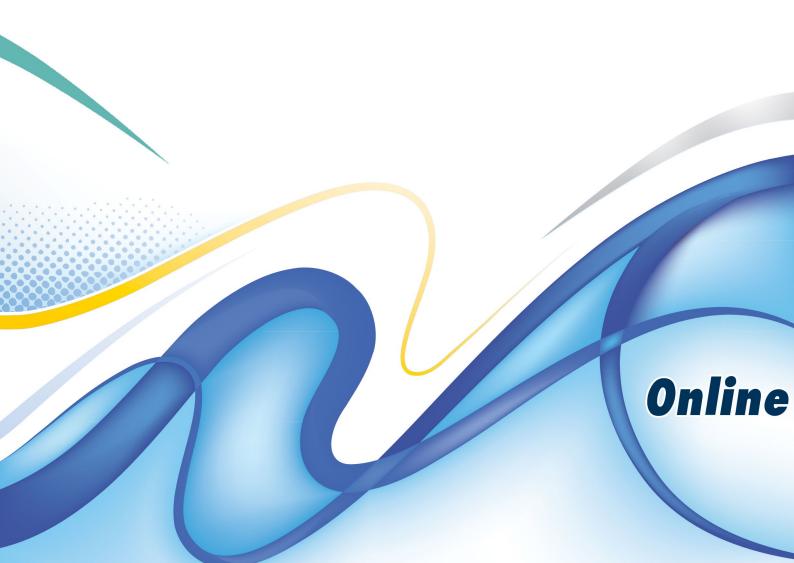


Cálculo Numérico





Unidade V:

Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Responsável pelo Conteúdo:

Prof. Dr. Jaime Sandro da Veiga



Orientação de Estudos

Olá, caros alunos!

Sejam bem-vindos a mais uma unidade de ensino e de aprendizagem da disciplina de Cálculo Numérico. Vocês irão conhecer os métodos utilizados para a resolução numérica de equações diferenciais ordinárias, as aplicações mais simples na resolução de equações que envolvem derivadas. A utilização será certamente ampliada para um sistema de equações diferenciais acopladas, o que caracteriza um sistema dinâmico de maior complexidade do que os sistemas que são representados por uma única equação diferencial. Espero que tenham um excelente estudo e um bom aproveitamento!



A T E NC Ã O: Para um bom aproveitamento do curso, leiam o material teórico atentamente antes de realizar as atividades. É importante também respeitar os prazos estabelecidos no cronograma.

Olá, caro aluno! Esta unidade tem por objetivo apresentar e introduzir os conceitos elementares sobre a Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias, que é uma ferramenta muito importante para todas as áreas do conhecimento. Aconselhamos a estudar todas as seções da unidade V, procurando entender a teoria e os exercícios resolvidos e resolver os exercícios propostos para praticar. É fundamental fazer a leitura do material complementar e da bibliografia proposta para auxiliar na compreensão do tema e exercícios. No final, quando estiver com os conceitos assentados, não se esqueça de fazer a Atividade de Sistematização para nota.

Bom estudo a todos!



Contextualização

A unidade V aborda o tema Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias, tema importantíssimo para a grande área das Ciências Exatas. As soluções analíticas de equações diferenciais constituem um tema da Análise Matemática que tem importância fundamental para a resolução de Sistemas Dinâmicos Simples (oscilações de pequenas estruturas e edificações, em projetos de pequenas máquinas e circuitos elétricos). Os Sistemas Dinâmicos Complexos não possuem, em geral, soluções analíticas fechadas, pois a complexidade é tamanha que as soluções numéricas obtidas com o auxílio de computadores tornam-se imperativas. Às vezes, até mesmo a utilização de supercomputadores não consegue suprir as necessidades em termos de capacidade de processamento e de memória para os Sistemas Dinâmicos Complexos (meteorologia, engenharia química, engenharia de fármacos, estruturas, máquinas e circuitos complexos etc.).

O estudo de métodos numéricos para a obtenção de soluções de equações diferenciais aborda, costumeiramente, os métodos para a obtenção de soluções aproximadas para equações de primeira e de segunda ordem. Como todos são métodos aproximativos, é comum apresentar comparações entre os métodos, basicamente fazendo gráficos e comparando erros em relação às soluções analíticas conhecidas para determinados sistemas. Assim, se não conhecêssemos as soluções analíticas de alguns sistemas, seria mais difícil encontrar uma maneira para fazer a calibração de um método.

Além das soluções analíticas para as equações diferenciais de primeira e de segunda ordem, o conceito de derivada discreta – fundamental para a resolução de equações diferenciais em computadores – e a redução de um sistema de segunda ordem para um de primeira ordem, são apresentados os métodos aproximativos.

Os métodos abordados nesta Unidade são: o método de Euler e a avaliação de seu erro usando séries de Taylor, métodos para equações de segunda ordem, o método do ponto médio, e o método de Runge-Kutta. As equações diferenciais ordinárias (EDO) são equações que relacionam uma função desconhecida e suas derivadas ordinárias.



Introdução

As equações diferenciais podem descrever, de uma forma geral, todos os sistemas que são submetidos a variações. Eles são amplamente utilizados nas Ciências e nas Engenharias, bem como na Economia, Ciências Sociais, Comércio, Medicina, Ciências da Saúde etc. Muitos matemáticos estudaram a natureza dessas equações já há centenas de anos e há muitas técnicas de resolução muito bem desenvolvidas. Todavia, é comum encontrar sistemas que são descritos por equações diferenciais que são extremamente complexos, ou mesmo que são tão grandes, que uma solução puramente analítica para as equações seja intratável. São para esses sistemas complexos que as simulações por computador e os métodos numéricos são úteis.

As técnicas para a resolução de equações diferenciais são baseadas em aproximações numéricas, que foram desenvolvidas muito antes do aparecimento dos computadores programáveis. Durante a 2ª Guerra Mundial, era comum encontrar salas de pessoas - usualmente de mulheres - trabalhando com calculadoras mecânicas para resolver numericamente sistemas de equações diferenciais para cálculos com fins militares. Antes dos computadores programáveis, era muito comum explorar analogias a sistemas elétricos para projetar computadores analógicos a fim de estudar sistemas mecânicos, térmicos ou químicos. À medida que os computadores programáveis aumentaram a velocidade de processamento e tiveram acentuadas quedas nos custos, os sistemas complexos de equações diferenciais de forma crescente puderam ser resolvidos por programas simples escritos para rodar em um PC comum. Atualmente, os computadores de mão são capazes de resolver problemas que eram inacessíveis pelos mais rápidos supercomputadores há uns poucos anos. Contudo, mesmo atualmente, esgotam-se facilmente os recursos de processamento e de memória até mesmo dos mais rápidos e potentes supercomputadores, o que nos levam a crer que somente um novo princípio computacional poderá resolver os problemas atuais referentes aos sistemas complexos: a computação quântica. Uma classe de computadores quânticos já está à venda, mas pela "bagatela" de 10 milhões de dólares! Ele resolve problemas envolvendo desde a Meteorologia, Engenharia de Fármacos até simulações da evolução de preços de ações na bolsa de valores. Contudo, os métodos básicos utilizados ainda residem no tema desta Unidade.



Sistemas de Equações Diferenciais de Primeira Ordem

Uma equação diferencial de primeira ordem possui seguinte a forma geral:

$$\frac{dy}{dt} = f(y;t),$$

em que a derivada $\frac{dy}{dt}$ significa a variação em y em relação ao tempo t, e f(y;t) é qualquer função de y e de t. Note que a derivada da variável y depende também de y. Há notações diferentes para $\frac{dy}{dt}$, sendo as mais comuns: \dot{y} e y'.

Uma das mais simples equações diferenciais que podemos escrever é:

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

Assim, por simplicidade, vamos nos concentrar nessa equação a fim de introduzir vários conceitos importantes. Além disso, a equação é conveniente por possuir soluções analíticas fáceis que irão permitir uma checagem da acuracidade do esquema numérico.

A equação de primeira ordem é relevante no governo de vários sistemas que são comumente encontrados nas ciências, dentre eles destacamos: no aquecimento e resfriamento; no decaimento radioativo de materiais; na absorção de drogas pelo corpo humano (ou animal); na carga e descarga de capacitores; no crescimento populacional, dentre outros.

Para resolver a equação analiticamente, vamos começar fazendo um rearranjo da equação, escrevendo-a na forma:

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

e integrá-la em relação ao tempo, obtendo:

$$lnv = -t + K$$
.

em que K é uma constante de integração. Como o logaritmo representa o expoente de uma potência com a mesma base do logaritmo (que no caso do $\ln y$ é o número de Neper, $e=2.718\,281\,828\,46\cdots$), podemos determinar y:

$$y = e^{-t+K} = e^K e^{-t} .$$



Como $e^K = \mathcal{C}$, em que \mathcal{C} é uma constante, podemos escrever, finalmente, a solução na forma:

$$y = Ce^{-t}$$
.

Podemos checar que a resposta satisfaz a equação diferencial fazendo a substituição na equação original. Uma vez que obtemos a solução por integração, há sempre uma constante de integração que resta ser determinada. Essa constante \mathcal{C} é especificada por uma condição inicial, ou pelo estado inicial do sistema. Por simplicidade, iremos escolher a condição inicial:

$$y(t=0)=1$$

fazendo com que tenhamos C = 1.

Derivadas Discretas

Lembremos que a derivada de uma função em um ponto é equivalente à inclinação da reta que tangencia a curva no ponto em questão. Se fizermos o gráfico da posição de um carro percorrendo uma estrada em linha reta como função do tempo, a inclinação da curva $x \times t$ é a velocidade, isto é, a derivada da posição em relação ao tempo.

Podemos usar este conceito intuitivo de inclinação para calcular numericamente a **derivada discreta** de uma função. Entende-se pelo termo discreto como algo que é não contínuo, que possa ser rotulado e enumerado. Por exemplo, o conjunto de números inteiros geometricamente é representado por um conjunto de pontos dispostos em uma reta, equidistantes de seus vizinhos. Entre dois pontos vizinhos não há a possibilidade de se ter outro ponto; logo, entre os números 3 e 4 não há qualquer outro número inteiro. Este caso está em contraposição ao que chamamos de *contínuo*, em que entre dois pontos há sempre infinitos pontos.

Em um computador, sempre representamos as funções contínuas como uma coleção de valores de amostragem discreta. Para estimar a inclinação em qualquer ponto de uma curva (isto é, sua derivada), podemos simplesmente dividir a variação de subida ou descida pela variação ao percorrer qualquer dos pontos proximamente espaçados, a e b:

$$\frac{dy}{dt} \cong \frac{\Delta y}{\Delta t} = \frac{y_b - y_a}{t_b - t_a}.$$



Façamos, então, um exemplo para podermos construir uma tabela que permita levantar uma curva de um gráfico. Vamos supor que $a \to t = 0$ e $b \to t = 0.1$. Para a função dada, $y(t) = e \mathbb{Z}^{-t}$, temos que $y(t_a = 0) = 1$ e $y(t_b = 0.1) = e^{-0.1} \cong 0.90$. Assim, $\frac{dy}{dt} \cong \frac{y_b - y_a}{t_b - t_a} = \frac{0.90 - 1}{0.1 - 0} = -1.0$. Para a construção de uma tabela, se mantivermos o passo temporal $\Delta t = t_b - t_a = 0.1$ constante, basta que determinemos o salto na função, $\Delta y(N) = y(N \times 0.1) - y((N - 1) \times 0.1)$, quando ela se deslocar de um passo temporal $\Delta t_N = 0.1$. Procedendo da mesma forma, a tabela a seguir pode ser construída:

N	$\Delta y\left(t_{N} ight)$	$\frac{dy(t_N)}{dt}$	N	$\Delta y\left(t_{N} ight)$	$\frac{dy(t_N)}{dt}$
1	-0.1	-1.0	11	-0.035	-0.35
2	-0.0861	-0.861	12	-0.03167	-0.3167
3	-0.0779	-0.779	13	-0.02866	-0.2866
4	-0.07049	-0.7049	14	-0.02593	-0.2593
5	-0.06378	-0.6378	15	-0.02346	-0.2346
6	-0.05771	-0.5771	16	-0.02123	-0.2123
7	-0.05222	-0.5222	17	-0.01921	-0.1921
8	-0.04725	-0.4725	18	-0.01738	-0.1738
9	-0.04275	-0.4275	19	-0.01573	-0.1573
10	-0.03869	-0.3869	20	-0.01423	-0.1423

Tabela 1: Apresentação dos valores para o cálculo da derivada discreta nos diversos pontos para um passo $\Delta t=0.1$.

Com base nos valores apresentados na tabela, podemos levantar parte do gráfico (linha pontilhada) da Figura 1. Observe a diferença que existe entre o cálculo analítico da derivada da função e o cálculo numérico, utilizando o conceito de derivada discreta.

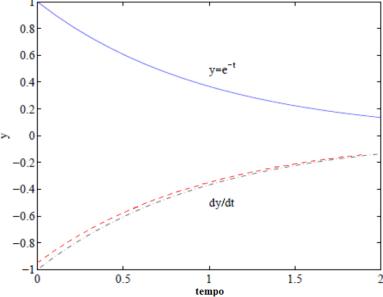


Figura 1: Apresentação da solução analítica $y = Ce^{-t}$ em azul e da derivada analítica (tracejado inferior) e derivada numérica (tracejado superior em vermelho).



Métodos de Passo Simples: O Método de Euler

Um método de passo simples é aquele que, para descobrirmos o valor de y(t) em um instante qualquer, basta que saibamos o valor no instante inicial, y(0). Podemos utilizar as derivadas obtidas numericamente para implementar um método bastante simples de aproximação à solução de equações diferenciais. Para facilitar a maturação dos conceitos, apesar de uma derivada em uma equação diferencial ser relativa a uma variável qualquer (tempo, temperatura, posição etc.), vamos frequentemente utilizar a derivada temporal, já que falar em evolução de uma solução quase sempre nos faz relacionar à evolução temporal, mas enfatizamos que a palavra é utilizada matematicamente sem restrições, podendo ser temporal, espacial etc.

Quando conhecemos a equação diferencial que governa o sistema e o tempo inicial, também acabamos por descobrir a derivada da solução na situação inicial. Em outras palavras, descobrir **a derivada** é o mesmo que descobrir a **inclinação da curva** que denota a solução no instante inicial. Quase sempre associamos a palavra *inclinação* de qualquer curva diretamente a um ângulo, mas vamos deixar bem claro que, neste caso, falar em inclinação é o mesmo que falar na função trigonométrica *tangente do ângulo*. Recordemos que a derivada em um ponto t_0 de uma função de t que representa uma curva é numericamente igual à inclinação da reta tangente à curva que passa pelo ponto $(t_0, f(t_0))$. Assim, a inclinação inicial é simplesmente igual ao lado direito da equação $\frac{dy}{dt} = f(y;t)$. Nosso primeiro método numérico a ser abordado, conhecido como método de Euler, usará esta inclinação inicial para extrapolar e predizer uma situação futura. Para o caso da função $\frac{dy}{dt} = -y$, com y(t=0) = 1, a inclinação na condição inicial é $\frac{dy}{dt} = -1$. Na Figura 2, apresentamos a função e a extrapolação baseada na condição inicial.

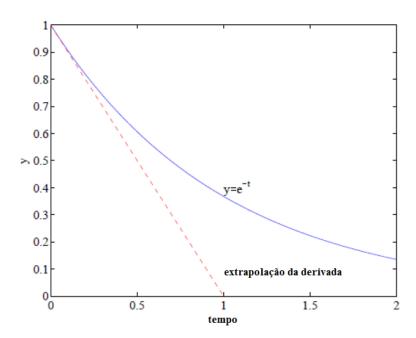


Figura 2: Extrapolação da função $y = e^{-t}$ baseada na condição inicial t = 0. Para breves intervalos de tempo, a estimativa é bastante boa, no caso para t < 0.2, mas claramente fica ruim para tempos maiores.

A extrapolação é válida para tempos que não estejam muito distantes no futuro (no caso, t < 0.2), mas, às vezes, a estimativa ainda assim falha.

Outra maneira de pensar acerca do conceito de extrapolação é imaginar que você está em um carro trafegando em uma pequena rodovia do interior. Você vê uma placa indicando que um posto de gasolina está a 10 km de distância, então você olha no velocímetro e nota que está a 60 km/h. Por extrapolação, você pode inferir que o posto de gasolina está a 10 minutos. A extrapolação assume que você continuará em sua velocidade atual (derivada da posição em relação ao tempo) até que alcance o próximo posto de gasolina. Se não há tráfego e seu controle do carro for total, essa suposição será bastante acurada. Entretanto, sua previsão não será mais acurada se houver qualquer interrupção no trânsito, como um semáforo fechado ou se você ficar preso bem atrás de um caminhão muito lento que não lhe permite a ultrapassagem. A extrapolação será uma boa previsão para um tempo futuro muito próximo, mas cairá por terra para tempos muito ulteriores, exceto em sistemas muito simples.

Uma vez que nossas previsões não serão muito acuradas para um tempo t muito para frente no futuro em relação ao tempo inicial t_0 , faremos pequenos passos no tempo enquanto a suposição da extrapolação for boa, podendo, sempre que possível, extrapolá-la novamente. Usando a equação $\frac{dy}{dt} = -y$ e a condição inicial, conhecemos o valor da função e a inclinação no tempo inicial t=0. O valor no tempo ulterior t_1 pode ser previsto por extrapolação como:



$$y_1 = y_0 + \frac{dy}{dt}|_{t=t_0}(t_1 - t_0)$$

em que a notação $\frac{dy}{dt}|_{t=0}$ significa a derivada de y avaliada no tempo igual a zero. Com a nossa notação específica, a fórmula de extrapolação torna-se:

$$y_1 = y_0 - y_0(t_1 - t_0)$$
.

Essa expressão é equivalente à aproximação por diferença discreta que apresentamos atrás e podemos reescrevê-la como:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y_1 - y_0}{t_1 - t_0} = -y_0 \ .$$

Uma vez que o valor da função em t_1 é conhecido, podemos reavaliar a derivada e transportá-la para frente no tempo em t_2 . Em geral, chamamos o intervalo de tempo sobre o qual fizemos a extrapolação de passo de tempo, $\Delta t = t_1 - t_0$, ou simplesmente passo. A equação $y_1 = y_0 + \frac{dy}{dt}|_{t=t_0}(t_1-t_0)$ é usada como uma equação de iteração, que simplesmente marcha para frente em pequenos incrementos de tempo, sempre resolvendo para o valor de y no passo de tempo seguinte dado pela informação conhecida. Este procedimento é conhecido como o Método de Euler. O resultado deste método para nossa equação-modelo usando um passo de tempo $\Delta t = 0.5$ é mostrado na Figura 3.

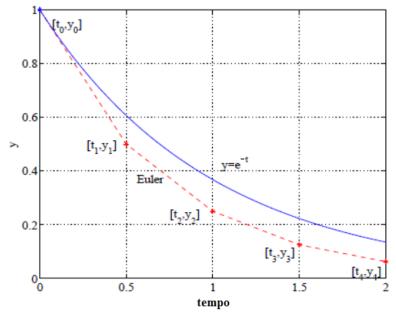


Figura 3: Os pontos ligados pela linha tracejada são os resultados da solução e a linha contínua é a solução exata. O passo é de t=0.5. A extensão do passo sendo grande resulta em erros grandes entre a solução numérica e analítica.



Vemos que a extrapolação da inclinação inicial $\frac{dy}{dt}=-1$ leva-nos ao ponto (0.5,0.5) após o primeiro passo. Então, reavaliamos a inclinação, que agora $\acute{e}\frac{dy}{dt}=-0.5$ e a usamos para extrapolar o próximo passo para t=1, em que atingimos o valor (1,0.25). Este processo irá se repetir. Enquanto o erro na Figura 3 continuar pequeno, o processo continua valendo. Sempre que o passo for feito cada vez menor, a solução numérica irá se tornar mais próxima da solução analítica verdadeira.

Exemplos Ilustrativos

Exemplo 1: Resolva numericamente pelo Método de Euler a equação diferencial $\frac{dy}{dt} = 0.5y$, usando o valor inicial y(0) = 1, no intervalo $t \in [0,2]$ com passos 0.5 e 0.25.

Solução: Antes de aplicar o método, vamos resolver a equação analiticamente (esta é fácil e tem solução), para que possamos fazer uma comparação entre o método analítico e o numérico. A solução analítica é $y(t) = e^{\frac{t}{2}}$.

A solução numérica é dada pelo método de Euler $y_1 = y_0 + \frac{dy}{dt}|_{t=0}(t_1 - t_0)$. A derivada é dada por $\frac{dy}{dt} = 0.5y$; logo, podemos escrever:

$$y_{N+1} = y_N + 0.5y_N \Delta t = y_N (1 + 0.5\Delta t).$$

Para **o passo** $\Delta t = 0.5$, temos:

$$y_0 = y(0) = 1$$

$$y_1 = y_0(1 + 0.5\Delta t)$$
,

resultando, numericamente, em:

$$y_1 = y(0.5) = 1 \times (1 + 0.5 \times 0.5) = 1.25$$

Procedendo da mesma forma, obtemos y_2 :

$$y_2 = y(1.0) = 1.25 \times (1 + 0.5 \times 0.5) = 1.5625$$



е

$$y_3 = y(1.5) = 1.5625 \times (1 + 0.5 \times 0.5) = 1.953125$$

Finalmente, obtemos:

$$y_4 = y(2.0) = 1.953125 \times (1 + 0.5 \times 0.5) = 2.44140625$$
.

O erro foi de aproximadamente 10.2%, diga-se de passagem, um erro bastante alto.

Para **o passo** $\Delta t = 0.25$, temos:

$$y_{N+1} = y_N(1 + 0.5 \times 0.25) = y_N(1.125).$$

Usando essa relação de recorrência, temos:

y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8
1.0	1.125	1.2656	1.42383	1.60180	1.802032	2.02728	2.2806	2.5657

O erro caiu para 5.6%, aproximadamente a metade do anterior. Assim, reduzindo à metade o passo de tempo, reduzimos à metade o erro.

Exemplo 2: Seja a equação diferencial $t\frac{dy}{dt} = t - y$ e a condição inicial y(2) = 2. Determine, usando o método de Euler o valor de y(2.1), com os passos temporais $\Delta t = 0.1$, $\Delta t = 0.05$ e $\Delta t = 0.025$.

Solução: Vamos usar a equação do método de Euler:

$$y_{N+1} = y_N + \Delta t \frac{dy}{dt} \big|_{t=2} .$$

Isolando a derivada na equação diferencial dada, temos:

$$\frac{dy}{dt} = 1 - \frac{y}{t}.$$

Agora, substituindo na equação do método de Euler, recaímos na seguinte equação:

$$y_{N+1} = y_N + \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t=2} = y_N + \Delta t \left(1 - \frac{y_N}{t}\right) = \Delta t + y_N \left(1 - \frac{\Delta t}{t_N}\right).$$



Para **o passo** $\Delta t = 0.1$, temos:

$$y_1 = y(2.1) = 0.1 + 2 \times \left(1 - \frac{0.1}{2}\right) = 2.0$$
.

Para **o passo** $\Delta t = 0.05$, temos:

$$y_1 = y(2.05) = 0.05 + 2 \times \left(1 - \frac{0.05}{2}\right) = 2.0$$
.

$$y_2 = y(2.1) = 0.05 + 2 \times \left(1 - \frac{0.05}{2.05}\right) = 2.001195122$$
.

Para **o passo** $\Delta t = 0.025$, temos:

$$y_1 = y(2.025) = 0.025 + 2 \times \left(1 - \frac{0.025}{2}\right) = 2.0$$
.

$$y_2 = y(2.05) = 0.025 + 2.0 \times \left(1 - \frac{0.025}{2.025}\right) = 2.00030864198$$
.

$$y_3 = y(2.075) = 0.025 + 2.00030864198 \times \left(1 - \frac{0.025}{2.050}\right) = 2.00091463415$$
.

$$y_4 = y(2.1) = 0.025 + 2.00091463415 \times \left(1 - \frac{0.025}{2.075}\right) = 2.00180722892$$

A solução analítica exata é $y(t) = \frac{1}{t}(\frac{1}{2}t^2 + 2)$. Logo, y(2.1) = 2.0024 é a solução exata e o erro relativo da solução numérica é de 0.03%.

Avaliando o Erro Usando Séries de Taylor

Quando resolvemos equações diferenciais ordinárias de 1^a ordem, a tarefa tipicamente realizada é: a partir da informação do estado inicial do sistema, tentamos entender como é que o sistema evolui no tempo t. Assim, com uma abordagem intuitiva para realizar a extrapolação, usamos a informação acerca da inclinação para enviar a solução para frente no tempo. Agora, colocaremos a noção de extrapolação em uma maneira mais formal, isto é, utilizando o formalismo matemático das séries de Taylor, e discutiremos o erro dessas aproximações ao usar tais séries.



Então, considere uma função arbitrária y(t) e assuma que temos toda a informação acerca da função na origem (t = 0). Gostaríamos de construir uma aproximação $\hat{y}(t)$ em relação à função original, y(t), isto é:

$$\hat{y}(t) = a + bt + ct^2 + dt^3 + \cdots,$$

de tal forma que precisaremos de um método para encontrar os coeficientes desconhecidos a, b, c, d etc.

A aproximação mais simples para y(t) seria usar o método de Euler da última seção para casar a derivada das funções verdadeira e aproximada:

$$\hat{y}(t) = y(t=0) + \frac{dy}{dt}|_{t=0}t$$

cuja notação $\frac{dy}{dt}|_{t=0}$ significa mais uma vez a derivada da função em relação a t avaliada no ponto t=0.

Podemos aprimorar a aproximação polinomial casando as derivadas segundas das funções, real e aproximada, na origem, isto é:

$$\hat{y}(t=0) = a = y(t=0),$$

$$\frac{d\hat{y}}{dt}|_{t=0} = b = \frac{dy}{dt}|_{t=0} ,$$

$$\frac{d^2\hat{y}}{dt^2}|_{t=0} = 2c = \frac{d^2y}{dt^2}|_{t=0}.$$

Se continuarmos o casamento entre as derivadas de ordens superiores das funções, real e aproximada, na origem, iremos obter a expressão:

$$\hat{y}(t) = y(t=0) + \frac{dy}{dt}|_{t=0}t + \frac{t^2}{2}\frac{d^2y}{dt^2}|_{t=0} + \frac{t^3}{6}\frac{d^3y}{dt^3}|_{t=0} + \dots + \frac{t^n}{n!}\frac{d^ny}{dt^n}|_{t=0},$$

que é conhecida como série de Taylor da função $\hat{y}(t)$. As séries de Taylor são apresentadas em muitos livros de Cálculo, onde você poderá encontrar mais detalhes, exemplos e generalizações.

Para testar esta série, devemos retornar à nossa função modelo, $y(t) = e\mathbb{Z}^{-t}$.



Substituindo esta função na série de Taylor truncada em n acima, obtemos a aproximação na seguinte forma:

$$\hat{y}(t) = 1 - t + \frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{6} + \dots + (-1)^n \frac{t^n}{n!} .$$

A simplicidade desta expressão é devida ao fato que todas as derivadas de *y* avaliadas na origem são iguais a 1. Na Figura 4, fizemos o gráfico dos primeiros termos da série em comparação com a função verdadeira.

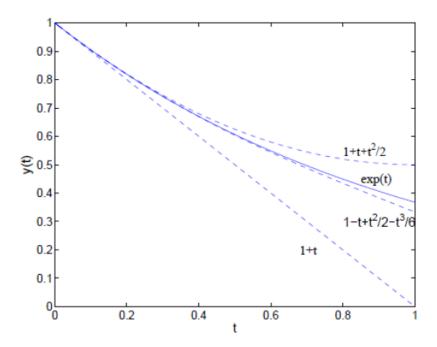


Figura 4: Aproximação em série de Taylor da função e^{-t} . Incluímos os três primeiros termos da expansão. A aproximação é válida para um intervalo maior de t desde que sejam retidos mais termos da expansão.

Vemos que a aproximação funciona bem quando t é pequeno e desvia mais do valor verdadeiro para grandes valores de t. Assim, descobrimos que **quanto** mais termos são incluídos na série de Taylor resulta em uma melhor concordância entre as funções verdadeira e aproximada.

Retornando ao contexto do problema do valor inicial, queremos fazer a solução evoluir a partir da condição inicial até o tempo $t = \Delta t$, um pequeno intervalo de tempo para o futuro. Então, avaliamos a série de Taylor em Δt :

$$\hat{y}(\Delta t) = y(0) + \Delta t \, \frac{dy}{dt} \big|_{t=0} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \big|_{t=0} + \cdots$$

que pode ser arranjada como



$$\frac{\hat{y}(\Delta t) - y(0)}{\Delta t} = \frac{dy}{dt}|_{t=0} + \frac{\Delta t}{2} \frac{d^2 y}{dt^2}|_{t=0} + \cdots$$

que se parece com a derivada discreta (ou com o método de Euler), exceto pelo termo extra do lado direito. **Este termo extra é o erro ao usar o método de Euler.** Tecnicamente, o erro é uma série incluindo termos até o infinito para potências mais altas de t (denotada pelas reticências). Retivemos apenas o primeiro termo supondo que Δt seja pequeno e que então o primeiro termo do erro é dominante. Notemos que, quando $\Delta t = 0.1$, então $\Delta t^2 = 0.01$, $\Delta t^3 = 0.0001$ e assim por diante. Concluímos que o erro no método de Euler irá sofrer uma transformação de escala cujo parâmetro de escala é o Δt . Ao fazermos esta transformação de escala, entendemos que se dividirmos o passo de tempo ao meio, teremos a metade do erro. Há métodos que exibem melhores transformações de escala: se dividirmos o passo de tempo ao meio o erro decresce com uma potência superior de Δt . Conhecendo a transformação de escala é possível checar se o resultado está se comportando conforme o esperado. Em métodos mais complexos é possível usar um controle adaptativo do tamanho do passo de tempo para assegurar que a solução esteja dentro de limites aceitáveis de erro.

Uma forma de confirmar a transformação de escala dos métodos numéricos é fazer o gráfico do erro em um gráfico dilog. Na Figura 5 fazemos o gráfico do erro na aplicação do método de Euler para a nossa equação-modelo em função do tamanho do passo de tempo.

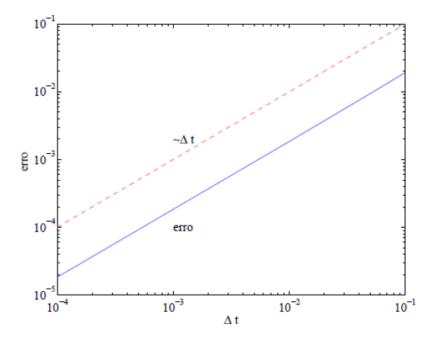


Figura 5: O erro no método de Euler quando variamos o tamanho do passo em comparação com o gráfico linear de Δt . Já que a a inclinação da curva de erro casa com a da curva linear de Δt , concluímos que o erro é uma transformação de escala de Δt .



Também apresentamos a reta, $erro = \Delta t$. Descobrimos que ambas as retas têm a mesma inclinação. Uma reta em um gráfico dilog significa que o gráfico segue uma lei de potência: $erro = \Delta t^n$. A inclinação da reta fornece a potência. Descobrimos, a partir desse gráfico, que o erro no método de Euler sofre uma transformação de escala linear com Δt quando as inclinações das duas curvas apresentadas se casam. Este resultado, obtido por intermédio do gráfico, concorda com a previsão do erro usando a série de Taylor.

Métodos para Equações de Segunda Ordem: Sistema Massa-Mola

Agora que já apresentamos os sistemas de primeira ordem, passemos para os sistemas de equações diferenciais de segunda ordem. O exemplo mais simples de um sistema de segunda ordem é o de uma massa oscilando presa a uma mola. Tal massa é presa a uma mola fixa com a aceleração da gravidade na posição normal à direção do movimento; uma mola é empurrada para trás e é mantida em repouso, até que a massa é solta e passa a oscilar em torno da posição de equilíbrio, a posição em que a mola está relaxada.

As equações que governam este sistema podem ser deduzidas a partir da lei de Newton, F=ma, em que F é a força exercida sobre a massa m e a é a aceleração. As molas possuem muitos formatos, tamanhos e durezas de materiais, mas muitas obedecem a uma relação linear simples, conhecida por Lei de Hooke, isto é, a força exercida pela mola é proporcional ao quanto ela é esticada ou deformada. Matematicamente, F=-kx, em que k é chamada de constante elástica da mola e representa sua dureza, x é o deslocamento a partir de sua posição de equilíbrio, podendo assumir valores positivos e negativos. Igualando as duas expressões para a força da mola e lembrando que a aceleração é a derivada segunda da posição em relação ao tempo, obtemos a **equação de movimento:**

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx.$$



Matematicamente, as condições iniciais que dão a partida neste sistema de massa-mola são:

Para a posição:

$$x(t = 0) = x_0$$
;

• Para a velocidade:

$$v(t=0)=0.$$

Quando resolvemos numericamente equações diferenciais, é conveniente sempre trabalhar com sistemas de equações que envolvam apenas derivadas primeiras. A conveniência é devida à execução numérica, que pode ser generalizada para resolver qualquer problema, a despeito do valor e ordem da derivada mais alta. Seguindo o exemplo anterior, o sistema de segunda ordem é transformado muito facilmente usando as relações entre a velocidade, posição e aceleração:

$$a = \frac{dv}{dt}$$
,

$$v = \frac{dx}{dt},$$

em que v é a velocidade e a a aceleração. Podemos facilmente reescrever a equação de movimento como duas equações:

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{k}{m} x$$

$$\frac{dx}{dt} = v.$$

As razões para reescrevermos a equação de movimento como **um sistema de equações acopladas** se tornarão claras mais tarde. Dizemos que as equações são acopladas porque as derivadas da velocidade são relacionadas à posição e vice-versa. Não detalharemos os métodos para as soluções analíticas desta equação. Nossa intuição para a solução do sistema diz que esta solução deve ser oscilatória, já que se trata de um sistema massa-mola. Em nosso modelo não há mecanismos de amortecimento (tal como atrito) e, portanto, a energia do sistema deve ser conservada. Podemos facilmente confirmar que a solução exata para este problema é satisfeita pela expressão:



$$x = x_0 \cos\left(t\sqrt{\frac{k}{m}}\right).$$

Aplicação do Método de Euler para Sistemas de Segunda Ordem

A partir das condições iniciais para as equações diferenciais para a posição x e para a velocidade v, encontramos as seguintes expressões, válidas para o instante em que é solta a mola:

$$\frac{dv}{dt}\big|_{t=0} = -\frac{k}{m} x_0$$

$$\frac{dx}{dt}\big|_{t=0} = 0 \ .$$

Estas expressões mostram que a aceleração da massa é negativa (a mola está contraída), mas a posição da massa ainda não foi mudada. O fato importante a notar a partir dessa equação é que conhecemos o valor da função (posição e velocidade são dadas na condição inicial) e sabemos o valor de suas derivadas a partir da equação que as governa. Para resolver essas equações com o método de Euler, simplesmente aplicamos esse método para ambas as equações em nosso sistema simultaneamente a fim de prever o estado do sistema para um breve intervalo de tempo à frente no futuro:

$$v_1 = v_0 + \Delta t \; \frac{dv}{dt} |_{t=0} \; .$$

е

$$x_1 = x_0 + \Delta t \; \frac{dx}{dt} \big|_{t=0} \; .$$

Substituindo as respectivas equações de movimento nas equações acima, e generalizando para o N-ésimo passo de tempo, temos:



$$v_{N+1} = v_N - \Delta t \, \, \frac{k}{m} x_N$$

е

$$x_{N+1} = x_N + \Delta t \ v_N \ .$$

É assumido que o passo de tempo N é conhecido e o próximo passo de tempo, o N+1, é desconhecido.

Sem perda de generalidade, é comum fazer a simplificação das constantes nas equações dos programas de aplicação do método, fazendo $\frac{k}{m} = 1$ e $x_0 = 1$.

Para facilitar o trabalho, ao invés de criar variáveis separadas para x e v, iremos armazená-las em um único vetor de dois elementos, escrevendo as equações na seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}_{N+1} = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}_{N} + \Delta t \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}_{N}$$

Quando o vetor é definido como:

$$y = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}$$
,

o método de Euler resultante torna-se:

$$y_{N+1} = y_N + \Delta t \, \frac{d}{dt} y_N \, ,$$

em que o primeiro elemento do vetor y é x e o segundo elemento é v. Substituindo as equações que governam o sistema no sistema acima, temos:

$$\begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}_{N+1} = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}_{N} + \Delta t \ \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} v \\ -x \end{bmatrix}_{N}.$$

Esta representação vetorial se tornará importante quando aumentarmos o tamanho do sistema e tivermos muitas variáveis. Neste exemplo de sistemas de segunda ordem, a economia em termos de linhas de programação não é significativa. Entretanto, à medida que nos propusermos a resolver problemas mais e mais complexos, esta forma de armazenagem se tornará progressivamente mais importante. Na Figura 6, apresentamos o resultado da aplicação do método de



Euler ao sistema massa-mola e comparamos com o resultado analítico. Percebe-se, claramente, uma forte discrepância entre os resultados devido a um erro acumulado numericamente.

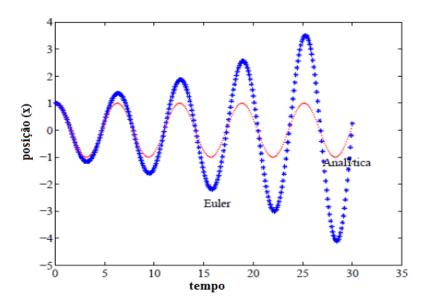


Figura 6: Resultado da aplicação do método de Euler ao sistema massa-mola. Claramente, o erro acumulado está influenciando a solução e contaminando os resultados. O método de Euler mostra que a amplitude das oscilações está crescendo com o tempo enquanto a solução analítica apresenta uma amplitude constante.

Método do Ponto Médio ou de Runge-Kutta de 2ª Ordem

Quando resolvemos equações numericamente, o que realmente queremos fazer é encontrar a melhor maneira de estimar a inclinação média durante o intervalo de um passo de tempo. Até aqui, usamos o valor inicial da derivada para extrapolar a solução após um intervalo de um passo de tempo, uma vez que este é o único setor em que temos alguma informação acerca da função. Pudemos ver o engano nesta suposição no problema de massa-mola, quando descobrimos um crescimento da amplitude com o passar do tempo. Agora, mostraremos um método de obter uma estimativa melhor da inclinação média ao usar a inclinação da função no ponto médio do intervalo.

Considere a Figura 7, onde foi feito o gráfico da função $y(t) = e \mathbb{Z}^{-t}$ e várias aproximações para derivada em um ponto no intervalo 0 < t < 1. Usamos o valor da derivada no começo, no fim e no ponto médio do intervalo.

Vemos que o simples método de Euler baseado na inclinação inicial e final está muito longe da curva analítica verdadeira, enquanto a extrapolação baseada na aproximação de ponto médio é muito melhor. O ponto médio trabalha melhor para este caso específico, mas nós podemos também provar que o ponto médio é uma representação melhor da inclinação média para o intervalo.



A extrapolação baseada na inclinação do ponto médio é dada por:

$$\hat{y}(\Delta t) = y(0) + \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t=\Delta t/2}.$$

Expandindo a derivada de y em relação ao tempo usando uma série de Taylor, e avaliando esta aproximação no intervalo de ponto médio, resulta em:

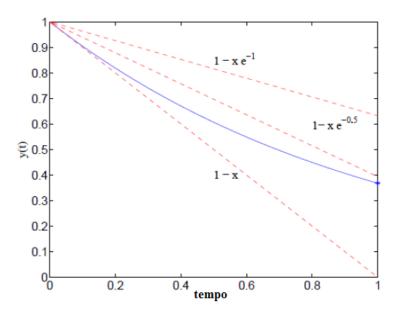


Figura 7: Aproximação de ponto médio para a curva $y(t) = e \mathbb{Z}^{-t}$. A figura mostra a função mais as extrapolações usando a inclinação avaliada no começo do intervalo, no final do intervalo e no ponto médio. A inclinação em qualquer ponto da curva $\acute{e} - e \mathbb{Z}^{-t}$.

$$\frac{dy}{dt}|_{t=\Delta t/2} = \frac{dy}{dt}|_{t=0} + \frac{\Delta t}{2} \frac{d^2y}{dt^2}|_{t=0} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{d^3y}{dt^3}|_{t=0} + \cdots .$$

Substituindo esta expressão na equação para $\hat{y}(t)$ produz a equação:

$$\hat{y}(\Delta t) = y(0) + \Delta t \left(\frac{dy}{dt} \Big|_{t=0} + \frac{\Delta t}{2} \frac{d^2 y}{dt^2} \Big|_{t=0} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{d^3 y}{dt^3} \Big|_{t=0} + \cdots \right).$$

Vemos que os primeiros três termos do lado direito casam exatamente com a aproximação em série de Taylor. O erro não é introduzido até que obtenhamos os termos de ordem Δt^3 . Com o método de Euler simples baseado na condição inicial, o primeiro termo de erro era da ordem de Δt^2 . Usando o valor do ponto médio como estimativa da inclinação para o intervalo, temos uma melhor aproximação do que quando usamos o valor inicial. A dificuldade em usar o método do ponto médio ocorre quando conhecemos tão somente o estado no início do intervalo e, portanto, a inclinação do ponto médio é desconhecida. A dificuldade pode ser remediada com uma simples aproximação se usarmos o método de Euler como um chute para um ponto médio aproximado. Assim,



estimaremos a derivada no ponto médio nesse chute e usaremos o resultado para fazer o passo completo a partir da condição inicial.

Especificamente, o método do ponto médio trabalha da seguinte forma:

$$y_{N+1/2} = y_N + \frac{\Delta t}{2} \, \frac{d}{dt} y_N \,,$$

$$y_{N+1} = y_N + \Delta t \frac{d}{dt} y_{N+1/2} .$$

O primeiro passo aplica o método de Euler até metade do caminho durante o intervalo. Os valores $y_{N+1/2}$ e $t=\frac{\Delta t}{2}$ são usados para recalcular as derivadas. Os valores das derivadas estimadas nos pontos médios são assim usados para dar chutes no transcorrer do domínio inteiro.

Para ilustrar completamente este método, devemos detalhá-lo para um passo de tempo para a equação $\frac{dy}{dt} = -y$ usando um passo de tempo grande, $\Delta t = 1$. A condição inicial é y(t=0)=1, de modo que $\frac{dy}{dt}|_{t=0}=-1$ via equação que governa o sistema. Aplicando esta equação e a condição inicial, a fórmula:

$$y(t) = 1 - \frac{\Delta t}{2}$$

é extrapolada ao ponto médio usando o método de Euler. A esquematização é apresentada na Figura 8.

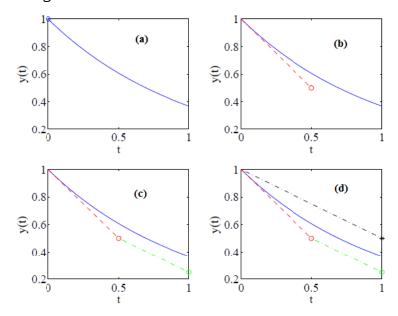


Figura 8: Exemplo do método do ponto médio para $y(t) = e \mathbb{D}^{-t}$, em que $\Delta t = 1$. Os passos são mostrados em quatro figuras: (a) solução exata, em que só conhecemos a condição inicial; (b) usamos o método de Euler para extrapolar para o ponto médio (linha tracejada); (c) encontramos a inclinação como se fôssemos continuar com o método de Euler usando metade do passo; (d) usamos a inclinação do ponto médio para darmos um chute para o intervalo.



A solução para o sistema massa-mola é apresentada na Figura 9, onde é apresentada uma comparação entre o método de Ponto Médio e o método de Euler. Na figura é notória a melhor aproximação do Método de Ponto Médio neste caso.

Finalmente, encerramos esta seção avaliando o erro do Método do Ponto Médio. Para testar o erro, resolvemos a equação até t=1 e calculamos a diferença para a solução exata no mesmo tempo. Depois, repetimos o teste para vários tamanhos de passos temporais. O resultado pode ser visto na Figura 10. A figura mostra no gráfico da inclinação da reta Δt^2 , o ponto médio sofrendo um fator de escala exatamente com Δt^2 . Este fator de escala significa que se dividirmos ao meio o passo temporal, então diminuiremos o erro por um fator 4.

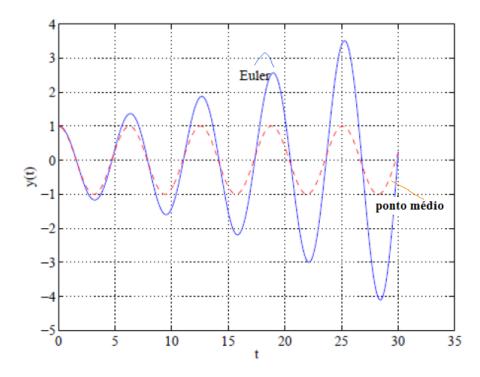


Figura 9: Comparação entre as soluções para o sistema massa-mola usando o método do Ponto Médio e o método de Euler. Percebe-se que o método do Ponto Médio é muito superior neste caso.

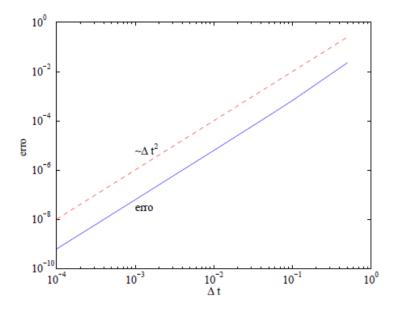


Figura 10: Dependência com a escala do erro no método do Ponto Médio quando aplicado ao sistema-modelo $\frac{dy}{dt} = -y$. O algoritmo do Ponto Médio sofre um fator de escala de Δt^2 .

Exemplos

Exemplo 1: Resolva novamente a equação diferencial $\frac{dy}{dt} = 0.5y$, usando o valor inicial y(0) = 1, no intervalo $t \in [0,2]$ com passos 0.5 e 0.05, mas desta vez usando o método do ponto médio.

Solução: Vamos utilizar a equação para o método do ponto médio:

$$y_{N+1/2} = y_N + \frac{\Delta t}{2} \, \frac{dy_N}{dt},$$

$$y_{N+1} = y_N + \Delta t \, \frac{dy_{N+1/2}}{dt}.$$

Para **o passo** $\Delta t = 0.5$, temos:

$$y_{N+1/2} = y_N + \frac{\Delta t}{2} \ 0.5 y_N = y_N \left(1 + \frac{\Delta t}{4} \right).$$

Como $y_0 = 1$, então,

$$y_{1/2} = y(0.25) = y_0 \left(1 + \frac{\Delta t}{4} \right) = 1.0 \left(1 + \frac{0.5}{4} \right) = 1.125.$$

$$y_1 = y(0.5) = y_0 + \Delta t \ 0.5 \\ y_{1/2} = 1.0 + 0.5 \times 0.5 \times 1.125 = 1.28125 \ .$$



Repetindo o processo, obtemos:

$$y_{3/2} = y(0.75) = y_1 + \frac{\Delta t}{2} \ 0.5y_1 = \ 1.28125 \left(1 + \frac{0.5}{4}\right) = 1.44140625,$$

$$y_2 = y(1.0) = y_1 + \Delta t \ 0.5 y_{\frac{3}{2}} = 1.28125 + 0.5 \times 0.5 \times 1.44140625$$

= 1.6416015625.

$$y_{5/2} = y(1.25) = y_2 + \frac{\Delta t}{2} \ 0.5y_2 = 1.6416015625 \left(1 + \frac{0.5}{4}\right) = 1.84680175781,$$

$$y_3 = y(1.5) = y_2 + \Delta t \ 0.5y_{5/2} = 1.6416015625 + 0.5 \times 0.5 \times 1.84680175781$$

= 2.10330200195.

$$y_{7/2} = y(1.75) = y_3 + \frac{\Delta t}{2} \ 0.5y_3 = \ 2.10330200195 \left(1 + \frac{0.5}{4}\right) = 2.36621475219,$$

$$y_4 = y(2.0) = y_3 + \Delta t \ 0.5y_{7/2} = 2.10330200195 + 0.5 \times 0.5 \times 2.36621475219$$

= 2.69485569.

Esse resultado mostra um erro de 0.86%.

Para o **passo** $\Delta t = 0.05$, daremos apenas a resposta final que é y(2.0) = 2.71763, cujo desvio do resultado exato é de apenas 0.02%



Método de Runge-Kutta de 4^a Ordem

Há muitos esquemas diferentes para resolver equações diferenciais ordinárias numericamente. Neste texto, foram introduzidos dois esquemas simples para apresentar alguns conceitos básicos e fornecer exemplos. Muitas das mais avançadas técnicas são mais difíceis de deduzir, analisar e de se produzir um programa computacional, mas todos os esquemas são baseados em ideias que já introduzimos. Uma das técnicas fundamentais para resolver equações diferenciais ordinárias é o chamado método de Runge-Kutta. Este método é simplesmente uma aproximação de ordem mais alta do método de ponto médio. Ao invés de dar um chute estimando a derivada no ponto médio, o chute é dado no intervalo inteiro. O método de Runge-Kutta, em certo sentido, faz quatro passos, dando chutes para um quarto do intervalo para estimar a derivada, depois para a metade, e assim por diante. A forma precisa em que o método evolui através de um passo de tempo é dada de maneira otimizada para os quatro passos. Nós não apresentaremos uma dedução formal do algoritmo de Runge-Kutta; em vez disso, apresentaremos o método e faremos sua execução. O sistema geral de equações diferenciais ordinárias pode ser escrito como:

$$\frac{dy}{dt} = f(y;t) .$$

O método de Runge-Kutta é definido como:

$$k_{1} = \Delta t f(y_{N}; t_{N}),$$

$$k_{2} = \Delta t f\left(y_{N} + \frac{\Delta t}{2}k_{1}; t_{N} + \frac{\Delta t}{2}\right),$$

$$k_{3} = \Delta t f\left(y_{N} + \frac{\Delta t}{2}k_{2}; t_{N} + \frac{\Delta t}{2}\right),$$

$$k_{4} = \Delta t f\left(y_{N} + \frac{\Delta t}{2}k_{3}; t_{N} + \frac{\Delta t}{2}\right),$$

$$com$$

$$y_{N+1} = y_{N} + \frac{k_{1}}{6} + \frac{k_{2}}{3} + \frac{k_{3}}{3} + \frac{k_{4}}{6}.$$



Podemos notar a similaridade com o método do ponto médio, pois, na verdade, o método do ponto médio é um método de Runge-Kutta de 2^a ordem. O método que acabamos de apresentar é um método de 4ª ordem. Também notemos que cada passo de tempo requer quatro avaliações de derivadas, isto é, da função f. A programação deste método seguirá o formato já utilizado para os métodos de Euler e do ponto médio. Uma vez que simplesmente fornecemos as equações para executar o método de Runge-Kutta, não é claro como o erro se comporta. Em vez de fazermos a análise, iremos calcular o erro ao resolver uma equação numericamente e comparar o resultado a uma solução exata quando variamos o passo. Para testar o erro, resolvemos o problema modelo, $\frac{dy}{dt} = -y$, em que y(0) = 1 e vamos integrar até o tempo t = 1. Já conduzimos este mesmo teste com os métodos de ponto médio e de Euler. Na Figura 11, apresentamos o gráfico do erro entre as soluções exata e numérica em t = 1 como função do tamanho do passo de tempo Δt . Apresentamos o gráfico de uma função Δt^4 sobre o mesmo gráfico para mostrar que o erro do método de Runge-Kutta varia com Δt^2 . Isto é muito bom: se dividimos ao meio o passo, reduzimos o erro em 16 vezes. Para gerar esta figura, o erro mínimo é de 10^{-15} devido à acuracidade de representar números reais com um número finito de dígitos no computador (dupla precisão).

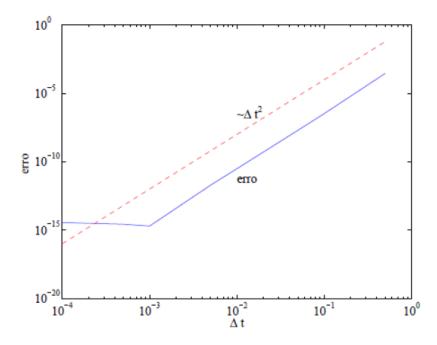


Figura 11: O gráfico apresenta o erro do método de Runge-Kutta em relação à solução exata em função do tamanho do passo temporal Δt . Em um dos gráficos há um fator de escala que varia com Δt^4 . Quando o erro chega a 10^{-15} , ele é dominado pelos números de dupla precisão da programação.



Exemplos

Método de Runge-Kutta

Exemplo 1: Resolver pelo método de Runge-Kutta a equação diferencial $\frac{dy}{dt} = t - y + 2$, com y(0) = 2 e $y \in [0,1]$ com tamanho do passo $\Delta t = 0.25$.

Solução: A solução analítica é dada por:

$$v(t) = t - e^{-t} + 1$$
.

O valor exato de y(1) = 2.3679, com erro na 4^a casa.

Para o cálculo numérico, vamos escrever as fórmulas do método de Runge-Kutta de $4^{\rm a}$ ordem:

$$k_1 = \Delta t f(y_0; t = 0) = 0.25(0 - 2 + 2) = 0$$

$$k_2 = \Delta t f\left(y_0 + \frac{\Delta t}{2}k_1; t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) = 0.25 f\left(2 + \frac{0.25}{2} \times 0; 0 + \frac{0.25}{2}\right) = 0.25 f(2; 0.125)$$

= 0.03125,

$$k_3 = \Delta t f\left(y_0 + \frac{\Delta t}{2}k_2; t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) = 0.25 f\left(2.0 + \frac{0.25}{2} \times 0.03125; 0 + \frac{0.25}{2}\right)$$

= 0.25 f(2.0039; 0.125) = 0.027344.

$$k_4 = \Delta t f \left(y_0 + \frac{\Delta t}{2} k_3; t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) = 0.25 f \left(2.0 + \frac{0.25}{2} \times 0.027344; 0 + \frac{0.25}{2} \right)$$

= 5.5664 × 10⁻².

O valor da função é dado por:

$$y_1 = y(0.25) = y_0 + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} = 2.0288$$
.

Como o cálculo que se segue é muito tedioso, iremos mostrar apenas os resultados finais:

$$k_1 = 0.0553, k_2 = 7.9638 \times 10^{-2}, k_3 = 7.6595 \times 10^{-2} e \ k_4 = 9.8651 \times 10^{-2}.$$



O resultado é

$$y_2 = y(0.50) = y_1 + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} = 2.1065$$
.

$$k_1 = 9.8375 \times 10^{-2}, k_2 = 0.11733, k_3 = 0.11496 e k_4 = 0.13214.$$

$$y_3 = y(0.75) = y_2 + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} = 2.2223$$
.

Finalmente:

$$k_1 = 0.13193, k_2 = 0.14668, k_3 = 0.14484 e k_4 = 0.15822.$$

$$y_4 = y(1.0) = y_3 + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} = 2.3678$$
.

Podemos notar que o resultado é praticamente o mesmo que o resultado exato.

Nesta seção final, introduziremos alguns sistemas com conjuntos de equações maiores do que os apresentados até aqui e que exibem comportamentos não lineares. Estes exemplos são destinados a fornecer um guia ao estudante para futuras execuções de métodos numéricos para uma grande variedade de problemas. Esta seção é também destinada a voltar os olhos para sistemas que tenham comportamentos interessantes e complexos que não são tratáveis via análise matemática pura. Entretanto, estes resultados, juntamente com técnicas de análise mais avançadas, podem revelar comportamentos muito mais não usuais ou fora do comum.

Exemplo 1: O Atrator de Lorentz: Lorentz propôs um sistema de equações diferenciais como um modelo simples de convecção atmosférica e esperava usar suas equações para auxiliar a prever o tempo. Os detalhes de sua dedução para este modelo estão além dos objetivos deste texto e, assim, escreveremos simplesmente suas equações para usá-las em_seguida. Uma vez que as equações resultantes eram muito complexas, Lorentz as resolveu numericamente. Computadores eram lentos naquele tempo e, um dia, ao invés de rodar novamente



um determinado cálculo a partir do tempo t=0, ele usou os dados escritos pelo programa a partir de um dia anterior em um tempo intermediário. Ele notou que quando resolvia suas equações, obtinha respostas completamente diferentes se iniciasse a solução a partir do começo, ou parasse na metade do caminho e reiniciasse. Lorentz procurou a diferença até chegar ao fato que, quando ele digitou as condições para o reinício, ele usou apenas uns poucos dígitos significativos. Logo descobriu que o sistema era muito sensível à condição inicial. Para uma pequena variação na condição inicial, a solução das equações divergia muito no tempo. Mais tarde, ele também notou que enquanto as variáveis dispostas como função do tempo pareciam aleatórias, as variáveis dispostas umas com as outras sem o tempo explicitamente apresentavam padrões regulares e interessantes. Iremos explorar o atrator de Lorentz usando os métodos numéricos que apresentamos. O sistema de equações que Lorentz desenvolveu era:

$$\frac{dx}{dt} = 10(y - x) \,,$$

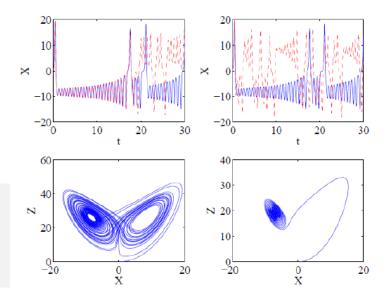
$$\frac{dy}{dt} = x(27 - z) - y,$$

$$\frac{dz}{dt} = xy - \frac{8}{3}z.$$

Não discutiremos aqui a dedução dessas equações, mas elas são baseadas em argumentos físicos relativos à convecção atmosférica. As variáveis $x, y \in z$ representam quantidades físicas, tais como temperaturas e velocidades de fluxo, enquanto os números 10; 27 e $\frac{8}{3}$ representam propriedades do sistema atmosférico.

não são constantes As constantes universais e o sistema irá se comportar de diferente forma para diferentes constantes. Para o propósito desta seção, tomaremos estes números como dados do problema. Alguns resultados interessantes são mostrados na Figura 12.

Figura 12: A figura apresenta diversos resultados gerados a partir das equações de Lorentz: i) história temporal da variável x para a condição inicial (1,0,0) (linha pontilhada) e (1,0.01,0.01) (linha tracejada). Vemos a sensibilidade em relação à condição inicial.





Nesta figura, demonstramos várias características interessantes das equações de Lorentz. O primeiro conceito é a sensibilidade às condições iniciais. A primeira imagem mostra a história no tempo de duas condições iniciais que diferem em apenas 1%: Os dois sistemas evoluem identicamente durante um intervalo de tempo para, então, divergirem. Tal resultado é a razão pela qual a previsão detalhada do clima é muito difícil para muitos dias além no futuro. Indiferentes em relação à qualidade do modelo, simplesmente, não sabemos a condição inicial precisa para darmos partida no modelo (isto é, o tempo que está fazendo hoje), o que nos impede de obter os detalhes do tempo em um futuro muito distante. O gráfico que é apresentado a seguir na Figura 13 mostra a evolução usando diferentes métodos: ponto médio e Runge-Kutta. Pela mesma razão, as equações são muito sensíveis às condições iniciais, o que também as tornam sensíveis aos métodos numéricos. Justamente pelo motivo que pequenas diferenças nas condições iniciais causam uma evolução muito diferente no sistema, os erros no método numérico podem causar também soluções numéricas muito diferentes. Embora a história temporal siga, de alguma forma, uma aleatoriedade e um padrão imprevisível, ainda assim, de forma previsível, qualquer estado atual sempre cairá em uma evolução muito parecida com a figura de uma borboleta. Podemos pensar que este gráfico mostra que, embora o estado em detalhe de um sistema seja desconhecido, há alguma previsibilidade e um padrão de comportamento. Finalmente, variamos o parâmetro de 27 para 20 na equação para $\frac{dy}{dt}$ e vemos que o sistema se comporta de maneira muito diferente. O sistema não é apenas sensível à condição inicial, mas é sensível aos parâmetros da equação. Quando o parâmetro é 27, o sistema oscila em um padrão de "borboleta" para sempre. Quando o parâmetro é 20, o sistema evolui para um estado estacionário. Este sistema tem sido muito discutido na literatura especializada e muitos resultados detalhados e análises existem nessa literatura. Estes resultados foram apresentados para fornecer ao estudante uma experiência introdutória acerca do comportamento de sistemas complexos e de sistemas interessantes que podem ser facilmente tratados usando métodos numéricos.

Exemplo 2: O Pêndulo Forçado - Um simples pêndulo pode ser um sistema não linear extremamente rico. Imagine uma massa grande, m, na extremidade de um bastão rígido e leve de comprimento L. A outra extremidade do bastão é ligada a um pequeno motor que fornece um momento M. Fazemos o motor se mover de forma sinusoidal e podemos controlar o momento M e a frequência ω . A aceleração da gravidade g atua para baixo e o ângulo θ é considerado nulo no repouso. O atrito no motor e as forças de vínculo fornecem um momento proporcional à velocidade angular com um coeficiente β .



Aplicando as leis de Newton, obtemos, após aplicar o balanço detalhado para o equilíbrio de forças, a seguinte equação:

$$mL\frac{d^2\theta}{dt^2} = -mg\sin\theta - \beta\frac{d\theta}{dt} + M\sin\omega t,$$

que pode ser rearranjada como:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{L}\sin\theta - \frac{\beta}{mL}\frac{d\theta}{dt} + \frac{M}{mL}\sin\omega t.$$

Uma nova simplificação pode ser feita se redefinirmos o tempo por uma transformação de escala de forma a torná-lo adimensional e que varia com sua frequência natural. O novo tempo é definido como:

$$\hat{t} = t \sqrt{\frac{L}{g}} .$$

Fazendo esta substituição resulta em:

$$\frac{d^2\theta}{d\hat{t}^2} = -\sin\theta - \frac{\beta}{m\sqrt{gL}}\frac{d\theta}{d\hat{t}} + \frac{M}{mg}\sin\left(\omega\hat{t}\sqrt{\frac{g}{L}}\right).$$

Decidimos forçar o pêndulo para oscilar em sua frequência natural (tal qual uma criança sendo empurrada em um balanço) e o parâmetro de amortecimento é escolhido 0.2. Podemos agora estudar uma variedade de comportamento de sistemas interessantes.

Na Figura 13, apresentamos a evolução não linear do sistema pendular. Em quatro imagens, mostramos a evolução de θ para diferentes amplitudes do pêndulo forçado.

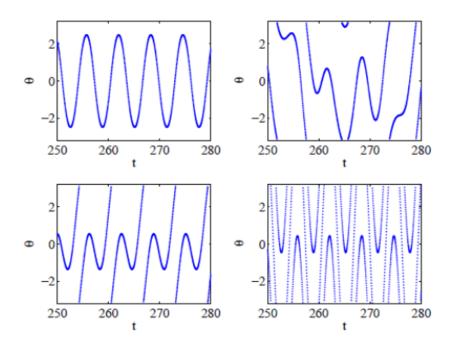


Figura 13: A evolução temporal de θ para diferentes amplitudes forçadas. Da esquerda para a direita e para baixo, a amplitude é 1.6, 1.61, 2 e 7. Vemos nas primeiras duas imagens que o pêndulo está balançando em um estado estacionário. Um pouquinho mais de energia e o pêndulo balança até o topo.

Nas primeiras duas imagens, descobrimos que um pequeno aumento na energia leva o pêndulo a partir de um estado estacionário oscilando entre $\pm 140^{\circ}$ para uma oscilação aleatória que balança até o topo. O comportamento não linear, quando o pêndulo balança em amplitudes muito altas, permite esta súbita transição em contrapartida a um aumento constante da amplitude de oscilação até $\pm 180^{\circ}$.

Outra maneira de representar o comportamento complexo não linear deste sistema é levantar a questão: no caso altamente forçado, o sistema irá rodar no sentido horário ou anti-horário? Nós geramos o espaço das condições iniciais em termos do ângulo e da velocidade angular e fazemos o gráfico em que um pixel preto representa o sentido horário e um pixel branco representa o sentido anti-horário. O resultado deste exercício é mostrado na Figura 14. Nós observamos uma estrutura muito complexa e descobrimos que o sistema é muito sensível à condição inicial. Mesmo para tal sistema simples, é muito difícil fazer esta previsão precisa em um sistema físico real.

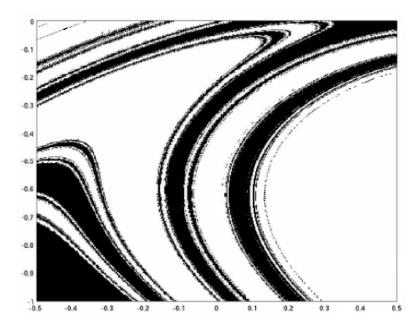


Figura 14: Mapa do sentido em que o pêndulo gira logo após passar por $\theta=\pi$. Os pixels pretos são para a rotação no sentido horário e os brancos, para o sentido anti-horário. Os eixos, horizontal e vertical, estão as condições iniciais para θ e ω . O pêndulo tem o valor da amplitude forçada igual a 3.



Material Complementar

Para conhecer e se informar um pouco mais sobre métodos numéricos de resolução de equações diferenciais ordinárias, visite o site:

E para complementar sua leitura, visite também:



- http://www.math.ist.utl.pt/~calves/cursos/Eqdiford.htm
- http://www.khanacademy.org/math/differential-equations
- http://www.ugrad.math.ubc.ca/coursedoc/math101/notes/



Depois de ler o material e informar-se sobre o assunto, vamos pôr em prática esses conhecimentos nas atividades!

Bom trabalho!



Anotações	owells Bernard Andrews and Desiration of Young In Address of Young and Young and In



Referências



RUGGIERO, M.A.G. & LOPES, V.L.R. Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais. 2ª Edição. São Paulo: Editora Makron Books, 1998.

SPERANDIO, D., MENDES, J.T. & SILVA, L.H.M. Numérico: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos. São Paulo: Editora Pearson, 2003.

HUMES, A.F.P.C., MELO, I.S.H., YOSHIDA, L.K. & MARTINS, W.T. Noções de Cálculo Numérico. São Paulo: Editora McGraw Hill, 1984.

BURDEN, R.L. & FAIRES, J.D. Análise Numérica. São Paulo: Editora Pioneira Thomson Learning, 2003.

BARROS, I.Q. Introdução ao Cálculo Numérico. São Paulo: Editora Edgard Blucher Ltda, 1972.

STEINBERG, A. & WINTERLE, P. Álgebra Linear. Editora Pearson Makron Books, 1987.

PISKOUNOV, N. Cálculo Diferencial e Integral, Vols. I e II. Porto: Lopes da Silva Editora, 1983.

SPIGEL, R.M. Manual de Fórmulas e Tabelas Matemáticas, São Paulo: Makron Books dos Brasil Ltda, 1973.

GRADSHTEYN, I.S. & RYZHIK, I.M. Table of Integrals, Series and **Products.** 7^a Edição. San Diego: Elsevier Inc., 2007.



www.cruzeirodosul.edu.br

Campus Liberdade

Rua Galvão Bueno, 868

01506-000

São Paulo SP Brasil

Tel: (55 11) 3385-3000









