Métodos Computacionais da Física B

Aluno: Bruno Castanho - Matrícula: 00314684
IF-UFRGS

25 de março de 2021

1 Apresentação do problema

A curva de Gompertz, ou Lei de Gompertz, assim nomeada em homenagem a seu postulador Benjamin Gompertz, é um modelo matemático que descreve uma série temporal cujo crescimento é lento em seu início e em seu final, ao longo de um determinado período de tempo.

Na medicina, a função é frequentemente utilizada para modelar o crescimento de tumores, considerando que o número de células neste seja proporcional a seu volume V no instante t. Considera-se também, que quanto maior for este tumor, menor é sua taxa de crescimento, já que as células em seu interior têm menos acesso a oxigênio e nutrientes.

Este trabalho tem como objetivo descrever o crescimento de um tumor que obedece a este modelo, através de métodos para resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDOs).

2 Solução analítica

Dada a EDO que descreve o modelo de Gompertz,

$$\frac{dV}{dt} = V \cdot ae^{-bt}$$

sendo a e b constantes positivas obtidas experimentalmente, pode-se obter sua integral analiticamente através de separação de variáveis, como segue:

$$\frac{dV}{V} = ae^{-bt}dt$$

integrando ambos os lados da equação,

$$\int \frac{dV}{V} = \int ae^{-bt} dt \rightarrow \ln |V| = -\frac{ae^{-bt}}{b} + C$$

e tomando ambos os lados da equação como potências da constante e, obtemos:

$$V(t) = e^{-\frac{ae^{-bt}}{b} + C} \tag{1}$$

Adotando a condição inicial $V(0)$ e substituindo na função acima, obtém-se o valor da constante C:

$$C = \frac{a}{b} + \ln(V(0))$$

Substituindo este resultado mais uma vez em (1),

$$V(t) = e^{-\frac{ae^{-bt}+a}{b} + \ln(V(0))}$$

$$V(t) = e^{a(-e^{-bt}+1)/b} \cdot e^{\ln(V(0))}$$

$$V(t) = V(0) \cdot e^{a(-e^{-bt}+1)/b} \tag{2}$$

A solução analítica da EDO, (2), será útil para fins de comparação dos métodos de integração numérica utilizados, descritos a seguir.

3 Métodos

3.1 Euler explícito

O método de Euler explícito trata-se de um dos métodos mais básicos para resolução de problemas de valor inicial envolvendo sistemas de EDOs. Segue:

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n, x_n) \cdot h + O(h^2)$$

Onde $f(t_n, x_n)$ é a derivada da função $f(t)$, ou seja, a declividade da reta tangente à $x(t)$ no ponto avaliado, num passo h. Trata-se de um método de acurácia de primeira ordem.

3.2 Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta constituem uma importante família de métodos implícitos e explícitos para a resolução de problemas de valor inicial (PVIs). Dentre estes, destacam-se aqueles denominados Runge-Kutta 2 (RK2) e Runge-Kutta 4 (RK4).

3.2.1 Runge-Kutta 2

Ao contrário do método de Euler, o método Runge-Kutta 2 possui acurácia de ordem 2. Isto é alcançado utilizando-se da derivada inicial em cada ponto para encontrar um ponto médio ao longo do intervalo, e então, usando a derivada do ponto médio ao longo de todo o comprimento deste intervalo. O processo é ilustrado abaixo:

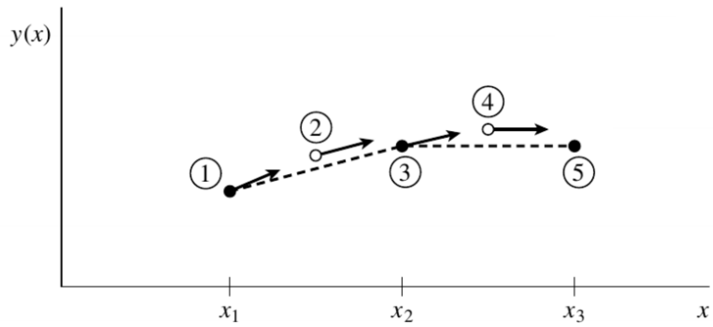


Imagem extraída de [2]

Existem três métodos utilizados para a implementação do RK2. Neste caso, foi utilizado o método de Heun, que segue:

$$x_{n+1} = x_n + \left(\frac{k_1 + k_2}{2} \right) \cdot h$$

onde

$$k_1 = f(t_n, x_n)$$

$$k_2 = f(t_n + h, x_n + k_1 \cdot h)$$

e $f(t_n, x_n)$ é a declividade da reta no ponto sob análise.

3.2.2 Runge-Kutta 4

Este método utiliza as cinco primeiras parcelas da expansão de $x(t + h)$. Assim sendo, possui uma acurácia de quarta ordem - $O(h^5)$. Em cada passo, a derivada é avaliada quatro vezes: uma no ponto inicial, duas em pontos intermediários arbitrários, e uma no ponto final. A partir destas derivadas, o valor final da função é calculado.

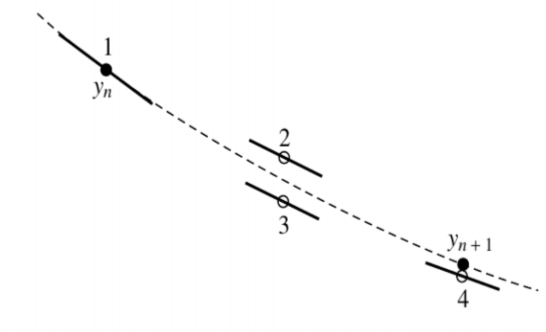


Imagem extraída de [2]

Nesta implementação, foi utilizada a expressão proposta por M. W. Kutta:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4) \cdot h$$

onde

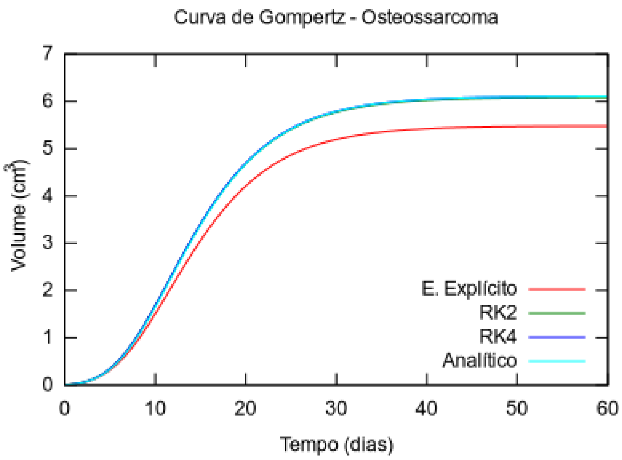
$$k_1 = (t_n, x_n)$$
$$k_2 = (t_n + \frac{1}{3}h, x_n + \frac{1}{3}k_1 \cdot h)$$
$$k_3 = (t_n + \frac{2}{3}h, x_n - \frac{1}{3}k_1 \cdot h + k_2 \cdot h)$$
$$k_4 = (t_n + h, x_n + k_1 \cdot h - k_2 \cdot h + k_3 \cdot h)$$

e $f(t_n, x_n)$ corresponde à declividade da reta tangente ao ponto.

4 Resultados

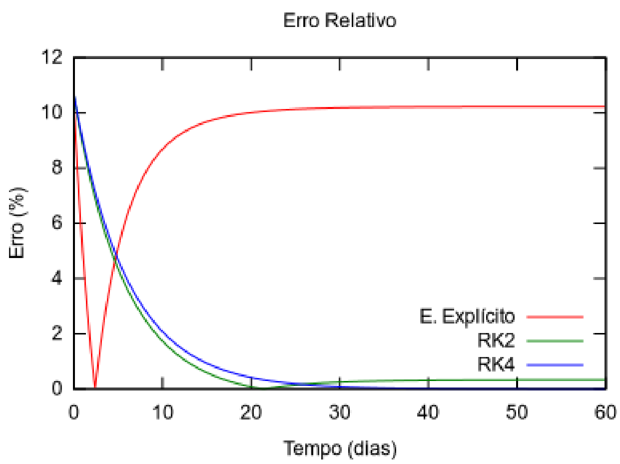
Para obtenção dos seguintes resultados, foram adotados $a = 1.020$, $b = 0.159$ e um volume inicial $V(0)$ de $0.01cm^3$. Os dados, referentes aos valores experimentais dos osteossarcomas, foram extraídos de [1], P.494, Tabela I.

4.1 Comparação dos métodos



Como ilustrado acima, ambos os métodos RK têm suas acurácias comprovadas, dadas suas proximidades com a curva descrita pela solução analítica - com RK4 obtendo uma leve vantagem. Da mesma forma, podemos comprovar a baixa acurácia do método explícito de Euler, dada sua distância para a curva da solução analítica.

4.2 Erros relativos



O gráfico de erros relativos permite que tenhamos uma visão mais clara acerca da imprecisão de alguns métodos. O método explícito de Euler apresenta um erro de mais de 10%, enquanto RK2 revela uma pequena imprecisão de menos de 0.5% em relação à curva analítica. Por outro lado, RK4 apresenta um erro muito próximo de zero para valores mais altos de t.

Referências

[1] Laird, A. *Dynamics of Tumor Growth*. Br J Cancer 18, 490–502 (1964) https://doi.org/10.1038/bjc.1964.55

[2] Press, W.; Teulkolsky, S.; Vetterling, W.; Flannery, B. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press (2007).