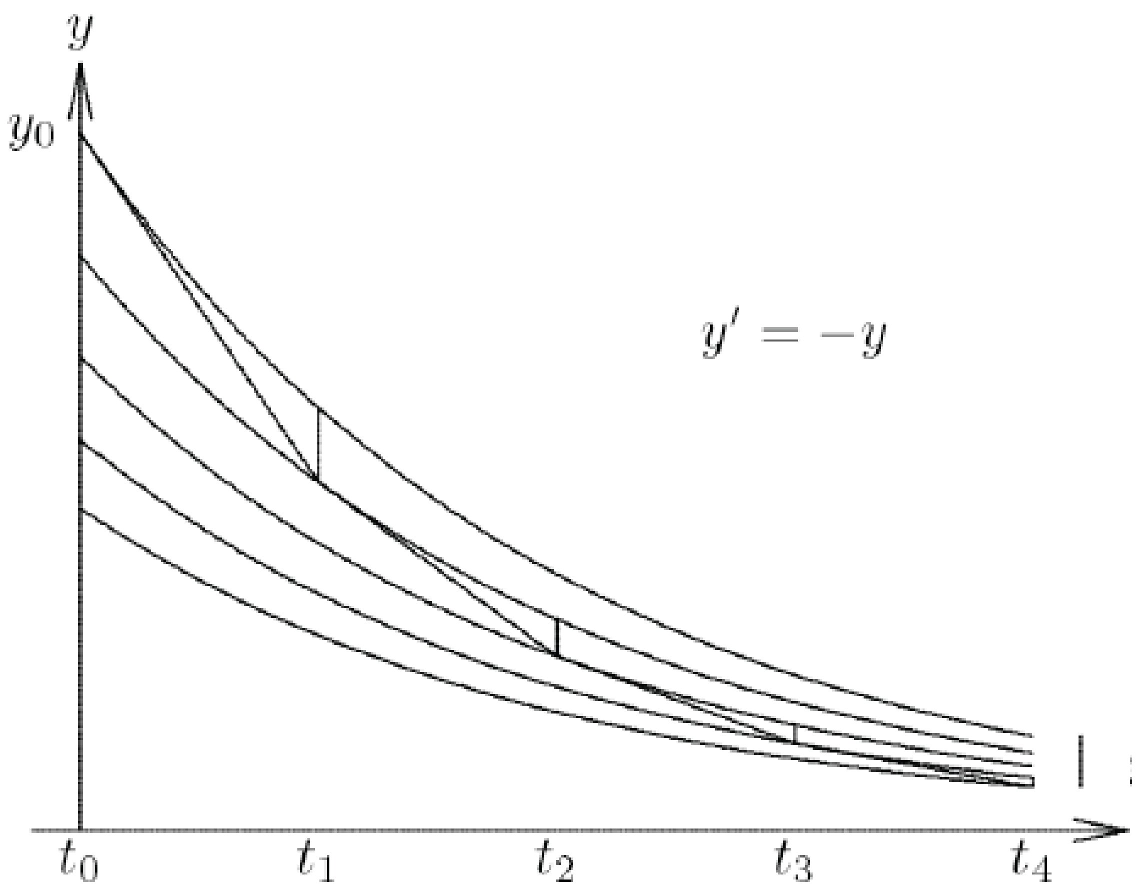
Erros Numéricos na Solução de PVIs

- Métodos numéricos para solução de PVIs incorrem dois tipos de erro:
  - **Erro de Arredondamento**, devido à precisão finita do computador
  - **Erro de Truncamento** (ou Discretização), devido ao método de aproximação utilizado
- Na prática, erro de truncamento é o fator dominante na acurácia de soluções numéricas para PVIs

Erro global vs. Erro local



Erro global vs. Erro local



Erro global

Compromisso: passo pequeno vs. passo largo?

- **Passo pequeno**
  - Erro global: **menor**
  - Número de passos: **maior**
- **Passo largo**
  - Erro global: **maior**
  - Número de passos: **menor**

Como dar passos mais largos com erro menor?

Ideia: usar mais termos da série de Taylor

Problema: y' é dado, mas preciso calcular y'', y''', ...

Métodos de Runge-Kutta

- Métodos de Runge-Kutta são métodos que tentam aproximar mais termos da série de Taylor sem necessitar o cálculo de derivadas
- Exemplo mais simples: *Método de Heun* de 2ª ordem

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$$

onde

$$k_1 = f(t_k, y_k)$$
$$k_2 = f(t_k + h\,, y_k + h\,k_1)$$

Métodos de Runge-Kutta

- Método Runge-Kutta mais conhecido é o esquema clássico de quarta ordem

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

onde:

$$k_1 = f(t_k, y_k)$$
$$k_2 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}k_1\right)$$
$$k_3 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}k_2\right)$$
$$k_4 = f(t_k + h_k, y_k + h_k)$$

Na aula de hoje: Equações Diferenciais

Motivação: por quê estudar equações diferenciais?

Parte Técnica

- Tipos de Equações Diferenciais
- Solução de Equações Diferenciais Ordinárias
- Problemas de Valor Inicial
- Método de Euler
- Métodos de Runge-Kutta

Aplicação: Epidemiologia

- Modelo SI
- Modelo SIR (exercício para próxima aula)
- Modelo SIS
- Considerações sobre modelos epidêmicos

Modelos Epidêmicos

Modelos epidêmicos visam capturar a dinâmica da disseminação de uma doença (ideia, vírus de computador ou adoção de produto).

Questões centrais a serem respondidas:

- Como a disseminação acontece em uma determinada população?
- A doença vai se tornar uma epidemia?
- Quem deve ser vacinado?

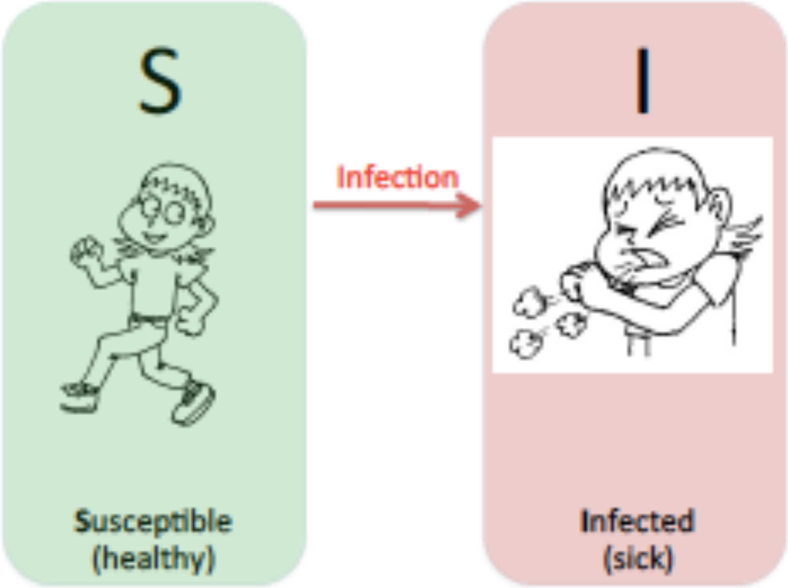
Suposição sobre contatos

Full mixing assumption

Nos estudos clássicos de epidemiologia, assume-se que **cada indivíduo** tem **uma mesma chance de entrar em contato com cada um dos outros indivíduos da população**.

Modelo Suscetível-Infectado (SI)

No modelo SI, indivíduo em um de dois estados: **suscetível** ou **infectado**. Seta indica que uma vez infectado, indivíduo permance infectado (não se recupera).



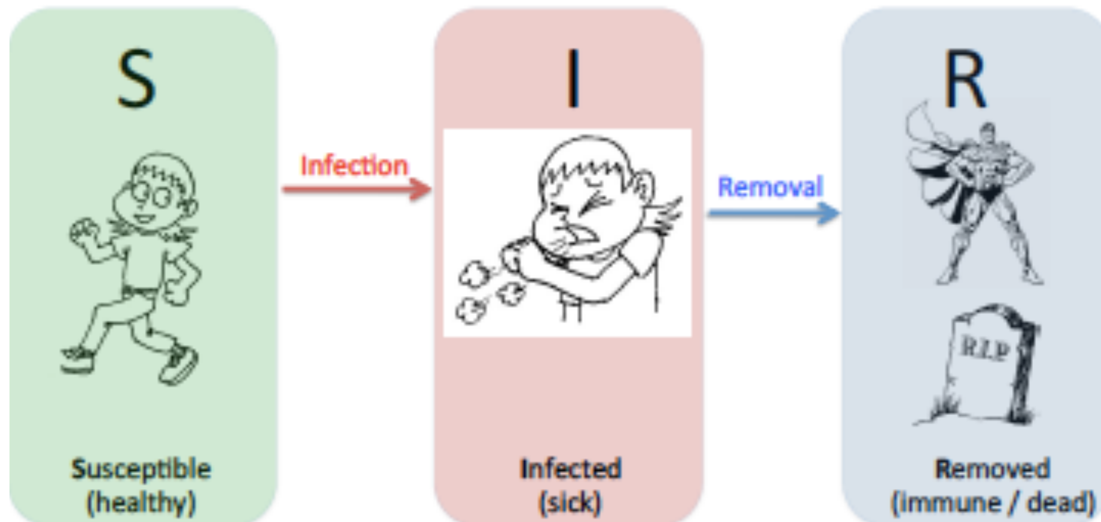
Parâmetro:
β: número médio de contatos que um indivíduo faz, por unidade de tempo

Modelo Suscetível-Infectado-Recuperado (SIR)

Diferença para SI: inclui estado recuperado (R), a partir do qual o indivíduo é imune.

Estados:

- Suscetível (S)
- Infectado (I)
- Recuperado (R)



Parâmetros:

- β : taxa com que um indivíduo contacta outros
- γ : fração de indivíduos que se recuperam, por unidade de tempo

Modelo SIR: dinâmica

Seja *n* o tamanho da população.
Defina para o instante *t*:

- $S(t)$: número de indivíduos suscetíveis
- $X(t)$: número de indivíduos infectados
- $R(t)$: número de indivíduos recuperados

$S(t)$ diminui quando indivíduo saudável entra em contato com indivíduo infectado. Com que taxa isso acontece?

$$\frac{dS}{dt} = -\beta \frac{X(t)S(t)}{n}$$

$R(t)$ aumenta quando indivíduo infectado é "removido". Com que taxa isso acontece?

$$\frac{dR}{dt} = \gamma X(t)$$

Modelo SIR: dinâmica

Dados

$$\frac{dS}{dt} = -\beta \frac{X(t)S(t)}{n}, \qquad \frac{dR}{dt} = \gamma X(t),$$

temos

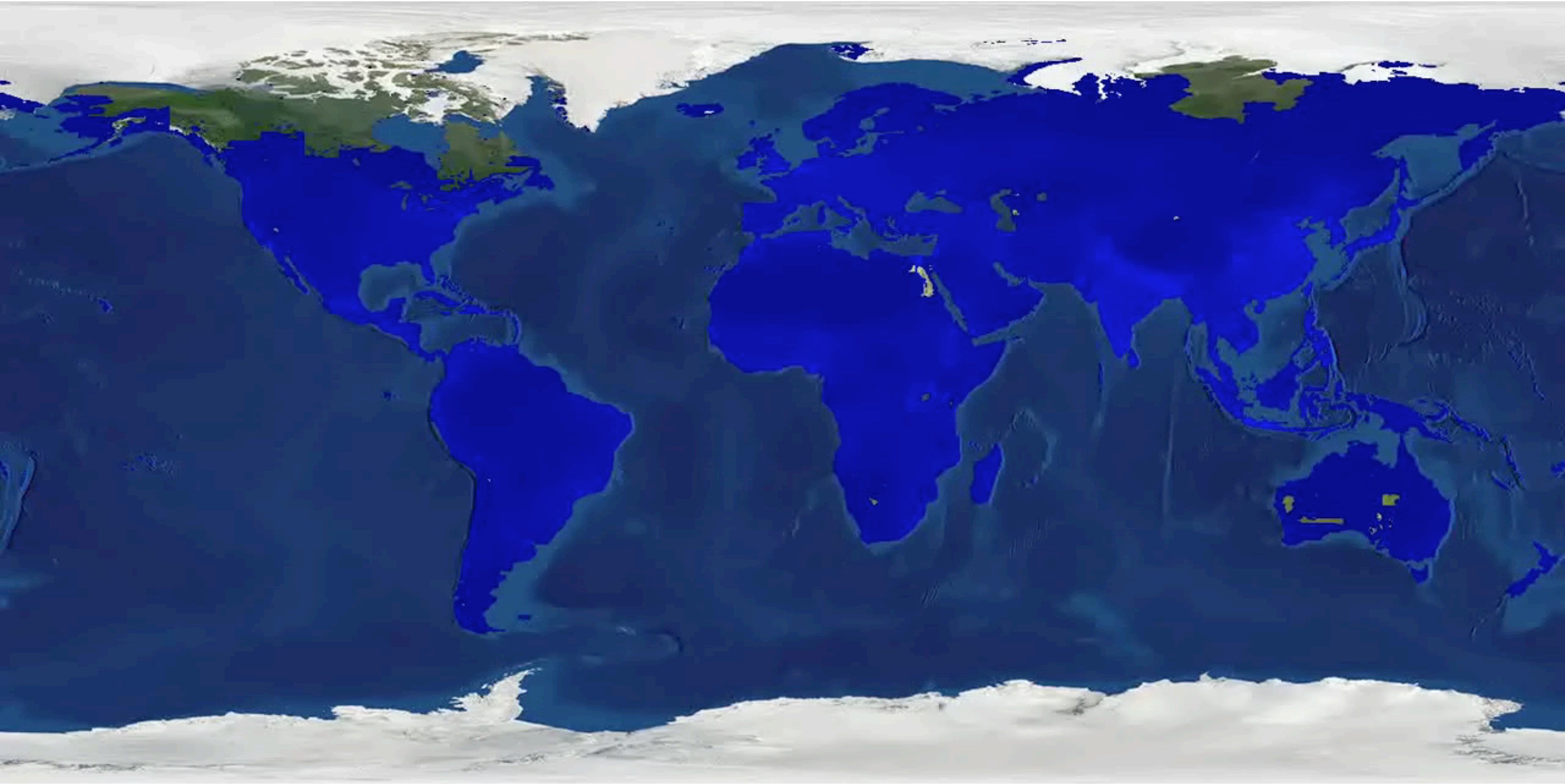
$$\frac{dX}{dt} = \beta \frac{X(t)S(t)}{n} - \gamma X(t).$$

Substituindo número pela fração de indivíduos, isto é $s(t) = S(t)/n, x(t) = X(t)/n$ e $r(t) = R(t)/n$, obtém-se o sistema

Sistema de EDOs resultante não admite solução analítica

$$\frac{ds}{dt} = -\beta xs, \qquad \frac{dr}{dt} = \gamma s, \qquad \frac{dx}{dt} = \beta xs - \gamma x.$$

Simulando epidemia

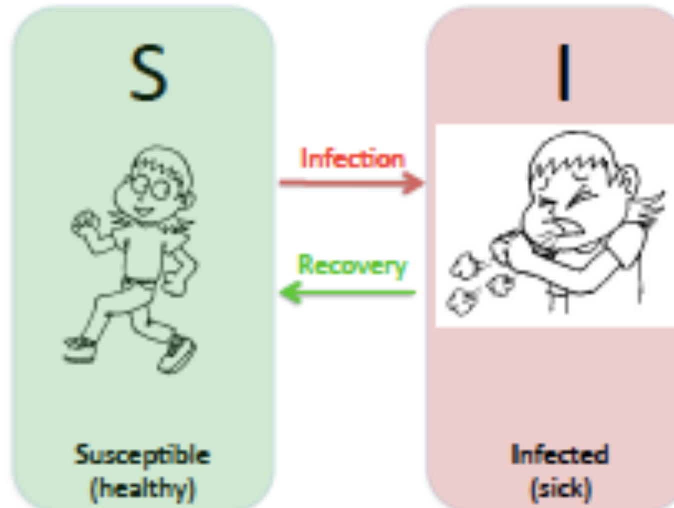


Modelo SIR: dinâmica

Exercício para casa: Reduzir sistema para uma única EDO por manipulação algébrica. Resolver EDO resultante usando métodos de Euler e método de Heun.

Modelo SIS

Diferença para SIR: após ser curado, indivíduo volta a ser suscetível.



Estados:

- Suscetível (S)
- Infectado (I)

Parâmetros:

- β : taxa com que um indivíduo contacta outros
- γ : fração de indivíduos que se recuperam, por unidade de tempo

Modelo SI: Dinâmica e Solução

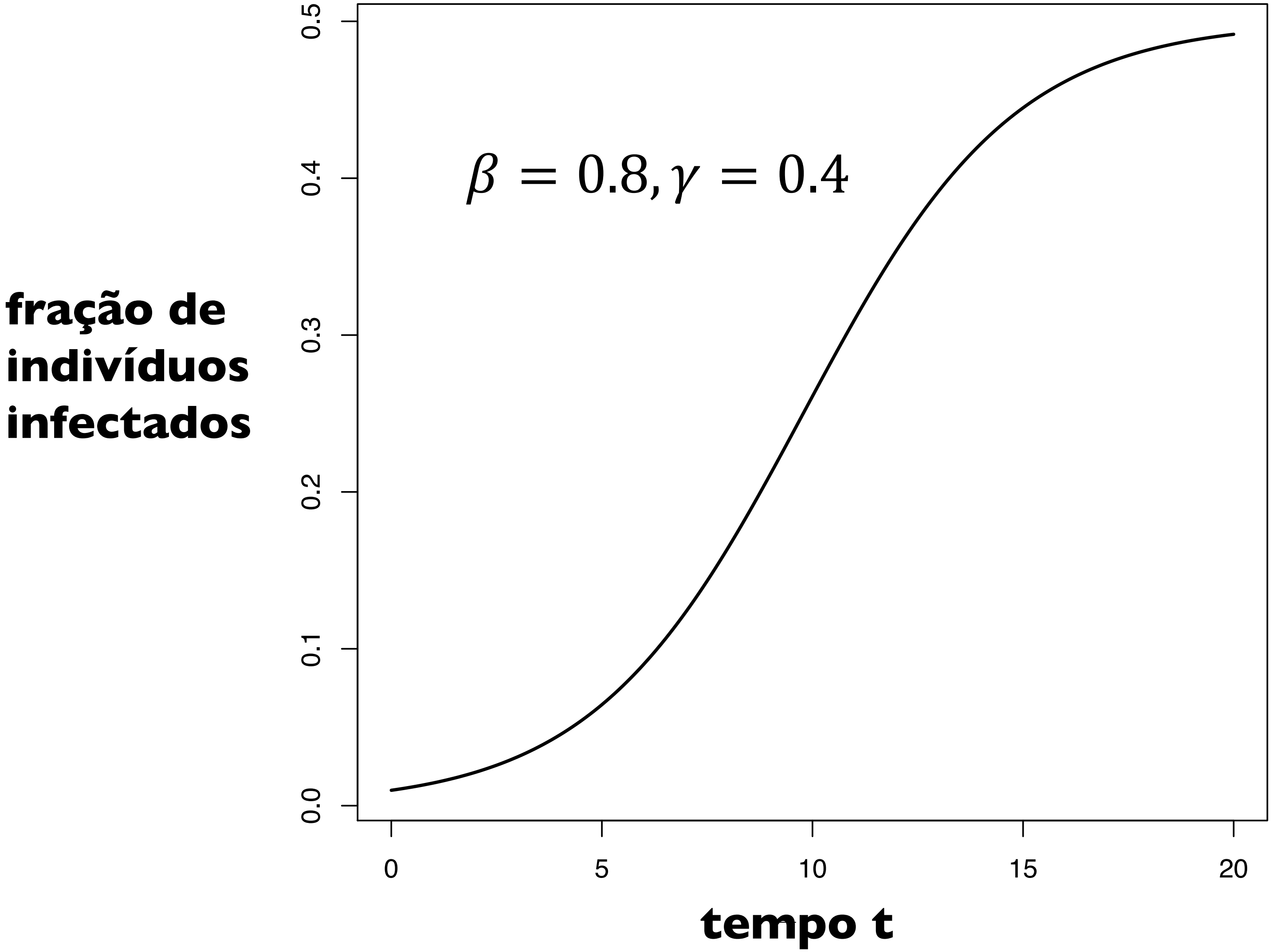
$$\frac{ds(t)}{dt} = \gamma x(t) - \beta s(t) x(t)$$

$$\frac{dx(t)}{dt} = \beta s(t) x(t) - \gamma x(t)$$

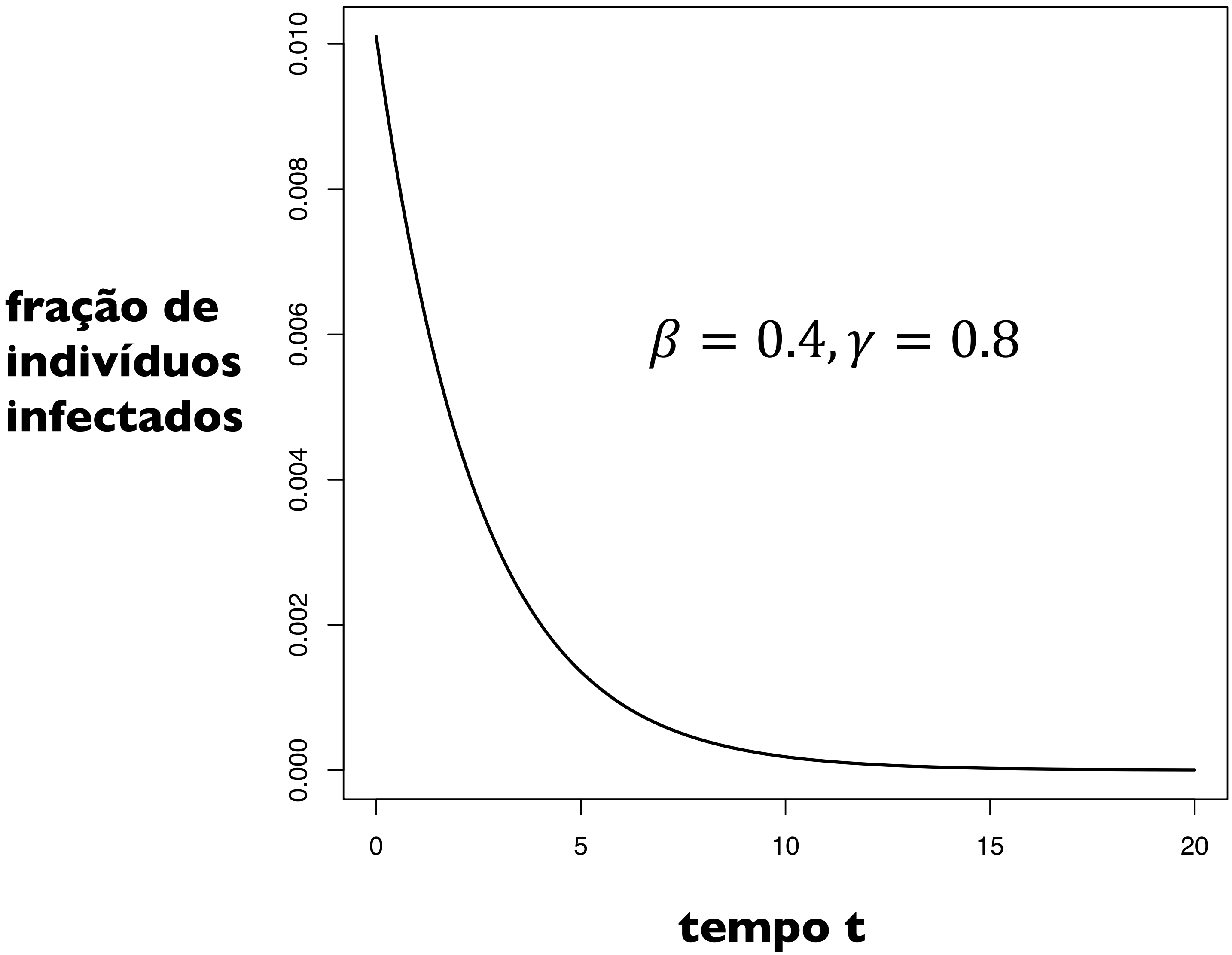
$$s(t) + x(t) = 1$$

$$x(t) = x_0 \frac{(\beta - \gamma) e^{(\beta - \gamma) t}}{\beta - \gamma + \beta x_0 e^{(\beta - \gamma) t}}$$

Modelo SI: $\beta > \gamma$



Modelo SI: $\beta < \gamma$



Número Básico de Reprodução R_0

Seja $R_0 = \frac{\beta}{\gamma}$. No limite em que $t \to \infty$,

- quando $R_0 < 1$, doença é extinta.
- quando $R_0 > 1$, doença atinge equilíbrio $x(t) > 0$.

R_0 é conhecido como **número básico de reprodução.**

Considerações sobre modelos epidêmicos vistos em sala

- Modelo SI converge para ”todos indivíduos infectados”
- Modelo SIR converge para ”todos indivíduos recuperados”.
- No modelo SIS depende de $R_{0.}$
- Modelos vistos em aula são baseados no “*full mixing assumption*”.
- Modelos recentes consideram que o número de contatos varia de um indivíduo para outro. Como consequência, R_0 é muito pequeno (epidemias são muito mais prováveis).

Resumo

- Equações diferenciais modelam como um sistema está mudando, p. ex., com o tempo
- Frequentemente não se conhece a solução analítica, se faz necessário uso de métodos numéricos
- Alguns métodos são baseados na série de Taylor
- Modelos epidêmicos mais complexos precisam ser resolvidos numericamente

Bibliografia de Apoio

Gene H. Golub e James M. Ortega. Scientific Computing and Differential Equations: An Introduction to Numerical Methods (Seções 2.1 e 2.2). Academic Press, 1992.

Angela Shiflet e George Shiflet. Introduction to Computational Science: Modeling and Simulation for the Sciences (Módulo 6.2). Princeton University Press, 2006.