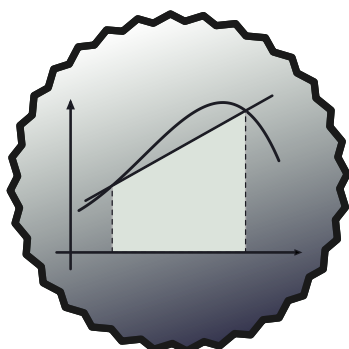




Métodos para PVI

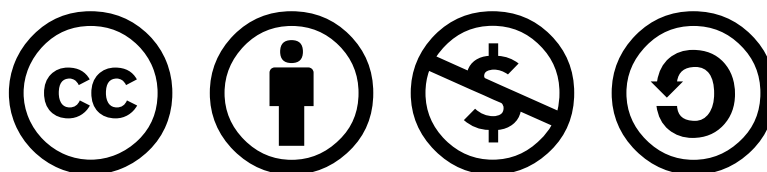
Ricardo Biloti

biloti@unicamp.br

Cálculo Numérico – UNICAMP

1S/2025

Licença



Este trabalho é licenciado sob os termos da Licença Internacional Creative Commons Atribuição-NãoComercial-Compartilhalgal 4.0.

Para ver uma cópia desta licença, visite
<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>.

Seus direitos e deveres são:

- Você é livre para copiar e redistribuir este material, em qualquer meio ou formato, para adaptá-lo, transformá-lo ou utilizá-lo para construir seu próprio material.
- Você deve dar os créditos apropriados, fornecendo link para a licença e indicando se alterações foram feitas. Você pode fazer isto de qualquer forma razoável, porém sem tentar passar a ideia ou sugerir que o autor endosse suas alterações ou seu uso do material.
- Você não pode utilizar este material para fins comerciais.
- Se você alterar, transformar ou construir seu próprio material com base neste trabalho, você deverá distribuí-lo sob a mesma licença usada no original.

Cartas na mesa

Equação diferencial

Equação envolvendo derivadas de uma função incógnita.

Exemplos:

- $y'(t) = 2t$, $y(t) = t^2 + c$
- $u' = u$, $u(t) = ce^t$
- $v'' + v = 0$, $v(t) = \alpha \cos(t) + \beta \sin(t)$
- $y''y + (y')^2 = 1 + 2t$, $y(t) = \ln |c_1 + c_2t + t^2/2 + t^3/3|$

Equações diferenciais são equações cuja incógnita é uma função e cuja equação envolve derivadas dessa função.

Como funções que diferem apenas por constantes têm a mesma derivada, sem informação adicional não é possível determinar unicamente a solução de uma equação diferencial. Ou seja, se apenas a equação diferencial é prescrita, a solução obrigatoriamente envolve constantes indeterminadas.

Equações diferenciais classificam-se pela **ordem** da derivada mais alta que aparece na equação, podem ser linear ou não, e pelo tipo de derivadas envolvidas (ordinárias ou parciais).

A quantidade de constantes arbitrárias na solução geral da equação diferencial é igual a ordem da equação.

Problema de Valor Inicial padrão

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0$$

$$y(t_0) = y_0$$

Por exemplo

$$y'(t) = 4(t - y^2), \quad t > 1$$

$$y(1) = -1/2$$

Um **problema de valor inicial** é composto com por uma equação diferencial e condições adicionais prescritas em um único ponto.

Estamos interessados em estudar métodos numéricos para problemas de valor inicial para equações diferenciais ordinárias.

O problema padrão para o qual desenvolveremos métodos numéricos é da forma $y'(t) = f(t, y(t))$, ou seja, uma equação diferencial ordinária de primeira ordem, linear ou não, com condição inicial $y(t_0) = y_0$.

Apesar de parecer restritivo tratar problemas deste tipo apenas, veremos que equações ordinárias de ordem superior também serão contempladas, visto que poderão ser convertidas em um problema equivalente, na forma desse problema padrão. Todos os exemplos vistos até agora se encaixa nesse problema padrão ou podem ser convertidos para problemas equivalentes que se encaixem.

A restrição que de fato se impõe é que a derivada de ordem mais alta deve poder ser expressa explicitamente com função das derivadas de ordem inferior e da variável independente.

Existência e unicidade

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0, \quad y(t_0) = y_0 \quad (\star)$$

Teorema

Seja $R = [a, b] \times [c, d]$. Suponha que em

- ▶ f é contínua em R
- ▶ f é **Lipschitz contínua** em y em R , i.é

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|, \quad \text{para algum } L > 0$$

- ▶ $(t_0, y_0) \in R$

Então $(\star)$ tem solução única para $t_0 \leq t \leq t_0 + \delta$.

O Teorema de Existência e Unicidade da solução do problema $(\star)$, garante em quais condições o problema está bem posto. Fora dessas condições, não há garantias sobre a unicidade ou mesmo existência de solução e portanto seria temerário aplicar um método numérico.

Exemplo

Considere $R = [0, 3] \times [0, 4]$

▶ $y' = t^2 - y$

▶ $y' = e^{-2t} - 2y$

▶ $y' = 2t + \ln(y)$ (não satisfaz o T.E.U.)

Enquanto que os dois primeiros exemplos satisfazem as condições do T.E.U, o terceiro não, visto que a função $\ln(y)$ não está definida para $y = 0 \in [0, 4]$

Solução numérica

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0$$

$$y(t_0) = y_0$$

Dado uma malha $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N$, construiremos

$$y_n \approx y(t_n)$$

$h_n = t_{n+1} - t_n$ é o tamanho do passo

Como a solução de um PVI é uma função, poderíamos pensar que um método numérico produzirá uma função que se aproxime da solução. De fato, há métodos que fazem exatamente isto. Mas aqui vamos estudar métodos que ao invés de aproximar a função solução, aproximam apenas **amostras** da função solução.

Considere então uma sequência de pontos onde tencionamos aproximar o valor de y , solução do PVI. Essa malha de pontos não precisa ser regularmente espaçada.

Queremos então encontrar y_n que aproxima $y(t_n)$, para $n = 0, 1, \dots, N$.

Problema padrão

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad t > t_0$$

$$y(t_0) = y_0$$

com

$$y(t) \equiv (y_1(t), y_2(t), \dots, y_m(t))^T$$

$$f(t, y) \equiv (f_1(t, y), f_2(t, y), \dots, f_m(t, y))^T$$

Repare que o problema padrão é uma equação diferencial **vetorial** de primeira ordem, com condição inicial. Neste sentido, a função y que procuramos é $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ e a função f que define a equação diferencial é $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$.

Exemplo de PVI vetorial

$$y'(t) \equiv \begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ty_2 - 3y_1 \\ -(1-t)^2 y_2 \end{pmatrix} \equiv f(t, y)$$

com

$$y(1) = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Octave

```
>> # Define a função da equação diferencial e
>> # a condição inicial
>> f = @(y,t) [t*y(2)-3*y(1); -(1-t)^2*y(2)];
>> y0 = [2; 1];
>>
>> # Malha em t, onde aproximaremos a solução
>> t = linspace(1, 3, 101)';
>>
>> y = lsode(f, y0, t);
>>
>> plot(t, y(:,1), t, y(:,2))
>> legend("y_1", "y_2")
```

Resolver um PVI, que esteja no formato padrão, no Octave (ou MATLAB) é bem simples.

No Octave, o comando é `lsode`. Repare que na sintaxe do comando `lsode`, a função f tem como argumentos y e t (nesta ordem), ao contrário de nossa definição nestas notas. No MATLAB será tudo muito similar com a diferença de que, ao invés de `lsode`, há outros métodos disponíveis. O mais usual é `ode45` (também disponível no Octave). Logo, a única linha diferente, se o MATLAB fosse usado no lugar do Octave, seria

```
>> y = ode45(f, t, y0);
```

Repare que a ordem dos argumentos também mudou.

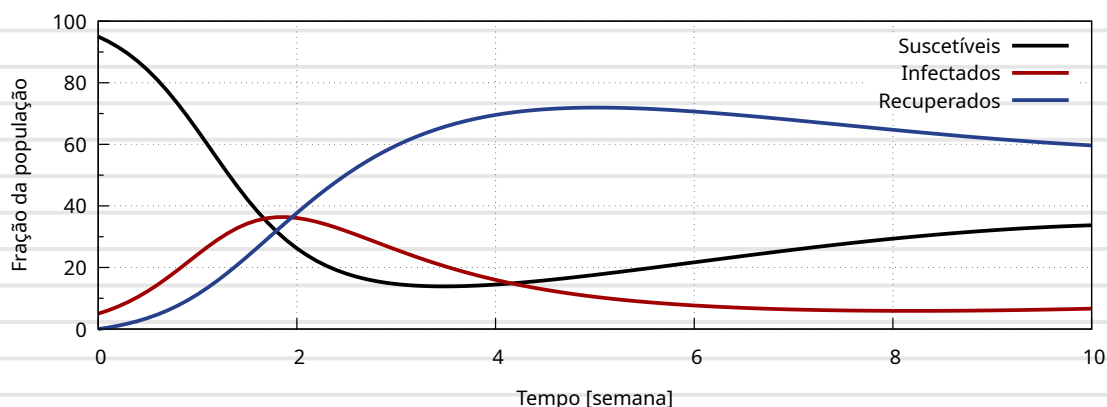
Dinâmica populacional

Se $S(t)$, $I(t)$, $R(t)$, representam, respectivamente, os suscetíveis a uma infecção, os infectados e os recuperados, então, a dinâmica da infecção pode ser modelada por

$$\begin{aligned}S'(t) &= -\alpha S(t)I(t) + \gamma R(t) \\I'(t) &= \alpha S(t)I(t) - \beta I(t) \\R'(t) &= \beta I(t) - \gamma R(t)\end{aligned}$$

A população de suscetíveis à infecção reduz a medida que uma fração dos encontros entre infectados e suscetíveis acarreta em novos infectados. Isso é modelado pelo termo $-\alpha SI$. Perceba que a população de infectados cresce pela mesma proporção (com sinal oposto). Uma fração dos infectados tornam-se recuperados, e isso é modelado por $-\beta I$. Se $\gamma > 0$, então uma fração dos recuperados não torna-se imune e voltam a ser suscetíveis à infecção.

Por exemplo, o gráfico abaixo exibe uma situação em que no início aproximadamente 5% da população está infectada. O ápice da infecção acontece pouco antes de duas semanas. Como essa infecção não confere imunidade, a população de infectados parece se estabilizar próximo de 30% da população.



Modelos como esse que vêm sendo usados para simular a evolução da pandemia COVID-19 e estimar o momento do pico da infecção na população.

Sistema de traçamento de raios

$$\frac{dx_j}{d\sigma} = p_j, \quad \frac{dp_j}{d\sigma} = \frac{1}{v^3} \frac{\partial v}{\partial x_j}, \quad j = 1, 2, \quad \frac{d\tau}{d\sigma} = \frac{1}{v^2}$$

$$y(\sigma) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ p_1 \\ p_2 \\ \tau \end{pmatrix} \quad f(\sigma, y) = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \frac{1}{v^3} \frac{\partial v}{\partial x_1} \\ \frac{1}{v^3} \frac{\partial v}{\partial x_2} \\ \frac{1}{v^2} \end{pmatrix}$$

Este sistema descreve o percurso de um raio sísmico. Um raio sísmico é uma abstração matemática, assim como um raio de luz. Tanto no caso de um abalo sísmico quanto da luz, o que se propaga é uma onda, de pressão ou eletromagnética. Porém, ainda em ambos os casos, é útil interpretar o “caminho” que a onda faz para ir de um ponto a outro como a trajetória de uma partícula. A esse caminho, damos o nome de raio.

Neste exemplo, σ é a variável independente que parametriza uma posição ao longo do raio. Estamos considerando um meio bidimensional, parametrizado por (x_1, x_2) , onde a onda se propaga. A função $v : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma conhecida e, para cada par (x_1, x_2) associa o valor $v(x_1, x_2)$, que fisicamente representa a velocidade de propagação da onda de pressão, na coordenada (x_1, x_2) . $(p_1(\sigma), p_2(\sigma))$ representa o vetor tangente à trajetória do raio na posição $(x_1(\sigma), x_2(\sigma))$. Por fim, $\tau(\sigma)$ é o tempo de propagação, desde a posição dada na condição inicial até o ponto $(x_1(\sigma), x_2(\sigma))$.

Equação de segunda ordem

$$\begin{cases} x'' + p(t)x' + q(t)x = g(t) \\ x(t_0) = \alpha \\ x'(t_0) = \beta \end{cases}$$

Definindo

$$y_1(t) = x(t)$$

$$y_2(t) = y_1'(t) = x'(t)$$

$$y_2' + p(t)y_2 + q(t)y_1 = g(t)$$

Esta equação diferencial não está no formato do problema padrão. Precisamos então definir um outro problema, no formato padrão, que seja equivalente a este. Para tanto, considere uma função vetorial $y(t)$ de duas componentes, definida por $y(t) = (x(t), x'(t))^T$.

Equação de segunda ordem reformulada

$$\begin{cases} x'' + p(t)x' + q(t)x = g(t) \\ x(t_0) = \alpha \\ x'(t_0) = \beta \end{cases}$$

$$y' = \begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ g(t) - p(t)y_2 - q(t)y_1 \end{pmatrix} = f(t, y)$$

$$y(t_0) = (y_1(t_0), y_2(t_0))^T = (\alpha, \beta)^T$$

Com isso, ao computar $y'(t)$ e escrevê-lo em termos de t e y apenas, conseguimos um problema equivalente, que sim está no formato padrão.

Exercício

Reformule o PVI como um sistema de primeira ordem.

$$\begin{cases} u'' + u = 6 \cos(t) \\ u(0) = 2 \\ u'(0) = 3 \end{cases}$$

$$y(t) = (y_1(t), y_2(t))^T = (u(t), u'(t))^T, \quad y(0) = (2, 3)^T$$

$$y'(t) = \begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -y_1 + 6 \cos t \end{pmatrix} = f(t, y)$$

Método de Euler

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h_n y'(t_n) + \frac{h_n^2}{2} y''(\tau)$$

Como $y'(t) = f(t, y(t))$

$$y'(t_n) = f(t_n, y(t_n)) \approx f(t_n, y_n)$$

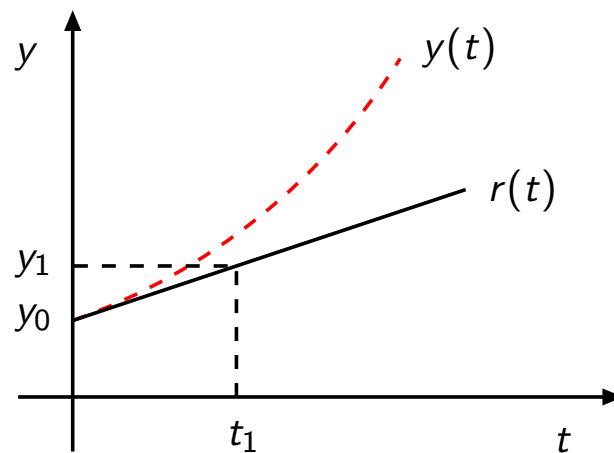
$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

O método mais simples é o **Método de Euler**. Esse método parte do polinômio de Taylor de ordem 1, para aproximar $y(t_{n+1})$, em torno de t_n .

Desprezando o termo do erro, proporcional a y'' , temos que

$$y(t_{n+1}) \approx \mathbf{y}_{n+1} \equiv \mathbf{y}_n + \mathbf{h}_n \mathbf{f}(\mathbf{t}_n, \mathbf{y}_n) \approx y(t_n) + h_n f(t_n, y(t_n)).$$

Interpretação geométrica



$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

Geometricamente, o método de Euler consiste em aproximar y pela reta tangente e definir y_{n+1} como o valor sobre a reta tangente a um passo de tamanho h_n a frente de t_n .

Exemplo

Encontre uma aproximação para $y(1)$, pelo método de Euler, utilizando passo $h = 1/10$.

$$\begin{cases} y'(t) = -2ty, & t > 0, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Por concisão, vou mostrar a solução com $h = 1/2$. Como h , o tamanho do passo foi escolhido constante, então $t_0 = 0$ (ponto onde foi prescrita a condição inicial), $t_1 = t_0 + h = 1/2$ e $t_2 = t_0 + 2h = 1$. Observe que

$$f(t, y) = -2ty.$$

$y_0 = y(0) = 1$, visto que esse valor nem precisa ser aproximado, pois é conhecido.

Usando a iteração de Euler,

$$y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) = 1 + \frac{1}{2}(-2t_0y_0) = 1 - 0 \cdot 1 = 1.$$

Na iteração seguinte,

$$y_2 = y_1 + hf(t_1, y_1) = 1 + \frac{1}{2}(-2t_1y_1) = 1 - \frac{1}{2} \cdot 1 = \frac{1}{2}.$$

Como $y_2 \approx y(t_2) = y(1)$, temos que $y(1) \approx 1/2$.

Expansão de Taylor

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h_n y'(t_n) + \frac{h_n^2}{2} y''(t_n) + \cdots + \frac{h_n^k}{k!} y^{(k)}(t_n) + \mathcal{O}(h_n^{k+1})$$

$$y'(t_n) = f(t_n, y_n)$$

$$y''(t) = \frac{d}{dt} y'(t) = \frac{d}{dt} f(t, y(t)) = f_t(t, y(t)) + f_y(t, y(t)) y'(t)$$

$$y''(t_n) = f_t + f_y f$$

Se o método de Euler foi construído usando o polinômio de Taylor de primeira, a ideia natural para obter um método melhor é usar o polinômio de Taylor de uma ordem superior.

No polinômio de Taylor, trocamos $y'(t_n)$ por $f(t_n, y(t_n))$. Se precisarmos de derivadas de ordem superior, basta derivar essa equação.

Assim

$$y''(t_n) = f_t(t_n, y(t_n)) + f_y(t_n, y(t_n)) f(t_n, y(t_n))$$

Método de Taylor de ordem 2

$$y'(t_n) = f$$

$$y''(t_n) = f_t + f_y f$$

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n) + \frac{h_n^2}{2} \left[f_t(t_n, y_n) + f_y(t_n, y_n) f(t_n, y_n) \right]$$

Este seria o método de Taylor de segunda ordem, melhor então que o método de Euler, que nada mais é que o método de Taylor de primeira ordem.

O ponto negativo do método de Taylor é que é necessário computar diversas derivadas da função f . No caso desse exemplo, são apenas duas, mas esse número cresce rapidamente quando consideramos métodos de ordem superior.

Derivada terceira

$$y'''(t) = f_{tt} + 2f_{ty}f + f_y f_t + f_{yy}f^2 + f_y^2 f$$

Por exemplo, para construir um método de Taylor de ordem 3, já é preciso computar a terceira derivada de y , o que envolve diversas derivadas de f .

Além de ser um processo trabalhoso, é também muito suscetível a erros.

Erro de truncamento local

$$d_n \leq \frac{h^k}{(k+1)!} M_{k+1}$$

$$M_k = \max |y^{(k)}(t)|$$

Uma medida da qualidade para métodos como os que estamos vendo é o **erro de truncamento local**, definido como

$$d_n \equiv y'(t_n) - \frac{y_{n+1} - y_n}{h}.$$

É possível construir métodos de Taylor bem precisos, visto que basta considerar polinômios de Taylor de ordens cada vez maiores.

Runge-Kutta

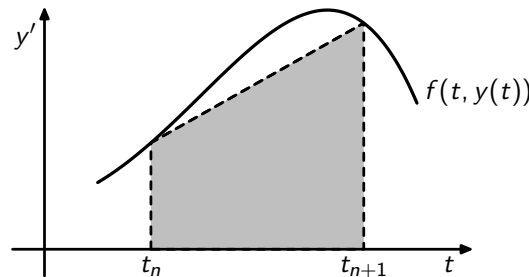
- ▶ Tão acurados quanto se queira
- ▶ Sem avaliação de derivadas de f
- ▶ Múltiplas avaliações de f

Os métodos do tipo [Runge-Kutta](#) visam fornecer opções métodos precisos, tanto quantos os métodos de Taylor, porém mais simples de serem aplicados. Para isso, eles não utilizam as derivadas da função f , mas sim apenas múltiplas avaliações dessa função.

Runge-Kutta de segunda ordem

Se $y' = f(t, y(t))$, então

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



Métodos tipo Runge-Kutta podem ser construídos de várias formas. Uma delas, é através de regras de integração numérica.

Como $y' = f(t, y(t))$, ao integrar essa equação em ambos os lados, entre t_n e t_{n+1} temos que

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

Assim, aproximar $y(t_{n+1})$ resume-se a aproximar a integral de $f(t, y(t))$. Já vimos métodos para isso, como por exemplo a regra do Trapézio.

Runge-Kutta de segunda ordem

Método do trapézio

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

Observe que nesse método, o cálculo de y_{n+1} depende do próprio valor de y_{n+1} . Dizemos então que esse método é **implícito**.

Como a equação para y_{n+1} é implícita, o seu cálculo então acaba precisando de um método numérico auxiliar, iterativo, o que em muitos casos acaba sendo um inconveniente grande.

Runge-Kutta de segunda ordem

Método do trapézio explícito (ou *Método de Heun*)

$$\hat{y} = y_n + h_n f(t_n, y_n)$$

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

No final do intervalo:

$$|y(t_{n+1}) - y_{n+1}| = \mathcal{O}(h^2) \approx Ch^2$$

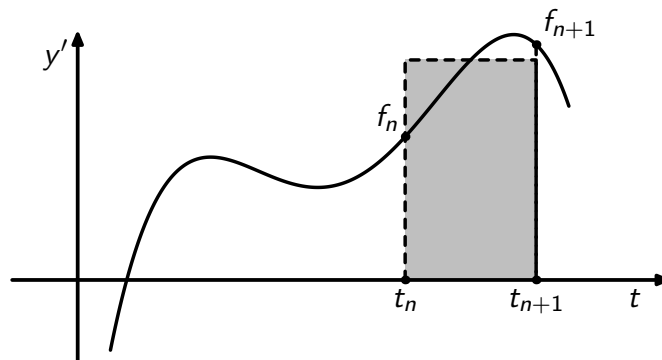
Uma forma de *explicitar* o método, ou seja, de construir um método numérico que define y_{n+1} de forma explícita, seria trocar y_{n+1} no lado direito da equação por uma aproximação para y_{n+1} , desde que isso não prejudique a ordem do método.

Isso pode ser feito computando-se um valor aproximado para y_{n+1} pelo método de Euler, por exemplo. Essa estratégia da origem ao [método do trapézio explícito](#) ou [método de Heun](#).

Runge-Kutta de segunda ordem

Se $y' = f(t, y(t))$, então

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



Outro método de Runge-Kutta de segunda ordem surge quando a integral de f é aproximada pela área do retângulo com a altura igual ao valor de f no ponto médio do intervalo.

Runge-Kutta de segunda ordem

Método do ponto médio

$$y_{n+1} = y_n + h_n f \left(t_{n+1/2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2} \right)$$

Novamente temos um método de Runge-Kutta implícito de segunda ordem, comparável ao método anterior, obtido pela integração pela regra do trapézio.

Runge-Kutta de segunda ordem

Método do ponto médio explícito

$$\hat{y} = y_n + \frac{h_n}{2} f(t_n, y_n)$$

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_{n+1/2}, \hat{y})$$

A versão explícita do método do ponto médio utiliza o mesmo artifício de computar uma aproximação provisória pelo método de Euler.

Runge-Kutta de quarta ordem

$$Y_1 = y_n$$

$$Y_2 = y_n + \frac{h_n}{2} f(t_n, Y_1)$$

$$Y_3 = y_n + \frac{h_n}{2} f(t_{n+1/2}, Y_2)$$

$$Y_4 = y_n + h_n f(t_{n+1/2}, Y_3)$$

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

É possível construir métodos de Runge-Kutta de qualquer ordem. Nesse exemplo, está um método de Runge-Kutta de quarta ordem muito popular. Esse não é o único RK de quarta ordem. De fato, os mais famosos são os métodos Runge-Kutta-Fehlberg e o método de Dormand-Prince, implementado no Matlab.

Exemplo

$$ty' = t - y, \quad y(2) = 2$$

No formato padrão,

$$y' = 1 - \frac{y}{t} = f(t, y)$$

Quanto é $y(3)$?

Exemplo: método de Euler

Usando $h = 0.5$, temos

$$t_0 = 2, \quad y_0 = 2$$

$$t_1 = t_0 + h = 2.5, \quad y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) = 2 + 0.5 \left(1 - \frac{2}{2}\right) = 2$$

$$t_2 = t_1 + h = 3, \quad y_2 = y_1 + hf(t_1, y_1) = 2 + 0.5 \left(1 - \frac{2}{2.5}\right) = 2.1$$

Exemplo: método do ponto médio explícito

$$f(t, y) = 1 - t/y, \quad h = 0.5$$

$$t_0 = 2, \quad y_0 = 2$$

$$t_{1/2} = t_0 + \frac{h}{2} = 2.25, \quad \hat{y}_{1/2} = y_0 + \frac{h}{2} f(t_0, y_0) = 2 + 0.25(1 - 2/2) = 2$$

$$t_1 = t_0 + h = 2.5, \quad y_1 = y_0 + hf(t_{1/2}, \hat{y}_{1/2}) = 2.05556$$

$$t_{3/2} = t_1 + \frac{h}{2} = 2.75, \quad \hat{y}_{3/2} = y_1 + \frac{h}{2} f(t_1, y_1) = 2.10000$$

$$t_2 = t_1 + h = 3, \quad y_2 = y_1 + hf(t_{3/2}, \hat{y}_{3/2}) = 2.17374$$

Exemplo: comparação

$$y' = 1 - y/t, \quad y(t) = t/2 + 2/t, \quad y(3) = \frac{13}{6} = 2.\bar{16}$$

Euler

$$y(3) \approx y_2 = 2.1, \quad E_{rel} = 3.0769 \cdot 10^{-2}$$

Ponto médio

$$y(3) \approx y_2 = 2.17374, \quad E_{rel} = 3.2646 \cdot 10^{-3}$$

RK4

$$y(3) \approx y_2 = 2.16897, \quad E_{rel} = 1.0621 \cdot 10^{-3}$$

Métodos de Runge-Kutta

- ▶ Tão precisos quanto se queira
- ▶ Implícitos ou explícitos
- ▶ Construídos a partir de regras de integração
- ▶ Fazem várias avaliações de função