Problema de Valor Inicial

Introdução aos Métodos Discretos

Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Computacional

Prof. Ruy Freitas Reis - ruy.reis@ufjf.br
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional
Universidade Federal de Juiz de Fora

Conteúdo

Conteúdo

Introdução

- Equações diferenciais ordinárias (EDOs) são extremamente importantes pelo fato de muitos problemas na ciência e tecnologia recaem nestes tipos de equações
- Em cursos matemática aprendemos como determinar a solução deste tipo de problema para determinadas situações/condições.
- Entretanto, em muitas situações práticas e aplicadas, métodos numéricos são necessários pois não é possível determinar soluções de forma analítica (ou exata) ou ainda são muito difíceis de serem encontradas.
- Para introduzir o assunto, vamos começar com um exemplo que descreve o crescimento de uma população.

Introdução

Exemplo

- Sabemos que em condições normais (sob certas hipóteses), o número de indivíduos de uma população cresce a uma taxa proporcional ao atual número de indivíduos.
- Sabendo que após 2 anos o número de indivíduos da população dobra, e que após 3 anos é de 20000 indivíduos, qual é o número de indivíduos dessa localidade?

Solução

Seja t a variável tempo, $N = N(t)$ o número de indivíduos no instante t e $N_0 = N(t_0)$ o número de indivíduos no instante t_0.

Como a taxa de variação da população é proporcional ao número de indivíduos, temos

$$\frac{dN}{dt} = kN$$

Introdução

Solução

A **solução analítica** é dada por

$$N(t) = ce^{kt}$$

que podemos verificar (derivando) que satisfaz a equação

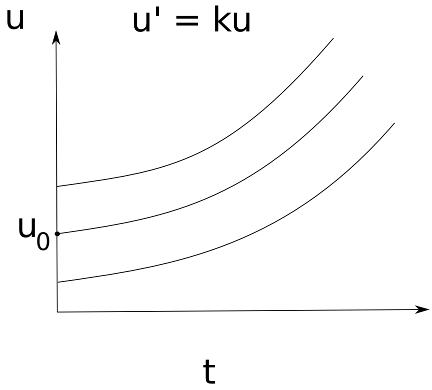
$$\frac{dN}{dt} = kce^{kt} = kN$$

Observe que para toda constante $c \in \mathbb{R}$, $N(t)$ é uma solução equação diferencial. Isto é, existe uma família de infinitas funções $N(t)$ que satisfazem à equação diferencial.

Para determinar uma solução única é preciso especificar um valor inicial N_0 da função solução em um instante de tempo t_0.

Introdução

Solução



No exemplo em $t_0 = 0$ temos que $N(0) = N_0$. Assim

$$N(t=0) = ce^{k0} = N_0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{c = N_0}$$

Introdução

Solução

Logo

$$N(t) = N_0 e^{kt}$$

Podemos calcular k pois para $t = 2$ temos que $N(t = 2) = 2N_0$, logo

$$N(2) = N_0 e^{2k} = 2N_0$$
$$\rightarrow \ln\left(e^{2k}\right) = \ln(2) \quad \Rightarrow \quad \boxed{k = 0.3466}$$

Podemos ainda determinar o número inicial de indivíduos da população, pois para $t = 3$ sabemos que $N = 20000$, assim

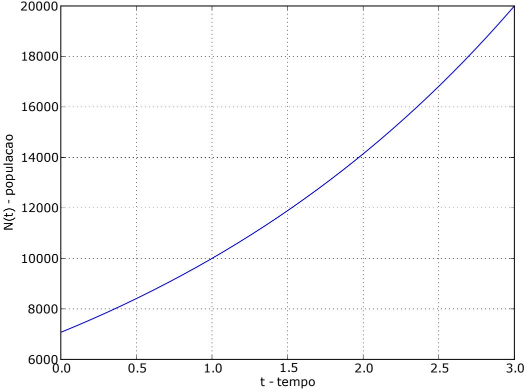
$$N(3) = N_0 e^{3(0.3466)} = 20000$$
$$N_0 = \frac{20000}{e^{3(0.3466)}} = 7070$$

Introdução

Solução

E finalmente como $k = 0.3466$ e $N_0 = 7070$, temos que a solução deste problema com os dados fornecidos é

$$N(t) = 7070e^{0.3466t} \tag{1}$$



Introdução

Na maioria das vezes não temos uma solução analítica tipo a encontrada na anteriormente, e a única forma é recorrer a métodos numéricos para obtermos uma solução aproximada.

Definição (EDO de Ordem)

Uma equação diferencial ordinária (EDO) de ordem m é uma equação na forma

$$F(t, u(t), u'(t), u''(t), \ldots, u^{(m)}(t)) = 0$$

onde temos uma função F que involve a variável independente t, a função incógnita $u = u(t)$ e suas derivadas até ordem m.

Exemplos

- $u' = \frac{du}{dt} = 3t - 1$ (ordem 1)
- $e^u \frac{d^2u}{dt^2} + 2\left(\frac{du}{dt}\right)^2 = 1$ (ordem 2)
- $u' + 3u'' + 6u = \sin(t)$ (ordem 2)

Introdução

Definição (Problema de Valor Inicial)

Um problema de valor inicial (PVI) pode ser escrito da seguinte forma: dada uma função $f(t,u)$, encontrar a função $u(t)$ para $t \in [t_0, t_f]$ tal que

$$\frac{du}{dt} = f(t,u) \quad \textit{com a } \textbf{condição inicial} \quad u(t_0) = u_0$$

O Teorema que garante a existência e unicidade de soluções para este tipo de problema não será apresentado aqui, o qual pode ser encontrado em referências básicas sobre EDOs.

- "Cálculo Numérico", Neide Bertoldi Franco
- "Elementary Differential Equations", Boyce & DiPrima

Conteúdo

1 Introdução
2 Discretização
3 Métodos de Euler
Explícito
Implícito
4 Métodos de Runge-Kutta
Introdução
Método de Euler
Método de Heun
Método do Ponto Médio
Runge-Kutta Clássico
5 Estabilidade
6 Sistemas de EDOs
7 EDOs de Alta Ordem

Discretização

Resolver um PVI numericamente consiste em calcular aproximações para a função $u = u(t)$ em um conjunto de pontos discretos $t_0, t_1, \ldots, t_N$ de um intervalo $[a, b]$.

Para discretizar o intervalo $[a, b]$, tomamos N subintervalos $(N \geq 1)$ e fazemos

$$t_i = t_0 + ih, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, N$$

onde

$$t_0 = a, \quad t_f = b, \quad h = \frac{t_f - t_0}{N}$$

Em geral chamamos h de passo ou simplesmente passo de tempo. Em outras referências costuma aparecer como Δt ou h_t.

Discretização

Sendo assim, calculamos aproximações para $u(t)$ nestes pontos, isto é, determinamos

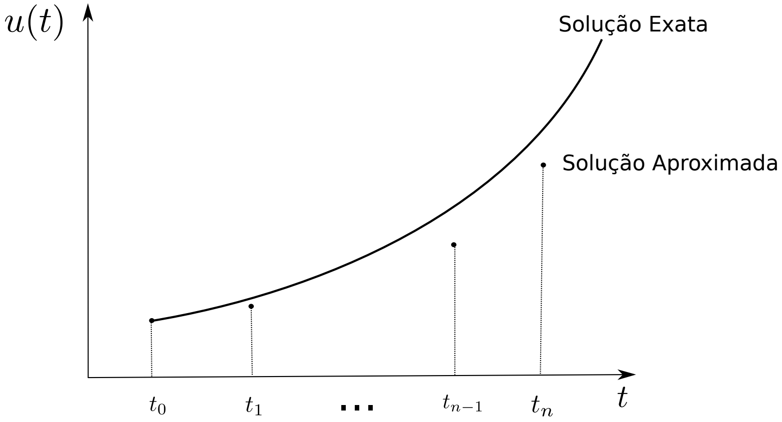
$$u_n \text{ tal que } u_n \approx u(t_n), \quad n = 0, 1, \ldots, N$$

Notação:

- $u(t_n)$ denota a avaliação da solução exata $u(t)$ no ponto $t = t_n$
- u_n denota a aproximação obtida no passo de tempo t_n para o valor da solução $u(t_n)$

Assim, a partir do valor inicial dado u_0, calculamos a cada passo, nos pontos $t_1 = t_0 + h$, $t_2 = t_0 + 2h$, ..., aproximações u_n para a solução $u(t_n)$.

Discretização



Conteúdo

Conteúdo

Método de Euler Explícito

- Vamos agora estudar alguns métodos para solução aproximada de problemas de valor inicial. Iremos começar pelo Método de Euler explícito, o qual é dado por

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u(t_n))$$

para $n = 0, 1, \ldots, N$.

- Existem diversas formas de se deduzir essa expressão do método de Euler. Para começar iremos apresentar a versão que pode ser deduzida a partir da série de Taylor.
- Lembrando que a expansão em série de Taylor de uma função $f(x)$ em torno do ponto $x = a$ é dada por

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + f''(a)\frac{(x-a)^2}{2} + \ldots + f^{(n)}(a)\frac{(x-a)^n}{n!} + \ldots$$

Método de Euler Explícito

Escrevendo a solução do problema $u(t)$ usando série de Taylor em torno do ponto t_n temos

$$u(t) = u(t_n) + u'(t_n)(t - t_n) + u''(t_n)\frac{(t-t_n)^2}{2} + \dots$$

avaliando em t_{n+1} resulta

$$u(t_{n+1}) = u(t_n) + u'(t_n)(t_{n+1} - t_n) + u''(t_n)\frac{(t_{n+1}-t_n)^2}{2} + \dots$$

desprezando os termos depois da segunda derivada e considerando que $h = t_{n+1} - t_n$ e que $u' = f(t, u)$, temos

$$u(t_{n+1}) \approx u(t_n) + hf'(t_n, u(t_n))$$

de onde obtemos o **método de Euler explícito** como

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n) \tag{2}$$

Método de Euler Explícito

Podemos fazer algumas observações:

- Dizemos que o método de Euler é explícito pois para calcular u_{n+1} só dependemos de valores passados da solução, que conhecidos podemos simplesmente calcular o valor aproximado da solução no próximo passo. Ou seja, não é preciso resolver uma equação para encontrar u_{n+1}.
- O método é de 1-passo pois só envolve o valor da solução de 1 passo anterior u_n.
- Existem métodos que para calcular u_{n+1} precisamos de u_n e u_{n-1}, entre outros.
- Em algumas situações o método de Euler pode ter problemas. *Na prática outros métodos mais robustos são utilizados de forma a evitar determinados problemas durante a solução.*

Método de Euler Explícito

Exemplo

Resolver o PVI abaixo utilizando o método de Euler explícito no intervalo $[0, 0.3]$ com $h = 0.1$.

$$u'(t) = -u + t + 2$$
$$u(0) = 2$$

Solução do Exemplo

Tomando $n = 0$ na Eq. (2), temos

$$u_1 = u_0 + hf(t_0, u_0) = 2 + 0.1(-2 + 0 + 2) = 2$$

Para $n = 1$, $t_1 = 0.1$

$$u_2 = u_1 + hf(t_1, u_1) = 2 + 0.1(-2 + 0.1 + 2) = 2.01$$

Método de Euler Explícito

Solução do Exemplo

Para $n = 2,\ t_2 = 0.2$

$$u_3 = u_2 + hf(t_2, u_2) = 2 + 0.1(-2.01 + 0.2 + 2) = 2.019$$

Assim

t_n	$u(t_n)$	u_n
0.0	2.0	2.0
0.1	2.00484	2.0
0.2	2.01873	2.01
0.3	2.04082	2.019

Método de Euler Explícito

Exemplo

Resolver o PVI dado por

$$u'(t) = u - t$$
$$u(0) = 2$$

para $t \in [0, 1]$ com $N = 4$.

Solução do Exemplo

$$h = \frac{1-0}{4} = 0.25$$

Assim temos

$$t_0 = 0, \quad t_1 = 0.25, \quad t_2 = 0.5, \quad t_3 = 0.75, \quad t_4 = 1.0$$

Método de Euler Explícito

Solução do Exemplo

Para $n = 0$

$$u_1 = u_0 + hf(t_0, u_0) = u_0 + h(u_0 - t_0) = 2 + 0.25(2 - 0) = 2.5$$

Para $n = 1$

$$u_2 = u_1 + hf(t_1, u_1) = 2.5 + 0.25(2.5 - 0.25) = 3.0625$$

Para $n = 2$

$$u_3 = u_2 + hf(t_2, u_2) = 3.0625 + 0.25(3.0625 - 0.5) = 3.7031$$

Para $n = 3$

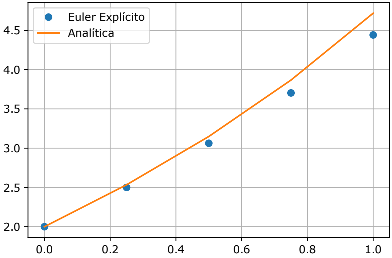
$$u_4 = u_3 + hf(t_3, u_3) = 3.7031 + 0.25(3.7031 - 0.75) = 4.4414$$

Método de Euler Explícito

Solução do Exemplo

Nesse caso a solução exata é dada por $u(t) = e^t + t + 1$.

n	t_i	$u(t_i)$	u_i	erro
0	0.0	2	2	0.0
1	0.25	2.5340	2.5	0.0340
2	0.5	3.1487	3.0625	0.0862
3	0.75	3.8670	2.7031	0.1639
4	1.0	4.7183	4.4414	0.2769



Método de Euler Explícito

Pseudocódigo

Algoritmo 1: Método de Euler Explícito

entrada: função $f = f(t, u)$
condição inicial $u(t_0) = u_0$
intervalo $[t_0, t_f]$
número de passos N

saída: solução aproximada u_i, $i = 0, 1, ..., N$

$h = (t_f - t_0)/N$;
$t[0] = t_0$;
$u[0] = u_0$;
para n *de* 0 *até* $N - 1$ **faça**
    t[n+1] = t[n] + h;
    u[n+1] = u[n] + h * f(t[n], u[n]);
fim

Método de Euler Explícito

Python

```python
import numpy as np
def forward_euler(f, u0, tspan, n):
  '''
  f      => funcao
  u0     => condicao inicial
  tspan  => intervalo [t0,tf]
  n      => numero de passos
  '''
  h = (tspan[1]-tspan[0])/(n)
  u = np.zeros(n+1)
  t = np.zeros(n+1)

  u[0]  = u0
  t[0]  = tspan[0]

  for i in range(n):
    t[i+1] = t[i] + h
    u[i+1] = u[i] + h*f(t[i], u[i])

  return t, u
```

Conteúdo

Método de Euler Implícito

Vamos apresentar agora um outro método conhecido como método de Euler implícito. Para isso recorremos novamente à série de Taylor. Escrevendo $u(t)$ em série de Taylor em torno de t_{n+1}, temos

$$u(t) = u(t_{n+1}) + (t - t_{n+1})u'(t_{n+1})$$

Avaliando em $t = t_n$ e substituindo $u' = f$ chegamos a

$$u(t_n) = u(t_{n+1}) + \underbrace{(t_n - t_{n+1})}_{=-h} f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))$$

de onde obtemos o método

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_{n+1}, u_{n+1})$$

que é conhecido como **método de Euler implícito**.

Método de Euler Implícito

Vamos apresentar agora um outro método conhecido como método de Euler implícito. Para isso recorremos novamente à série de Taylor. Escrevendo $u(t)$ em série de Taylor em torno de t_{n+1}, temos

$$u(t) = u(t_{n+1}) + (t - t_{n+1})u'(t_{n+1})$$

Avaliando em $t = t_n$ e substituindo $u' = f$ chegamos a

$$u(t_n) = u(t_{n+1}) + \underbrace{(t_n - t_{n+1})}_{=-h} f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))$$

de onde obtemos o método

$$\color{red}{u_{n+1}} = u_n + hf(t_{n+1}, \color{red}{u_{n+1}})$$

que é conhecido como **método de Euler implícito**.

Método de Euler Implícito

Algumas observações:

- Este método é chamado de implícito pois para o cálculo de u_{n+1} também depende da solução no passo u_{n+1} através de $f(t_{n+1}, u_{n+1})$
- Se a função $f(t, u(t))$ for linear, calcular u_{n+1} é fácil
  - Por exemplo: $f = qu$
- Por outro lado se a função $f(t, u(t))$ for **não linear**, como ocorre na maioria das aplicações, então uma equação não linear terá que ser resolvida a cada passo do método. Alguns métodos mais utilizados são:
  - Método do Ponto Fixo
  - Método de Newton

Método de Euler Implícito

Exemplo

Resolver o PVI dado por

$$u'(t) = u - t$$
$$u(0) = 2$$

para $t \in [0, 1]$ com $N = 4$.

Solução do Exemplo

$$h = \frac{1-0}{4} = 0.25$$

Assim temos

$$t_0 = 0, \quad t_1 = 0.25, \quad t_2 = 0.5, \quad t_3 = 0.75, \quad t_4 = 1.0$$

Método de Euler Implícito

Solução do Exemplo

Para $n = 0$

$$u_1 = u_0 + hf(t_1, u_1) = 2 + 0.25(u_1 - 0.25) = 2.5833$$

Para $n = 1$

$$u_2 = u_1 + hf(t_2, u_2) = 2.5833 + 0.25(u_2 - 0.5) = 3.2777$$

Para $n = 2$

$$u_3 = u_2 + hf(t_3, u_3) = 3.2777 + 0.25(u_3 - 0.75) = 4.1203$$

Para $n = 3$

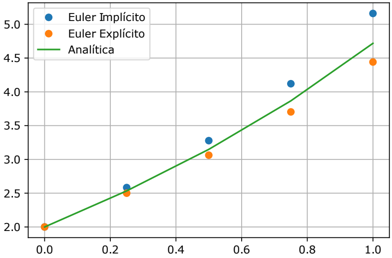
$$u_4 = u_3 + hf(t_4, u_4) = 4.1203 + 0.25(u_4 - 1) = 5.1604$$

Método de Euler Implícito

Solução do Exemplo

Nesse caso a solução exata é dada por $u(t) = e^t + t + 1$.

n	t_i	$u(t_i)$	u_i	erro
0	0.0	2	2	0.0
1	0.25	2.5340	2.5833	0.04930
2	0.5	3.1487	3.2777	0.1290
3	0.75	3.8670	4.1203	0.2533
4	1.0	4.7183	5.1604	0.4421



Euler Implícito

Python

Agora vamos ao método de Euler $f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_{i+1})$

```
from scipy.optimize import fsolve
import numpy as np
def backward_euler ( f, u0, tspan, n ):
  '''
  f => funcao
  u0 => condicao inicial
  tspan => intervalo [t0,tf]
  n => numero de passos
  '''
  t = np.zeros (n+1)
  u = np.zeros (n+1)
  h = ( tspan[1] - tspan[0] ) / float ( n )
  t[0] = tspan[0];
  u[0] = u0
  for i in range(n):
    to = t[i]
    uo = u[i]
    tp = t[i] + h
    up = uo + h * f ( to, uo )
    up = fsolve ( backward_euler_residual, up, args = ( f, to, uo, tp ) )
    t[i+1]   = tp
    u[i+1] = up
  return t, u
```

Euler Implícito

Python

```python
def backward_euler_residual( up, f, to, uo, tp ):
  '''
  Estamos procurando o valor de U) definida pela seguinte equacao implicita
    UP = U0 + ( TP - T0 ) * F ( TP, UP )

  up => solucao estimada no novo passo
  f => funcao
  to => passo de tempo anterior
  u0 => solucao no passo de tempo anterior
  tp => novo passo de tempo.
  '''
  value = up - uo - ( tp - to ) * f ( tp, up );

  return value
```

Conteúdo

Conteúdo

Outros métodos

Vejamos agora uma outra forma de se derivar o método de Euler e outros métodos.

$$u'(t) = f(t, u)$$

Integrando a expressão anterior de t_n a t_{n+1}, temos

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} u'(t)\, dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, u)\, dt$$

Pelo TFC temos

$$u_{t_{n+1}} - u_{t_n} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, u)\, dt$$

$$u_{t_{n+1}} = u_{t_n} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, u)\, dt \tag{3}$$

Outros métodos

Aproximando a integral da equação anterior com a regra do retângulo ($I = hf(a)$) obtemos o método de Euler

$$u_{t_{n+1}} = u_{t_n} + hf(t_n, u_n)$$

Assim vemos claramente que diferentes formas de aproximar a integral em (3) resultam em diferentes métodos numéricos para solução de problemas de valor inicial.

Podemos aproximar a integral involvendo $f(t, u)$ pela regra do trapézio, e assim obtemos

$$u_{t_{n+1}} = u_{t_n} + \frac{h}{2}[f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_{n+1})]$$

que é conhecido como método do trapézio e se trata de um método implícito, como podemos ver pela presença de u_{n+1} do lado direito.

Método de Runge-Kutta

- Dado um PVI da forma $y'(t) = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0$, podemos integrar a EDO entre t_n e t_{n+1}

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t)dt = y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t))dt,$$

resultando em

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t))dt,$$

- Esta equação é exata, porém, sem conhecer $y(t)$ não há como avaliar a integral acima.
- Diferentes métodos de Runge-Kutta surgirão de diferentes abordagens para aproximar esta integral.

Conteúdo

Método de Runge-Kutta

- Como já introduzido antes, o primeiro método de Runge-Kutta sai de aproximar a integral pela Regra do Retângulo $I = hf(a)$

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n),$$

que é a fórmula do método de Euler explícito.

- Outra opção seria considerar a Regra do Retângulo $I = hf(b)$

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$

resultando na fórmula do método de Euler implícito.

Conteúdo

Método de Heun

- Utilizar métodos implícitos é mais complicado que utilizar métodos explícitos.
- Uma maneira de converter o método de implícito para explícito é computar aproximações intermediárias e empregá-las na fórmula de iteração.
- Por exemplo, o método de Euler implícito poderia ser adaptado da seguinte forma

$$\bar{y} = y_n + hf(t_n, y_n),$$
$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, \bar{y}).$$

- Neste caso, uma aproximação $\bar{y}$ para y_{n+1} é computada usando o método de Euler explícito e depois empregada para substituir y_{n+1} na fórmula de iteração do método de Euler implícito, tornando-o assim um método explícito.

Método de Heun

- Para conseguir um método melhor, a integral deve ser melhor aproximada.
- Poderíamos usar a Regra do Trapézio:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})]$$

- Novamente, este é um método implícito. Sua versão explícita, conhecida como método de Heun, pode ser obtida da mesma forma

$$\begin{aligned} \bar{y} &= y_n + hf(t_n, y_n), \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \bar{y})] \end{aligned}$$

Introdução
Discretização
Métodos de Euler
Explícito
Implícito
Métodos de Runge-Kutta
Introdução
Método de Euler
Método de Heun
Método do Ponto Médio
Runge-Kutta Clássico
Estabilidade
Sistemas de EDOs
EDOs de Alta Ordem

Conteúdo

Método do Ponto Médio

- Um exemplo de método de Runge-Kutta de segunda ordem é o método do ponto médio, obtido quando a integral é aproximada pela área de um retângulo cuja altura é o valor de f no ponto médio do intervalo $[t_n, t_{n+1}]$

$$\bar{y} = y_n + \frac{h}{2} f(t_n, y_n),$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n + \frac{h}{2}, \bar{y})$$

- Perceba $\bar{y}$ foi obtido com o método de Euler, usando um passo de metade de h. Desta forma, $\bar{y}$ é uma aproximação para y em $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{h}{2}$.

Conteúdo

Método de Runge-Kutta

- É possível construir métodos de Runge-Kutta de ordens superiores. Como exemplo, um método de Runge-Kutta de quarta ordem

$$
\begin{aligned}
Y_1 &= y_n, \\
Y_2 &= y_n + \frac{h}{2} f(t_n, Y_1), \\
Y_3 &= y_n + \frac{h}{2} f(t_{n+\frac{1}{2}}, Y_2), \\
Y_4 &= y_n + h f(t_{n+\frac{1}{2}}, Y_3),
\end{aligned}
$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}[f(t_n, Y_1) + 2f(t_{n+\frac{1}{2}}, Y_2) + 2f(t_{n+\frac{1}{2}}, Y_3) + f(t_n, Y_4)].$$

Conteúdo

Estabilidade

Como vimos no exemplo anterior, em muitos casos durante a solução numérica de EDOs, podemos observar que alguns algoritmos apresentam soluções com erro muito grande.

Em certos casos a solução diverge, oscila ou cresce indefinidamente.

Esses fenômenos são chamados de instabilidade do método numérico.

Embora existam diversas formas de se analisar a estabilidade dos métodos, veremos aqui apenas uma abordagem.

Estabilidade

Problema Padrão

$$u'(t) = qu(t)$$
$$u(0) = 1$$

onde $q < 0$.

A solução analítica desse problema é dada por: $u(t) = e^{qt}$, e como $q < 0$, observa-se que

$$\lim_{t \to \infty} u(t) = 0.$$

Logo, os métodos numéricos devem atender a essa condição. Vamos analisar o que acontece para o método de Euler explícito e para o método do Trapézio.

Estabilidade

Método de Euler Explícito

Para o método de Euler

$$u_{n+1} = u_n + hf(t_n, u_n)$$

como para o problema padrão $f = qu$, temos que

$$u_{n+1} = u_n + hqu_n$$

e assim

$$\begin{aligned}
u_1 &= u_0 + hqu_0 = (1 + hq)u_0 \\
u_2 &= u_1 + hqu_1 = u_1(1 + hq) = (1 + hq)^2 u_0 \\
&\vdots \\
u_n &= u_{n-1} + hqu_{n-1} = u_{n-1}(1 + hq) = (1 + hq)^n u_0.
\end{aligned}$$

Estabilidade

Método de Euler Explícito

Assim vemos claramente que se $|1 + hq| > 1$, os valores de u_n, que seriam aproximações para $u(t_n)$ começam a crescer indefinidamente, isto é,

$$u_n \to \infty \text{ quando } n \to \infty$$

causando a instabilidade que verificamos no exemplo.

Logo podemos obter uma condição de estabilidade dada por

$$|1 + hq| < 1$$

a qual tem que ser respeitada se quisermos que as aproximações acompanhem a solução exata. Trabalhando na equação iremos obter uma condição que o passo de tempo h deve satisfazer para garantir a estabilidade.

Estabilidade

Exemplo

Para $q = -10$ temos

$$
\begin{aligned}
|1 - 10h| &< 1 \\
-1 < 1 - 10h &< 1 \\
-2 < -10h &< 0 \\
2 > 10h &> 0 \\
0.2 > h &> 0
\end{aligned}
$$

assim concluímos que condição de estabilidade para o método de Euler explícito nesse problema é dada por: $h < 0.2$

Exemplo
Método de Euler

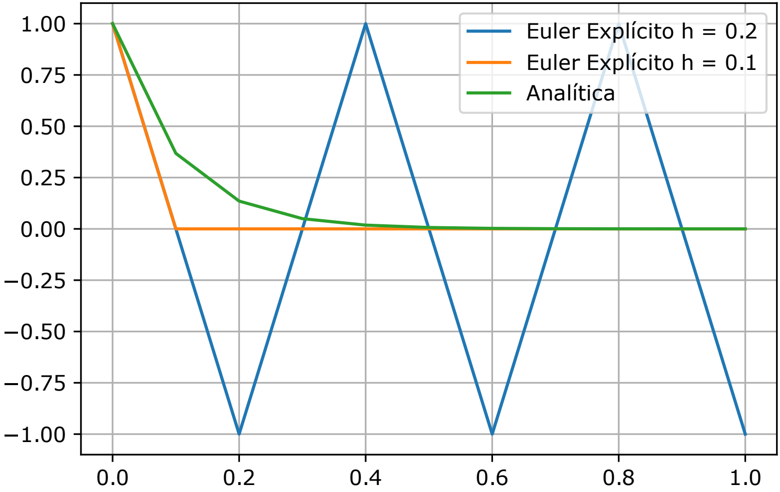
Então tomando

$$\begin{cases} u'(t) & = -10u \\ u(0) & = 1 \end{cases}$$

A solução analítica desse problema é dada por: $u(t) = e^{-10t}$

Exemplo

Método de Euler



Estabilidade

Para o método do Trapézio

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}[f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_{n+1})]$$

como

$$f(t_n, u_n) = qu_n$$
$$f(t_{n+1}, u_{n+1}) = qu_{n+1}$$

temos

$$u_{n+1} = u_n + \frac{hq}{2}u_n + \frac{hq}{2}u_{n+1}$$
$$u_{n+1} - \frac{hq}{2}u_{n+1} = u_n + \frac{hq}{2}u_n$$
$$u_{n+1}\left(1 - \frac{hq}{2}\right) = u_n\left(1 + \frac{hq}{2}\right)$$
$$u_{n+1} = u_n\left(\frac{1 + \frac{hq}{2}}{1 - \frac{hq}{2}}\right)$$

Estabilidade

$$u_{n+1} = \left(\frac{1 + \frac{hq}{2}}{1 - \frac{hq}{2}} \right) u_n$$

Como $u_0 = 1$, temos

$$u_1 = \left(\frac{1 + \frac{hq}{2}}{1 - \frac{hq}{2}} \right) u_0, u_2 = \left(\frac{1 + \frac{hq}{2}}{1 - \frac{hq}{2}} \right)^2 u_0,$$
$$\ldots, \; u_n = \left(\frac{1 + \frac{hq}{2}}{1 - \frac{hq}{2}} \right)^n u_0$$

Como $q < 0$ vemos que o denominador será sempre maior que o numerador para qualquer passo h. Portanto $u_n \to 0$ independentemente da escolha do passo h.

Estabilidade

Exemplo

Para $h = 0.25$ e $q = -10$, temos $hq = -2.5$ e assim

$$u_{n+1} = \frac{1 - 2.5}{1 + 2.5} u_n = \frac{-0.25}{2.25} u_n$$

e então

$$u_{n+1} = \left(\frac{-1}{9} \right)^{n+1} u_0$$

e assim

$$u_0 = 1, \quad u_1 = -0.1111, \quad u_2 = 0.0123, \quad u_3 = -0.0014, \quad \dots$$

ou seja $u_n \to 0$ para $n \to \infty$.

Exemplo

Método do Trapézio

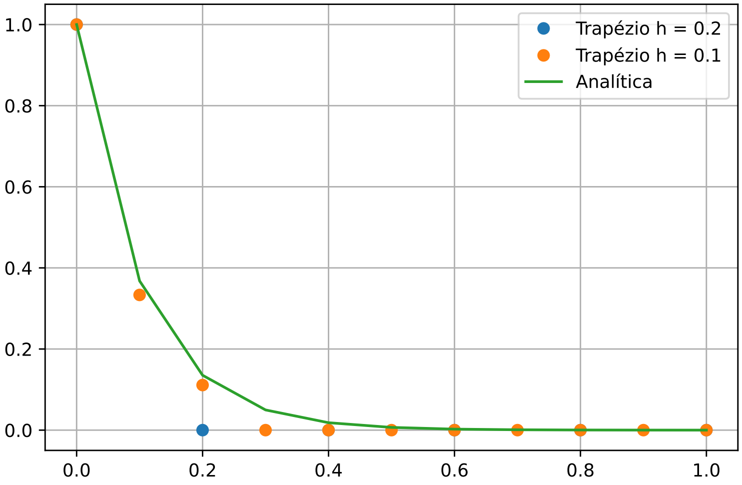
Então tomando

$$\begin{cases} u'(t) & = -10u \\ u(0) & = 1 \end{cases}$$

A solução analítica desse problema é dada por: $u(t) = e^{-10t}$

Exemplo

Método do Trapézio



Conteúdo

Sistemas de EDOs

Podemos ter uma situação com um sistema de m equações de primeira ordem com m funções incógnitas u_1, u_2, ..., u_m, em relação à variável independente t.

Se cada uma dessas funções satisfizer a condição inicial no ponto t_0, temos um PVI para um sistema de EDOs de primeira ordem, isto é

$$\frac{du_1}{dt} = f_1(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$$
$$\frac{du_2}{dt} = f_2(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$$
$$\vdots$$
$$\frac{du_m}{dt} = f_m(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$$

com as seguintes condições iniciais

$$u_1(t_0) = \alpha_1, u_2(t_0) = \alpha_2, \dots, u_m(t_0) = \alpha_m$$

Sistemas de EDOs

Podemos escrever as equações anteriores de forma matricial da seguinte forma

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{t}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_1(t, u_1, \ldots, u_m) \\ f_2(t, u_1, \ldots, u_m) \\ \vdots \\ f_m(t, u_1, \ldots, u_m) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u_0} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{bmatrix}$$

e assim o problema pode ser escrito como

$$\mathbf{u}'(t) = \mathbf{F}(t, \mathbf{u})$$
$$\mathbf{u}(0) = \mathbf{u_0}$$

o que permite aplicar os métodos que iremos estudar para sistemas de EDOs simplesmente aplicando os métodos para cada componentes do vetor **u**.

Sistemas de EDOs

Exemplo

Resolver o seguinte sistema

$$
\begin{aligned}
u'(t) &= f(t,u,v) = u + v + 3t \\
v'(t) &= g(t,u,v) = 2u - v - t \\
u(0) &= 0 \\
v(0) &= -1
\end{aligned}
$$

usando o método de Euler explícito para $t \in [0,2]$ com um passo de tempo $h = 0.2$.

Solução do Exemplo

Pelo método de Euler, temos

$$
\begin{aligned}
u_{n+1} &= u_n + h\, f(t_n, u_n, v_n) \\
v_{n+1} &= v_n + h\, g(t_n, u_n, v_n)
\end{aligned}
$$

Sistemas de EDOs

Solução do Exemplo

Assim para $n = 0$, calculamos u_1 e v_1 tomando

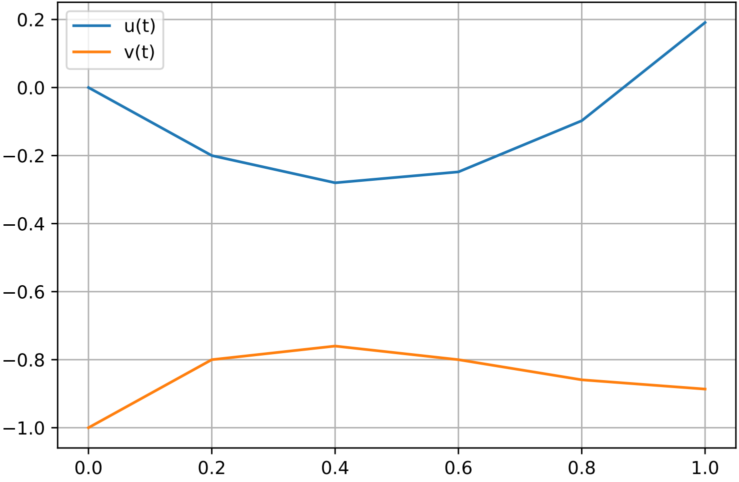
$$
\begin{aligned}
u_1 &= u_0 + hf(t_0, u_0, v_0) = u_0 + h(u_0 + v_0 + 3t_0) \\
&= 0 + 0.2(0 - 1 + 0) = -0.2 \\
v_1 &= v_0 + hg(t_0, u_0, v_0) = v_0 + h(2u_0 - v_0 - t_0) \\
&= -1 + 0.2[2(0) + 1 - 0] = -0.8
\end{aligned}
$$

Para $n = 1$, calculamos u_2 e v_2

$$
\begin{aligned}
u_2 &= u_0 + hf(t_1, u_1, v_1) = u_1 + h(u_1 + v_1 + 3t_1) \\
&= -0.2 + 0.2[-0.2 - 0.8 + 3(0.2)] \\
v_2 &= v_1 + hg(t_1, u_1, v_1) = v_1 + h(2u_1 - v_1 - t_1) \\
&= -0.8 + 0.2[2(-0.2) + 0.8 - 0.2] = -0.76
\end{aligned}
$$

e assim por diante para $n = 2, \ldots$.

Sistemas de EDOs



Conteúdo

EDOs de Alta Ordem

Podemos ter ainda a seguinte situação

$$\frac{d^m u}{dt^m} = f(t, u, u', u'', \ldots, u^{(m-1)})$$

com as condições iniciais:

$$\begin{aligned} u(t_0) &= \alpha_1 \\ u'(t_0) &= \alpha_2 \\ &\vdots \\ u^{(m-1)}(t_0) &= \alpha_m \end{aligned}$$

Também podemos resolver este tipo de problema com os métodos que iremos estudar, para isso, basta proceder com uma definição de novas variáveis e **reescrever o problema como um sistema de EDOs de primeira ordem.**

EDOs de Alta Ordem

Vejamos um exemplo para ilustrar a idéia. Considere a seguinte EDO de quarta ordem:

$$\begin{aligned} u^{(4)} &= u''' - 2u + 3t \\ u(t_0) &= 1 \\ u'(t_0) &= 2 \\ u''(t_0) &= 3 \\ u'''(t_0) &= 4 \end{aligned}$$

Assim definimos **novas variáveis** como

$$\begin{aligned} u_1 &= u \\ u_2 &= u' \\ u_3 &= u'' \\ u_4 &= u''' \end{aligned}$$

EDOs de Alta Ordem

Vejamos um exemplo para ilustrar a idéia. Considere a seguinte EDO de quarta ordem:

$$\begin{aligned} u^{(4)} &= u''' - 2u + 3t \\ u(t_0) &= 1 \\ u'(t_0) &= 2 \\ u''(t_0) &= 3 \\ u'''(t_0) &= 4 \end{aligned}$$

Assim definimos **novas variáveis** como

$$\begin{aligned} u_1 = u \quad &\Rightarrow \quad u_1' = u' = u_2 \\ u_2 = u' \quad &\Rightarrow \quad u_2' = u'' = u_3 \\ u_3 = u'' \quad &\Rightarrow \quad u_3' = u''' = u_4 \\ u_4 = u''' \quad &\Rightarrow \quad u_4' = u^{(4)} = u_4 - 2u_1 + 3t \end{aligned}$$

EDOs de Alta Ordem

E para as condições iniciais temos:

$$
\begin{aligned}
u_1 = u \quad &\Rightarrow \quad u_1(t_0) = 1 \\
u_2 = u' \quad &\Rightarrow \quad u_2(t_0) = 2 \\
u_3 = u'' \quad &\Rightarrow \quad u_3(t_0) = 3 \\
u_4 = u''' \quad &\Rightarrow \quad u_4(t_0) = 4
\end{aligned}
$$

EDOs de Alta Ordem

Exemplo

Consideramos um problema de valor inicial para uma EDO de 2^a ordem:

$$\begin{aligned} u'' - u' + 3u &= t \\ u(0) &= 1 \\ u'(0) &= -2 \end{aligned}$$

e queremos encontrar a solução $u(t)$ para $t \in [0, 4]$.

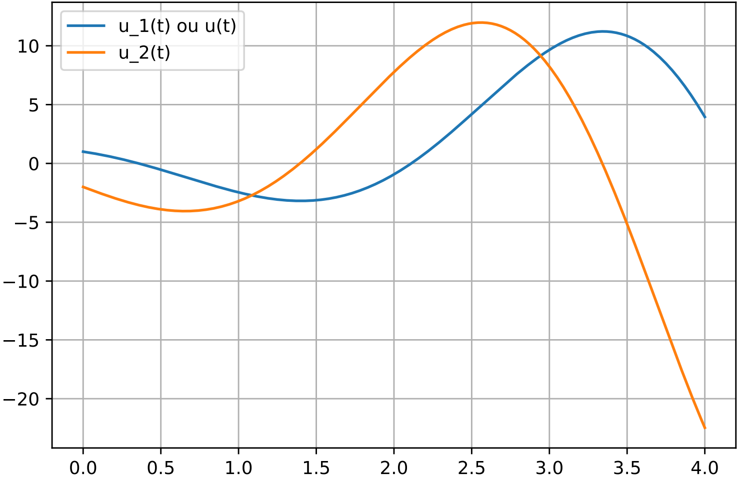
EDOs de Alta Ordem

Solução Exemplo

Primeiro temos que reescrever isso como um sistema de 1ª ordem : Seja $u_1(t) = u(t)$e $u_2(t) = u'(t)$, então obtemos

$$\begin{cases} u_1' & = u_2 \\ u_1(0) & = 1 \\ u_2' & = t + u_2 - 3u_1 \\ u_2 & = -2 \end{cases}$$

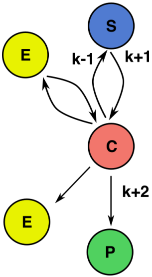
EDOs de Alta Ordem



Exercicios

Simule uma reação enzimática pelo modelo de Michaeles-Menten usando o método de Runge-Kutta Clássico e Trapezio

$$
\begin{cases}
\frac{d[S]}{dt} & = k_{-1}[C] - k_{+1}[S][E] \\
\frac{d[E]}{dt} & = (k_{-1} + k_{+2})[C] - k_{+1}[S][E] \\
\frac{d[C]}{dt} & = -(k_{-1} + k_{+2})[C] + k_{+1}[S][E] \\
\frac{d[P]}{dt} & = k_{+2}[C]
\end{cases}
$$



Utilize as condições iniciais: $s0 = 10.0$, $e0 = 2.0$ e $c0 = p0 = 0.0$; e parâmetros $k_{1+} = 0.01$, $k_{1-} = 0.02$ e $k_{2+} = 0.03$.

Exercicio

Utilizando os metodos numéricos aprendidos resolva o modelo de Lotka-Volterra

$$\begin{cases} \dfrac{dL}{dt} & = \alpha L - \beta LA \\ \dfrac{dA}{dt} & = \delta LA - \gamma A \end{cases}$$

Simule 20 u.t. utilizando 101 passos de tempo, os parâmetros $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 1$ e condições iniciais $L_0 = 2.0$ e $A_0 = 1.0$. Como ficou a simulação?

a) Utilizando Euler Explícito

b) Utilizando Euler Implícito