Equações diferenciais ordinárias Resolução numérica

Paulo Valim

Introdução

- Equações diferenciais aparecem com bastante frequência em modelos que descrevem quantitativamente fenômenos em diversas áreas, como por exemplo mecânica dos fluidos, fluxo de calor, vibrações, reações químicas, análise de circuitos etc.

Classificações

- Equação diferencial ordinária
  - Equações diferenciais com apenas uma variável independente. Ex.:

$$\frac{dy}{dx} = x + y \qquad y' = x^2 + y^2 \qquad y'' + (1 - y^2)y' + y = 0 \qquad u''' + e^{-u} - e^{u} = f(x)$$

  - Uma equação diferencial com mais de uma variável independente é uma equação diferencial parcial. Ex.:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Classificações

- A ordem de uma equação diferencial é a mais alta ordem de derivação que aparece na equação;
- Uma equação diferencial ordinária é dita linear se a função e suas derivadas aparecem linearmente na equação

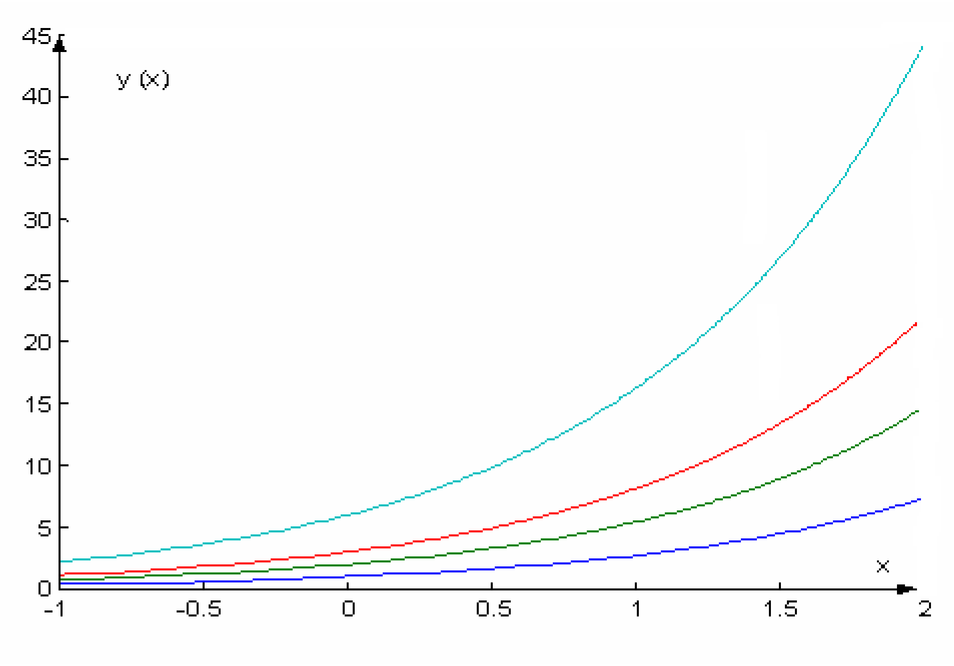
$$xy' = x + y \qquad\qquad y'' + (1 - y^2)y' + y = 0$$

Linear — Não linear

Solução de uma equação diferencial ordinária

- Uma solução de uma equação diferencial ordinária é uma função da variável independente que satisfaça a equação. Ex.:
- $dy/dx=y'=y$ ➔ $y(x)= ae^x$, a pertencente aos números reais
- $u'''=0$ → é satisfeita para $u(x)= p_2(x)$

- Portanto, uma equação diferencial possui uma família de soluções.



$$\boxed{y(x) = ke^{x}}$$

Solução de uma equação diferencial ordinária

- Já que não possui uma única solução, vemos que para individualizar uma solução temos de impor condições suplementares.
- PVI: problema de valor inicial
  - Dada uma equação de ordem m, a função, assim como suas derivadas até a ordem m-1, são especificadas em um mesmo ponto.
- PVC: problema de valor de contorno
  - Em problemas envolvendo equações diferenciais ordinárias de ordem m, $m \geq 2$, as condições fornecidas para a busca de uma solução única não são todas dadas em um mesmo ponto.

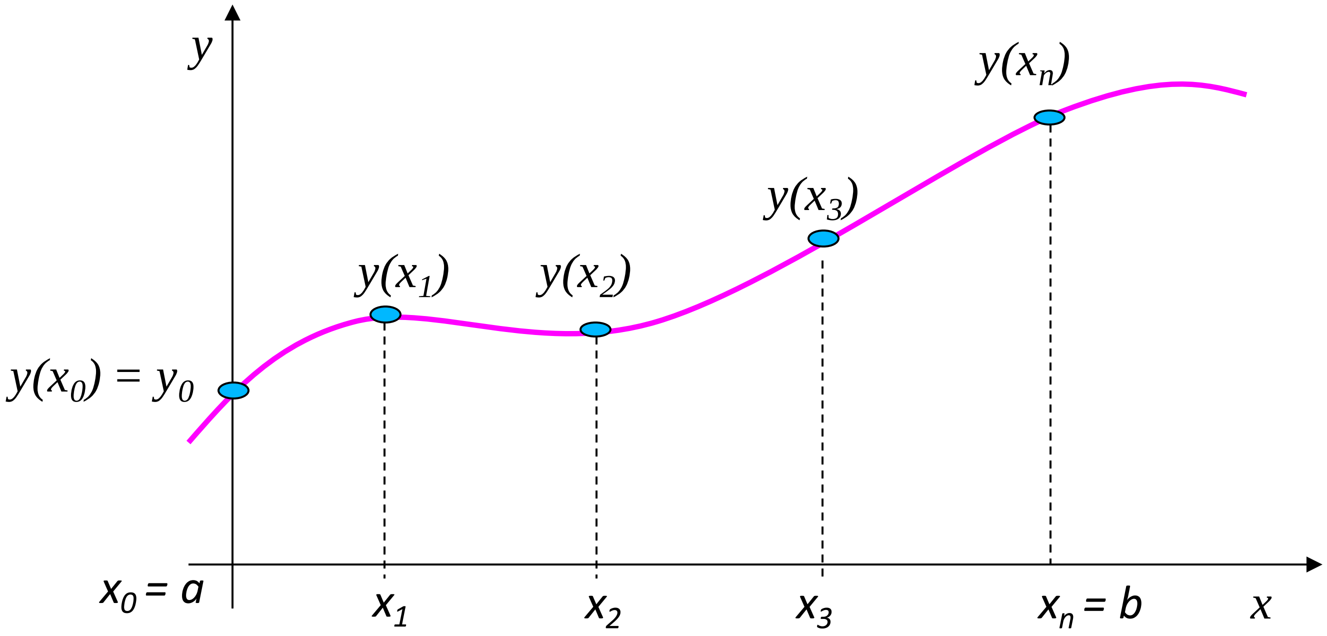
Solução de uma equação diferencial ordinária

- Vamos estudar métodos numéricos para aproximar soluções de problemas de valor inicial;
- A solução analítica pode ser difícil de se encontrar.

Considere a equação diferencial ordinária de primeira ordem com condição inicial :

$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}, \qquad x \in [a,b];\ x_0 = a$$

Se a solução da equação diferencial acima é do tipo *y(x)*, conforme ilustrado abaixo:



$$y(x_0), y(x_1), y(x_2), y(x_3), \ldots, y(x_n)$$

conforme a tabela abaixo:

x	x_1	x_2	x_3	$\cdots$	x_n
y	y_1	y_2	y_3	$\cdots$	y_n

onde $x_j = x_0 + jh$, com $h = \dfrac{b-a}{n}$ e n é o número de subintervalos de *[a,b]*.

Considera-se que a notação $y(x_j),\ j = 1,2,\ldots,n$ indica a solução exata da EDO nos pontos $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n$, e $y_j,\ j = 1,2,\ldots.,n$ indica a solução aproximada obtida por um método numérico.

Na solução numérica não se determina a expressão literal da função *y(x)*, mas sim uma solução aproximada do PVI num conjunto discreto de pontos.

Nos problemas das ciências aplicadas, normalmente estuda-se o comportamento dinâmico de determinadas variáveis, portanto necessita-se da evolução das variáveis em função da variável independente. A partir dos dados numéricos é possível gerar um esboço do gráfico da função incógnita.

Métodos baseados na série de Taylor

Série de Taylor:

Seja *f* uma função com derivadas de todas as ordens em algum intervalo contendo a como um ponto interior. Então, a série de Taylor gerada por f em *x = a* é

$$\boxed{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \ldots}$$

Os métodos que usam o desenvolvimento em série de Taylor de $y(x)$ teoricamente fornecem solução para qualquer equação diferencial. No entanto, do ponto de vista computacional, os métodos de série de Taylor de ordem mais elevada são considerados inaceitáveis pois, a menos de uma classe restrita de funções $f(x,y)$ ($f(x,y) = x^2 + y^2$, por exemplo), o cálculo das derivadas totais envolvidas é extremamente complicado.

Método de Euler

Consideremos, o método de série de Taylor de ordem $k = 1$, ou seja,

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + hy_i' = y_i + hf(x_i, y_i)}$$

onde

$$\boxed{e(x_{i+1}) = \frac{y''(\xi_{x_{i+1}})}{2}h^2}$$

Este é o método de Euler, que é um método de série de Taylor de ordem 1.

INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA DO MÉDODO DE EULER:

Como conhecemos x_0 e $y_0 = f(x_0)$, então sabemos calcular $y'(x_0) = f(x_0,y_0)$. Assim, a reta $r_0(x)$ que passa por (x_0,y_0), com coeficiente angular $y'(x_0)$, é:

$$\boxed{r_0(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0)}$$

Escolhido $h = x_{k+1} - x_k$

$$y(x_1) \approx y_1 = r_0(x_1) = y(x_0) + hy'(x_0)$$

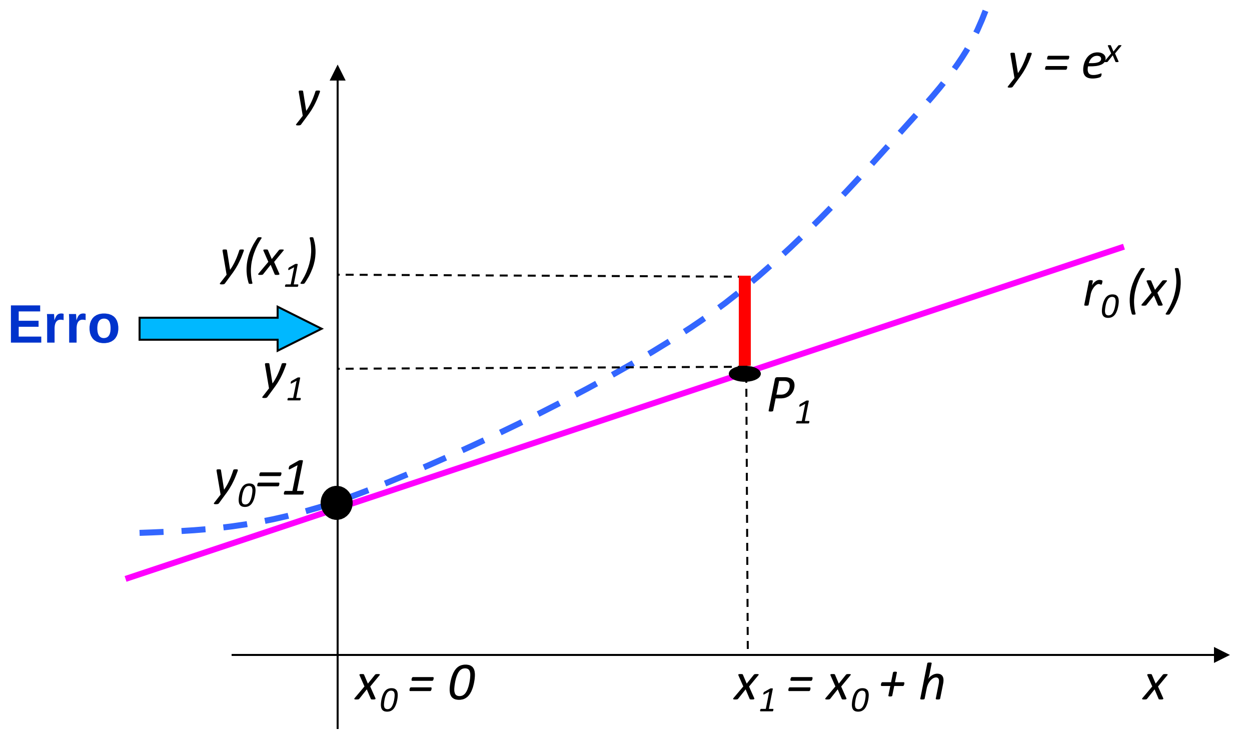
ou seja

$$\boxed{y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0).}$$

O raciocínio é repetido com (x_1,y_1) e $y_2 = y_1 + hf(x_1,y_1)$ e assim, sucessivamente, o método de Euler nos fornece:

$$\boxed{y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k).} \qquad k = 0,1,2,\ldots$$

GRAFICAMENTE:



EXEMPLO:

Seja o PVI: $y' = y$, $y(0) = 1$. Trabalhando com quatro casas decimais, usaremos o método de Euler para aproximar $y(0.04)$ com erro menor do que ou igual a $\varepsilon; \varepsilon = 5 \times 10^{-4}$.

O primeiro passo é encontrar h de modo que:

$$|e(x_i)| = \left| \frac{y''(\xi_{x_i})}{2} h^2 \right| \leq \varepsilon$$

Neste caso, conhecemos a solução analítica do PVI: $y(x) = e^x$, temos então que:

$$M_2 = \max_{x \in [0, 0.04]} | y''(x) | = e^{0.04} = 1.0408 \Rightarrow | y''(\xi_{x_i}) | \leq M_2$$

donde $\quad |e(x)| \le \dfrac{1.0408}{2} h^2 \qquad \forall x \in I = [0, 0.04]$

$$\frac{1.0408}{2} h^2 \le 5\times 10^{-4}; \text{então } h^2 \le \frac{2\times 5\times 10^{-4}}{1.0408} = \frac{10^{-3}}{1.0408}$$

Portanto,

$$\boxed{h \le 0.0310.}$$

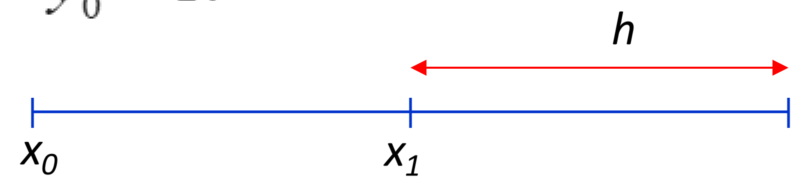
Considerando pontos igualmente espaçados, tem-se $h = 0.04/n$, onde n é o número de subintervalos de I. Assim,

$$\frac{0.04}{n} \le 0.0310 \Rightarrow n \ge \frac{0.04}{0.031} \Rightarrow n \ge 1.29 \Rightarrow n \ge 2.$$

Portanto, tomando $n = 2$, $h = 0.02$.

Assim, $x_0 = 0$ e $y(x_0) = y(0) = y_0 = 1.$

$x_1 = 0.02$



$x_2 = 0.04$

Agora: $y(x_1) \approx y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = y_0 + hy_0$

$$= y_0(1+h) = 1(1+0.02)$$

$$= 1.02$$

e $y(x_2) \approx y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = \cdots = y_1(1+h)$

$$= 1.02(1.02) = 1.02^2$$

$$= 1.0404$$

Dado que $e^{0.04}$, com quatro casas decimais, vale 1.0408, temos que o erro cometido foi $1.0408 - 1.0404 = 4 \times 10^{-4} < 5 \times 10^{-4}$.

EXEMPLO 2: CALCULAR USANDO O MÉTODO DE EULER O VALOR DE $y(2,1)$ DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL USANDO $h = 0{,}025$

$$\begin{cases} x y' = x - y \Rightarrow y' = \dfrac{x-y}{x} \\ y(2) = 2 \end{cases}$$

x	2	2,025	2,05	2,075	2,10
y_k	2	2,000	2,0003	2,0009	Y_4

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

$$\boxed{f(x_k, y_k) = y' = \frac{x-y}{x}}$$

$x_1 = 2{,}025 \Rightarrow y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0) = 2 + 0{,}025\left(\frac{2-2}{2}\right) = 2$

$x_2 = 2{,}05 \Rightarrow y_2 = 2 + 0{,}025\left(\frac{2{,}025 - 2}{2{,}025}\right) = 2{,}0003$

$x_3 = 2{,}075 \Rightarrow y_3 = 2{,}0003 + 0{,}025\left(\frac{2{,}05 - 2{,}0003}{2{,}05}\right) = 2{,}0009$

$x_4 = 2{,}10 \Rightarrow y_4 = 2{,}0009 + 0{,}025\left(\frac{2{,}075 - 2{,}0009}{2{,}075}\right) = 2{,}0018$

$$y(2{,}1) \approx \boxed{y_4 = 2{,}0018}$$

$$\Rightarrow \boxed{y(2{,}1) = 2{,}00238}$$

$$\boxed{y(x) = \frac{x}{2} + \frac{2}{x}}$$

RESOLUÇÃO USANDO EULER MELHORADO

$$\begin{cases} xy' = x - y \\ y(2) = 2 \end{cases}$$

$y(2,1)$

$h = 0,025$

$\Rightarrow$ $\boxed{f(x,y) = \dfrac{x-y}{x}}$

$x_0 = 2 \qquad y_0 = 2$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \text{ , onde :} \\ k_1 &= f(x_n, y_n) \text{ ,} \\ k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1) \text{ ,} \end{aligned}$$

$\boxed{y_1}$

$K_1 = \dfrac{2-2}{2} = \varnothing$

$K_2 = f(2,025\,,2) = \dfrac{2,025-2}{2,025} = 0,01235$

$y_1 = 2 + \dfrac{0,025}{2}(0 + 0,01235) = 2,00015$

$x_1 = 2,025 \qquad y_1 = 2,00015$

$\boxed{y_2}$

$K_1 = \dfrac{2,025-2,00015}{2,025} = 0,01227$

$K_2 = f(2,05\,,\,2,00046) = \dfrac{2,05-2,00046}{2,05} = 0,02417$

$y_2 = 2,00015 + \dfrac{0,025}{2}(0,01227 + 0,02417) = 2,00061$

$x_2 = 2,05 \qquad y_2 = 2,00061$

$\boxed{y_3}$

$$K_1 = f(\underbrace{2{,}05}_{x} ; \underbrace{2{,}00061}_{y}) = \frac{2{,}05 - 2{,}00061}{2{,}05} = 0{,}02409$$

$$K_2 = f(\overbrace{2{,}075}^{x} ; \overbrace{2{,}00121}^{y}) = \frac{2{,}075 - 2{,}00121}{2{,}075} = 0{,}03556$$

$$y_3 = 2{,}00061 + \frac{0{,}025}{2}(0{,}02409 + 0{,}03556) = 2{,}00136$$

$$x_3 = 2{,}075 \qquad y_3 = 2{,}00136$$

$\boxed{y_4}$

$$K_1 = f(2{,}075 ; 2{,}00136) = \frac{2{,}075 - 2{,}00136}{2{,}075} = 0{,}03549$$

$$K_2 = f(2{,}1 ; 2{,}00224) = \frac{2{,}1 - 2{,}00224}{2{,}1} = 0{,}04655$$

$$y_4 = 2{,}00136 + \frac{0{,}025}{2}(0{,}03549 + 0{,}04655) = \boxed{2{,}00238 \approx y(2{,}1)}$$

$$2{,}0023805$$

x_k y_k k_1 $x_k + h$ $y_k + h.k_1$ k_2 y_{k+1}

$$\begin{cases} y' = 0{,}04\, y \\ y(0) = 1000 \end{cases}$$

$y(1) = ?$

VÁRIOS TAMANHOS
DE h

→ EULER
→ EULER MELHORADO

$h = 0{,}5$
$h = 0{,}25$
$h = 0{,}2$

$$\begin{cases} y' = \dfrac{2y}{x+1} + (x+1)^3 \\ y(0) = 3 \end{cases}$$

$$\begin{cases} y(1) \text{ e } y(2) \\ h = 0{,}25 \end{cases}$$

Método de Runge-Kutta

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

A idéia básica destes métodos é aproveitar as qualidades dos métodos de série de Taylor (ordem elevada) e ao mesmo tempo eliminar sua maior dificuldade que é o cálculo de derivadas de $f(x,y)$ que, conforme vimos, torna os métodos de série de Taylor computacionalmente inaceitáveis.

Podemos dizer que os métodos de Runge-Kutta de ordem *p* se caracterizam pelas propriedades:

- São de passo um (auto-iniciantes);
- não exigem o cálculo de derivadas parciais de $f(x,y)$;
- necessitam apenas do cálculo de $f(x,y)$ em determinados pontos (os quais dependem da ordem dos métodos);

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA DE 1ª ORDEM: MÉTODO DE EULER

Já vimos que o método de Euler é um método de série de Taylor de 1ª ordem:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

Observe que o método de Euler possui as propriedades anteriores que o caracterizam como um método de Runge-Kutta de ordem $p = 1$.

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA DE 2ª ORDEM:

Inicialmente será apresentado um método particular que é o método de Heun, ou método de Euler Aperfeiçoado, pois ele tem uma interpretação geométrica bastante simples.

Conforme o próprio nome indica, este método consiste em fazer mudanças no método de Euler para assim conseguir um método de ordem mais elevada.

Método de Euler aperfeiçoado: interpretação geométrica

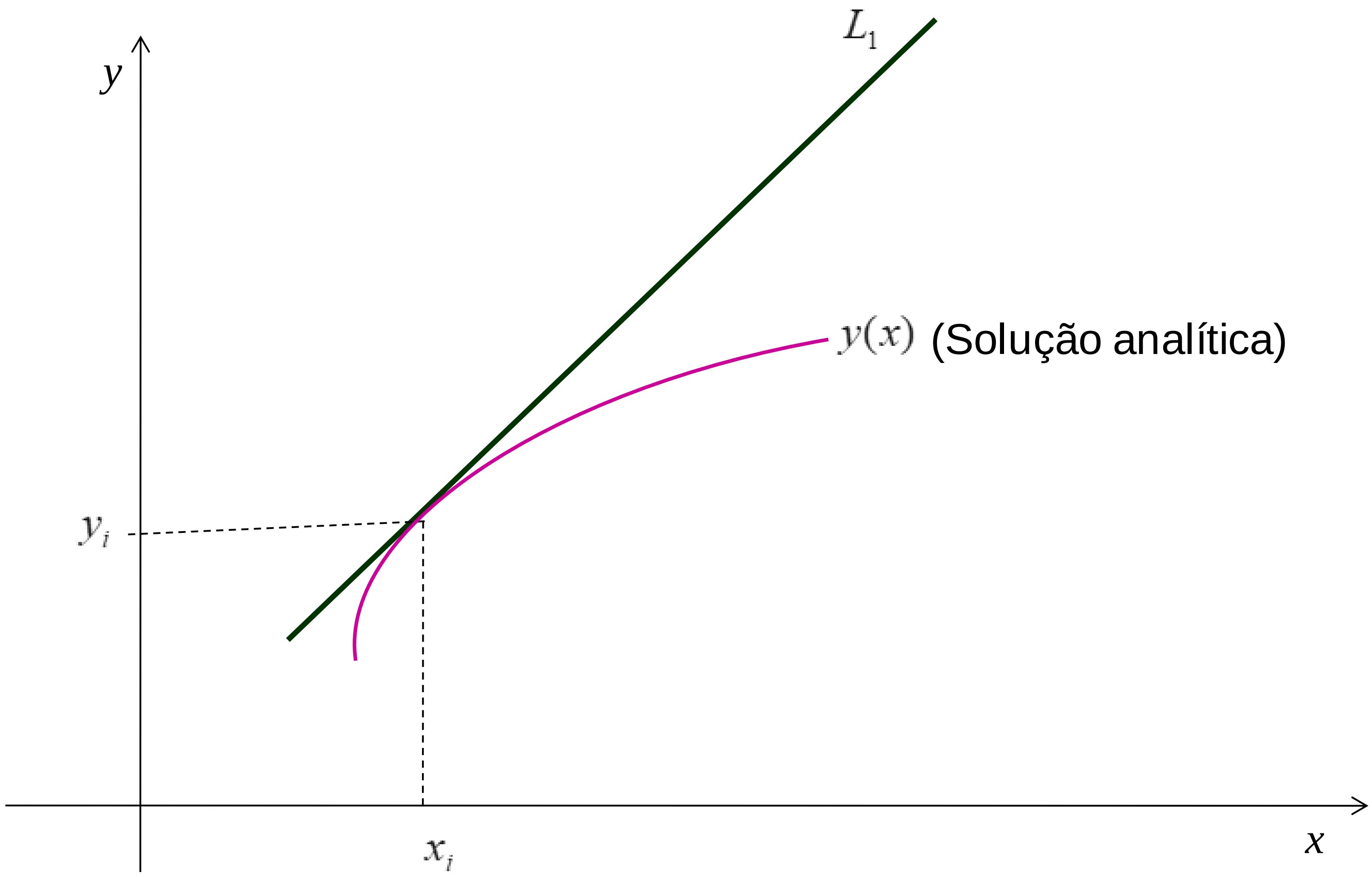
Dado o PVI:

$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}, \qquad x \in [a,b];\ x_0 = a$$

Considere o ponto (x_i, y_i), $y_i \cong y(x_i)$. Vamos supor a situação ideal em que a curva desenhada com linha cheia seja a solução $y(x)$ da nossa equação (isto só acontece mesmo em (x_0, y_0)).

Por (x_i, y_i) traçamos a reta L_1 cujo coeficiente angular é $y'_i = f(x_i, y_i)$, ou seja,

$$\boxed{L_1 : z_1(x) = y_i + (x - x_i)y_i' = y_i + (x - x_i)f(x_i, y_i).}$$



L_1
y
$y(x)$ (Solução analítica)
y_i
x_i
x

Assim, dado o passo h, $z_1(x_{i+1}) = z_1(x_i + h)$ é igual ao valor y_{i+1} obtido do método de Euler, que chamamos aqui de $\bar{y}_{i+1}$.

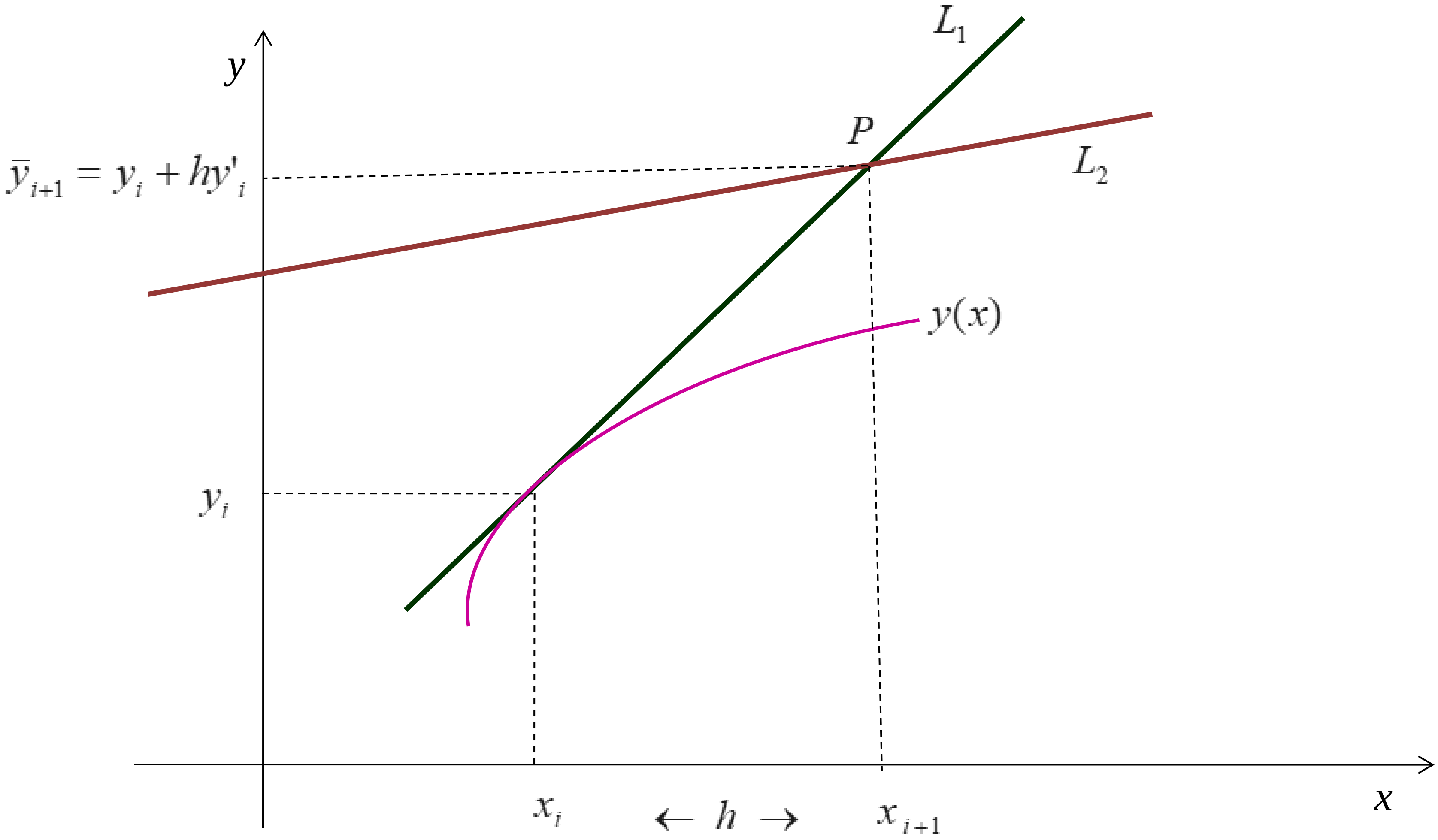
Seja

$$\boxed{P \equiv (x_i + h, y_i + hy'_i) = (x_{i+1}, \bar{y}_{i+1}).}$$

Por P agora, traçamos a reta L_2, com coeficiente angular dado por:

$$\boxed{f(x_i + h, y_i + hy'_i) = f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1}).}$$

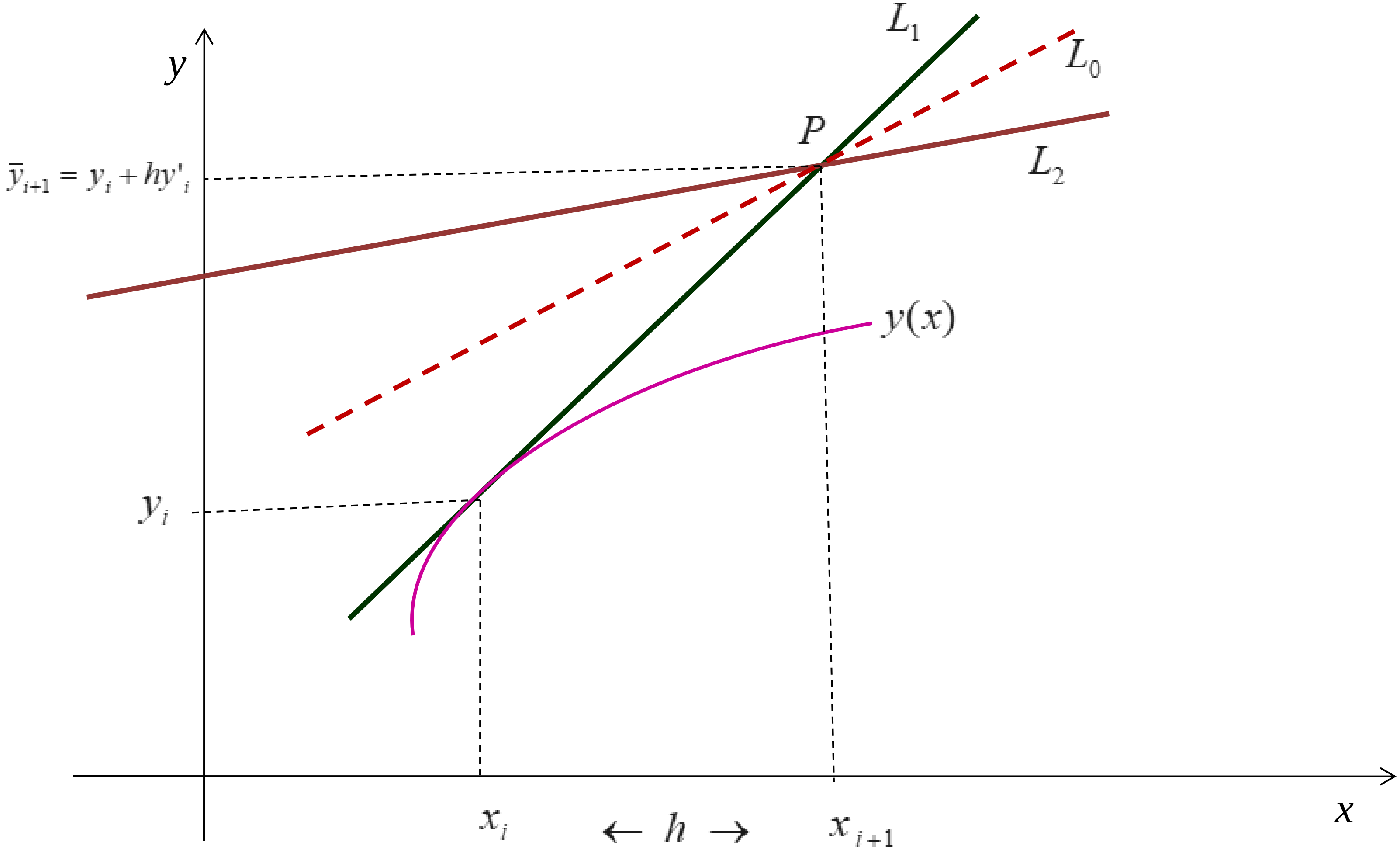
$$\boxed{L_2 : z_2(x) = y_i + hy'_i + [x - (x_i + h)]f(x_i + h, y_i + hy'_i)}$$



L_1
y
P
$\bar{y}_{i+1} = y_i + hy'_i$
L_2
$y(x)$
y_i
x
x_i
$\leftarrow\ h\ \rightarrow$
x_{i+1}

A reta pontilhada L_0 passa por P e tem inclinação dada pela média aritmética das inclinações das retas L_1 e L_2, ou seja, sua inclinação é:

$$\boxed{\frac{f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hy'_i)}{2}}$$



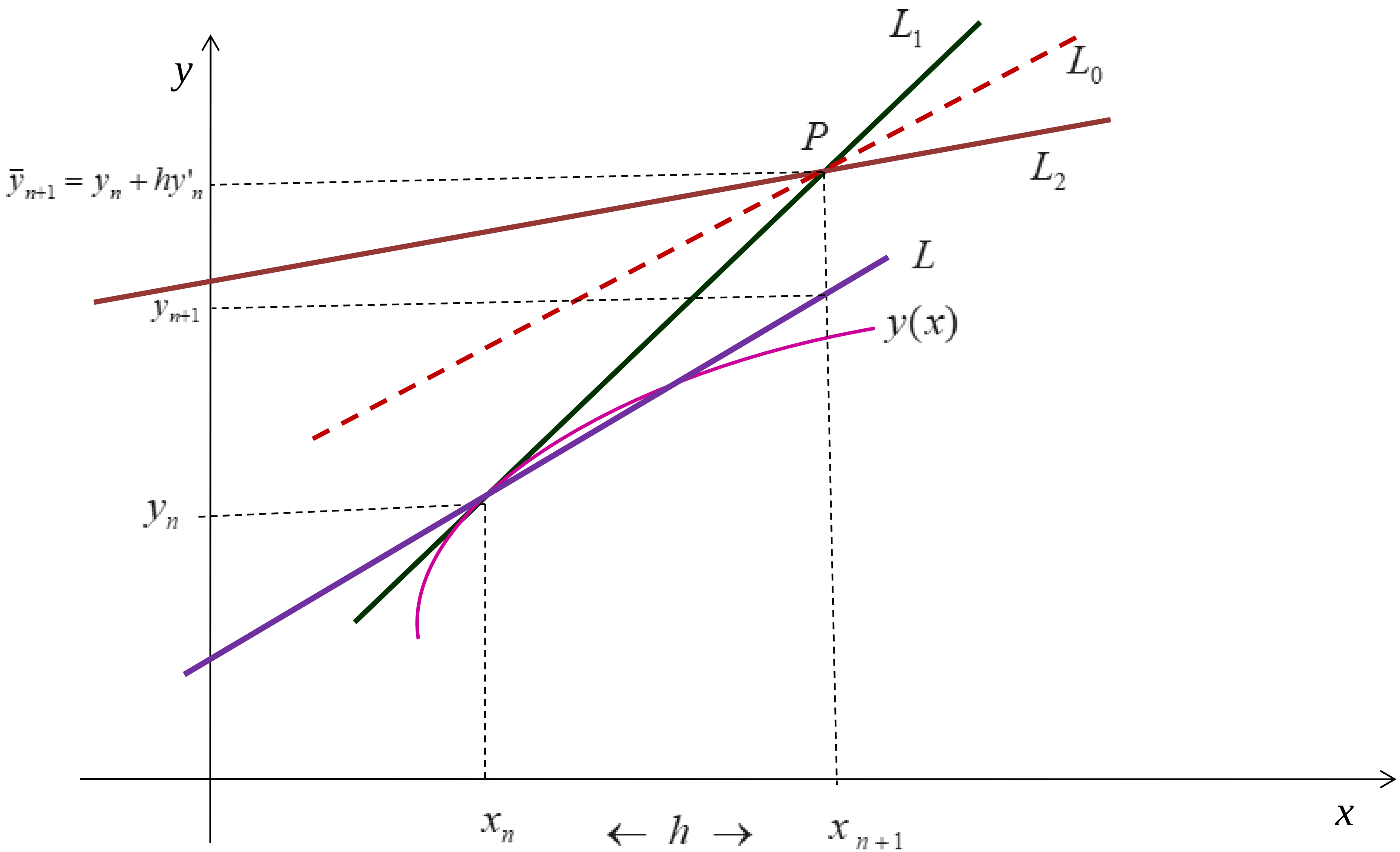
L_1
L_0
L_2
P
y
$\bar{y}_{i+1} = y_i + hy'_i$
$y(x)$
y_i
x_i
$\leftarrow h \rightarrow$
x_{i+1}
x

A reta pontilhada L_0 passa por P e tem por inclinação a média das inclinações das retas L_1 e L_2, ou seja, sua inclinação é:

$$\boxed{\frac{f(x_i\,,y_i\,)+f(x_i+h,y_i+hy'_i\,)}{2}}$$

A reta L passa por (x_i, y_i) e é paralela à reta L_0, donde:

$$\boxed{L : z(x)=y_i+(x-x_i\,)\frac{f(x_i\,,y_i\,)+f(x_i+h,y_i+hy'_i\,)}{2}}$$



L_1
L_0
P
L_2
$\bar{y}_{n+1} = y_n + hy'_n$
L
y_{n+1}
$y(x)$
y
y_n
x_n
$\leftarrow h \rightarrow$
x_{n+1}
x

O valor fornecido para y_{i+1} pelo método de Euler Aperfeiçoado é:

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hf(x_i, y_i))],\ i = 0,1,2,\ldots\ .}$$

FORMA GERAL DOS MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA DE 2ª ORDEM

O método de Euler Aperfeiçoado é um método de Runge-Kutta de 2ª ordem e podemos pensar que ele pertence a uma classe mais geral de métodos do tipo:

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + ha_1 f(x_i, y_i) + ha_2 f(x_i + b_1 h, y_i + b_2 hf(x_i, y_i))}$$

Para o método de Euler Aperfeiçoado,

$$a_1 = \tfrac{1}{2} \quad b_1 = 1$$

$$a_2 = \tfrac{1}{2} \quad b_2 = 1$$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)\ , \ \text{onde}: \\ k_1 &= f(x_n, y_n)\ , \\ k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1)\ , \end{aligned}$$

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

$f(x_k, y_k) = y_k$

USANDO EULER MELHORADO OU RUNGE KUTTA 2ª ORDEM

$y(0{,}04) = ?$

$h = 0{,}02$

$x_0 = 0 \quad y_0 = 1$

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)\ , \text{ onde :} \\ k_1 &= f(x_n, y_n)\ , \\ k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1)\ , \end{aligned}$$

$x_0 + h = 0{,}02$

$y_1 \Rightarrow \quad k_1 = 1$

$k_2 = f(0{,}02 ; 1{,}02) = 1{,}02$

$y_1 = 1 + \frac{0{,}02}{2}(1 + 1{,}02) = 1{,}0202$

$x_1 = 0{,}02 \quad y_1 = 1{,}0202$

$y_2 \Rightarrow \quad k_1 = 1{,}0202$

$k_2 = 1{,}0202 + 0{,}02(1{,}0202) = 1{,}0406$

$y_2 = 1{,}0202 + \frac{0{,}02}{2}(1{,}0202 + 1{,}0406) = 1{,}040808 \approx y(0{,}04)$

$x_2 = 0{,}04 \quad y_2 = 1{,}0408$

$y(x) = e^x \Rightarrow e^{0{,}04} = 1{,}040811$

$$\boxed{\varepsilon_A = 3 \times 10^{-6}}$$

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA DE ORDENS SUPERIORES

De forma análoga, pode-se construir métodos de 3ª ordem, 4ª ordem, etc. A seguir serão fornecidas apenas fórmulas para métodos de Runge-Kutta de 3ª e 4ª ordem:

3ª ordem

$$y_{i+1} = y_i + \frac{2}{9}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{4}{9}k_3$$ onde

$$k_1 = hf(x_i, y_i)$$

$$k_2 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2})$$

$$k_3 = hf(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}k_2)$$

4ª ordem

$$x_{n+1} = x_n + h$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$

$$k_3 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

OBSERVAÇÃO:

- Os métodos de Runge-Kutta, apesar de serem auto-iniciáveis (pois são de passo um) e não trabalharem com derivadas de $f(x,y)$, apresentam a desvantagem de não haver para eles uma estimativa simples para o erro, o que inclusive poderia ajudar na escolha do passo h.

- Existem ainda adaptações dos métodos de Runge-Kutta que são simples operacionalmente e que são usadas também para estimativas de erro e controle do tamanho do passo h.