Problema de Valor Inicial - PVI

Andréa Maria Pedrosa Valli e Lucia Catabriga

Laboratório de Otimização e Modelgaem Computacional
Departamento de Informática
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, Vitória, ES, Brasil

Problema de Valor Inicial - PVI

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Um Problema de Valor Inicial (PVI) de primeira ordem pode ser definido como: encontrar $y(x)$ para $x > x_0$ que satisfaça a equação diferencial

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y(x)), \tag{1}$$

sujeita às condições de fronteira

$$y(x_0) = y_0 \tag{2}$$

onde $f(x, y)$ é uma função conhecida assim como x_0 e y_0.

Um Problema de Valor Inicial (PVI) de primeira ordem pode ser definido como: encontrar $y(x)$ para $x > x_0$ que satisfaça a equação diferencial

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y(x)), \tag{1}$$

sujeita às condições de fronteira

$$y(x_0) = y_0 \tag{2}$$

onde $f(x, y)$ é uma função conhecida assim como x_0 e y_0.

Uma solução para o PVI é uma função $y(x)$ da variável independente x que satisfaz a equação diferencial ordinária (1) e às condições de fronteira (2).

Métodos de Solução Numérica para PVI:

- Métodos de Passo Simples
- Métodos de Passo Múltiplo

O objetivo dos métodos de passo simples é encontrar uma solução aproximada $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$, dada a solução no instante anterior (x_i, y_i), $i = 0, 1, \cdots, n-1$.

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Métodos de Solução Numérica para PVI:

- Métodos de Passo Simples
- Métodos de Passo Múltiplo

O objetivo dos métodos de passo simples é encontrar uma solução aproximada $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$, dada a solução no instante anterior (x_i, y_i), $i = 0, 1, \cdots, n-1$.

Para isso, precisamos discretizar o intervalo de interesse $[x_0, x_n]$, definindo um conjunto de pontos de igualmente espaçados $x_0, x_1, \cdots x_n$ a distância $h = \frac{x_n - x_0}{n}$, onde: $x_i = x_0 + i\,h$, $i = 0, 1, \cdots, n$

Métodos de Solução Numérica para PVI:

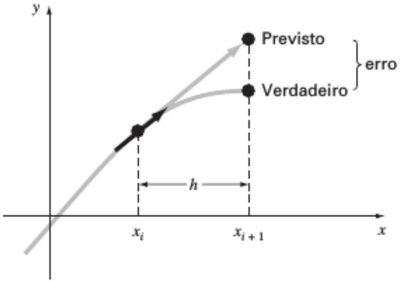
- Métodos de Passo Simples
- Métodos de Passo Múltiplo

O objetivo dos métodos de passo simples é encontrar uma solução aproximada $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$, dada a solução no instante anterior (x_i, y_i), $i = 0, 1, \cdots, n-1$.

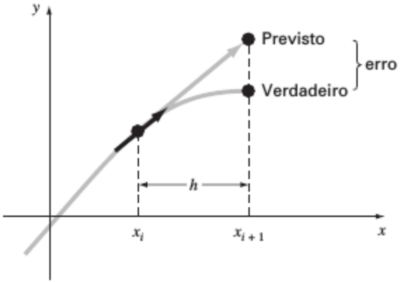
Para isso, precisamos discretizar o intervalo de interesse $[x_0, x_n]$, definindo um conjunto de pontos de igualmente espaçados $x_0, x_1, \cdots x_n$ a distância $h = \frac{x_n - x_0}{n}$, onde: $x_i = x_0 + i\,h$, $i = 0, 1, \cdots, n$
Os métodos fornecem a solução em uma tabela de pontos (x_i, y_i), $i = 0, 1, \cdots, n$. Através da interpolação podemos traçar o gráfico da solução.

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Método de Euler [2]: $y(x_{i+1}) \approx y_{i+1}$



Método de Euler [2]: $y(x_{i+1}) \approx y_{i+1}$



Considere a reta $R(x)$ tangente à curva $y(x)$ no ponto (x_i, y_i). O valor Previsto, y_{i+1}, é definido como sendo o valor $R(x_{i+1})$, ou seja, o valor da reta tangente no ponto x_{i+1}. Reta $R(x)$:

$$\frac{R(x) - y_i}{x - x_i} = \frac{dy}{dx}\Big|_{(x_i, y_i)} = f(x_i, y_i) \Rightarrow y_{i+1} = y_i + h\, f(x_i, y_i)$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Exemplo: resolva o PVI no intervalo $[0,1]$ usando o método de Euler com $h = 0.5$ e $h = 0.25$. Calcule o erro exato para cada h, sabendo-se que a solução exata é $y(x) = e^x$.

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= e^x \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Série de Taylor de $y(x)$ em torno de x_i:

$$\begin{aligned} y(x) &= y(x_i) + y'(x_i)\,(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2!}\,(x - x_i)^2 + \cdots \\ &+ \frac{y^{(n)}(x_i)}{n!}\,(x - x_i)^n + R_n \end{aligned}$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Série de Taylor de $y(x)$ em torno de x_i:

$$\begin{aligned} y(x) &= y(x_i) + y'(x_i)\,(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2!}\,(x - x_i)^2 + \cdots \\ &+ \frac{y^{(n)}(x_i)}{n!}\,(x - x_i)^n + R_n \end{aligned}$$

onde R_n é o resto dado por

$$R_n = \frac{y^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\,(x - x_i)^{n+1}$$

com ξ_x um ponto entre x_i e x.

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Vamos aproximar $y(x)$ em torno do ponto x_i por uma reta usando a série de Taylor:

$$\begin{aligned} y(x) &\approx y(x_i) + y'(x_i)\,(x - x_i) \\ E_1 &= \frac{y''(\xi_x)}{2!}\,(x - x_i)^2, \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i \end{aligned}$$

Vamos aproximar $y(x)$ em torno do ponto x_i por uma reta usando a série de Taylor:

$$\begin{aligned} y(x) &\approx y(x_i) + y'(x_i)\,(x - x_i) \\ E_1 &= \frac{y''(\xi_x)}{2!}\,(x - x_i)^2, \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i \end{aligned}$$

Definindo uma malha de pontos em x igualmente espaçados, podemos obter uma aproximação para a solução $y(x)$ em $x_{i+1} = x_i + h$, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &\approx y_{i+1} = y_i + h\,f(x_i, y_i) \\ E_1 &= \frac{y''(\xi_x)}{2!}\,h^2, \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i \quad (\text{erro local}) \end{aligned}$$

assumindo h pequeno. Quanto maior h maior é o erro local. Dizemos que o erro local é $\mathcal{O}(h^2) \approx Ch^2$, onde C é uma constante que depende do valor da derivada segunda de $y(x)$ em ξ_x.

É possível verificar numericamente que o erro global é $\mathcal{O}(h)$.

Vamos aproximar $y(x)$ em torno do ponto x_i por um polinômio de grau 2, usando a série de Taylor:

$$\begin{aligned} y(x) &\approx y(x_i) + y'(x_i)\,(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2!}\,(x - x_i)^2 \\ E_2 &= \frac{y^{(3)}(\xi_x)}{3!}\,(x - x_i)^3, \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i \end{aligned}$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Vamos aproximar $y(x)$ em torno do ponto x_i por um polinômio de grau 2, usando a série de Taylor:

$$\begin{aligned} y(x) &\approx y(x_i) + y'(x_i)\,(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2!}\,(x - x_i)^2 \\ E_2 &= \frac{y^{(3)}(\xi_x)}{3!}\,(x - x_i)^3, \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i \end{aligned}$$

Precisamos calcular $y''(x)$:

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}\right) = \frac{d}{dx}(f(x, y(x)) = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = f_x(x, y) + f(x, y)\, f_y(x, y)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow y_{i+1} &= y_i + h\, f(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2!}\left(f_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i) \right) \\ E_2 &= \frac{y^{(3)}(\xi_x)}{3!}\, h^3 = \mathcal{O}(h^3), \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i \end{aligned}$$

Dificuldade: cálculo de derivadas de $f(x, y)$

LabOtim
LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Propriedades:

1. os métodos de Runge-Kutta são de passo um;
2. não exigem o cálculo de qualquer derivada de $f(x, y)$;
3. coincidem com o método de série de Taylor de mesma ordem.

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Propriedades:

1. os métodos de Runge-Kutta são de passo um;
2. não exigem o cálculo de qualquer derivada de $f(x, y)$;
3. coincidem com o método de série de Taylor de mesma ordem.

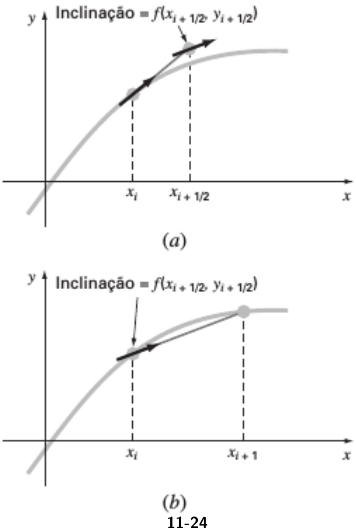
Observação: o método de Euler é um método de Runge-Kutta de primeira ordem,

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h\, f(x_i, y_i), \quad i = 0, 1, \cdots, n-1 \\ &= y(x_i) + y'(x_i)\,(x_{i+1} - x_i) \end{aligned}$$

$$\text{Erro Local} = \frac{y''(\xi_x)}{2!}\, h^2 = \mathcal{O}(h^2), \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i$$

$$\text{Erro Global} = \mathcal{O}(h)$$

Método do Ponto Médio ou Euler Modificado [2]:



Método do Ponto Médio ou Euler Modificado [2]:

$$\begin{aligned} x_{i+\frac{1}{2}} &= x_i + \frac{1}{2}h \\ y_{i+\frac{1}{2}} &= y_i + \frac{1}{2}h\,f(x_i, y_i) \qquad \text{(método de Euler)} \end{aligned}$$

Reta $R(x)$ que passa por (x_i, y_i) e tem inclinação $f(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{i+\frac{1}{2}})$:

$$\frac{R(x) - y_i}{x - x_i} = f(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{i+\frac{1}{2}}) \Rightarrow y_{i+1} = R(x_{i+1})$$

$$\Rightarrow y_{i+1} = y_i + h\,f(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{i+\frac{1}{2}})$$

$$\Rightarrow y_{i+1} = y_i + h\,f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h\,f(x_i, y_i)\right)$$

Método do Ponto Médio ou Euler Modificado:

$$\begin{aligned}\Rightarrow y_{i+1} &= y_i + h\,k_2 \\ k_1 &= f(x_i, y_i) \\ k_2 &= f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h\,k_1)\end{aligned}$$

Observação: temos que avaliar a função $f(x, y)$ em dois pontos diferentes em cada passo do método. $\Longrightarrow$ É um método de Runge-Kutta de ordem 2.

Lab tim
LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Método de Runge-Kutta de ordem s:

$$y_{i+1} = y_i + h\left(b_1 k_1 + b_2 k_2 + \cdots b_s k_s\right)$$

onde

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_i, y_i)\\
k_2 &= f(x_i + c_2 h, y_i + h a_{21} k_1)\\
k_3 &= f(x_i + c_3 h, y_i + h[a_{31} k_1 + a_{32} k_2])\\
&\vdots\\
k_s &= f(x_i + c_s h, y_i + h[a_{s1} k_1 + a_{s2} k_2 + \cdots + a_{s,s-1} k_{s-1}])
\end{aligned}$$

Erro Local: $\mathcal{O}(h^{s+1})$ $\left(E_s = \frac{y^{(s+1)}(\xi_x)}{(s+1)!}\, h^{s+1}, \quad \xi_x \text{ entre } x \text{ e } x_i\right)$
Erro Global: $\mathcal{O}(h^s)$

LabOtim
LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Notação de Butcher:

$$
\begin{array}{c|cccccc}
0 & & & & & \\
c_2 & a_{21} & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
\vdots & \vdots & & & & \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s
\end{array}
$$

a, **b**, **c** definidas para cada método.

Exemplo: Método do Ponto Médio ou Euler Modificado:
$c_2 = 1/2$, $a_{21} = 1/2$, $b_1 = 0$ e $b_2 = 1$.

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
1/2 & 1/2 & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}
$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Método de Euler Melhorado (Runge-Kutta de ordem 2):

$c_2 = 1,\ a_{21} = 1,\ b_1 = 1/2$ e $b_2 = 1/2$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$

Runge-Kutta de ordem 4:

$c_2 = 1/2,\ c_3 = 1/2,\ c_4 = 1$

$a_{21} = 1/2,\ a_{31} = 0,\ a_{32} = 1/2,\ a_{41} = a_{42} = 0,\ a_{43} = 1$

$b_1 = 1/6,\ b_2 = b_3 = 1/3,\ b_4 = 1/6$

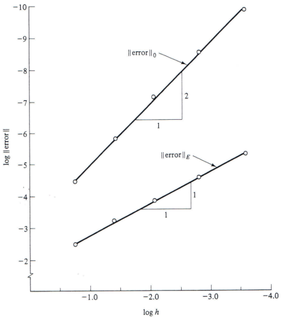
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/2 & 1/2 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6 \end{array}$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Verificar numericamente a ordem de convergência dos métodos p:

$$||erro(h)|| \leq Ch^p$$
$$\Rightarrow \quad log(||erro(h)||) \approx p\, log(h) + log(C)$$

Ou seja, o gráfico de uma função real $erro(h)$ da forma Ch^p é uma reta com inclinação p em um gráfico $log - log$: $||erro||_0 \leq h^2$ e $||erro||_E \leq h^1$, na figura abaixo.



Série de Taylor de $f(x,y)$ em torno de (x_0,y_0):

$$\begin{aligned}
f(x,y) &= f(x_0,y_0) + \frac{\partial f(x_0,y_0)}{\partial x}(x-x_0) + \frac{\partial f(x_0,y_0)}{\partial y}(y-y_0) \\
&+ \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 f(x_0,y_0)}{\partial x^2}(x-x_0)^2 + \frac{\partial^2 f(x_0,y_0)}{\partial x \partial y}(x-x_0)(y-y_0) \\
&+ \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 f(x_0,y_0)}{\partial y^2}(y-y_0)^2 + \cdots \\
&+ \cdots + \frac{1}{n!}\sum_{n=0}^{n}\binom{n}{j}\frac{\partial^n f(x_0,y_0)}{\partial x^{n-j}\partial y^j}(x-x_0)^{n-j}(y-y_0)^j
\end{aligned}$$

Método de Série de Taylor de ordem 2:

$$y_{i+1} = y_i + h\,f(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2!}\left[\,f_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i)f_y(x_i, y_i)\,\right] + \cdots \quad (3)$$

Método de Runge-Kutta de ordem 2:

$$y_{i+1} = y_i + h\left[\,b_1 f(x_i, y_i) + b_2 f(x_i + c_2 h, y_i + a_{21} h f(x_i, y_i))\,\right] \quad (4)$$

Expandindo $f(x, y)$ em série de Taylor em torno de (x_i, y_i)

$$f(x_i + c_2 h, y_i + a_{21} h f(x_i, y_i)) \approx f_i + c_2 h \frac{\partial f_i}{\partial x} + a_{21} h f_i \frac{\partial f_i}{\partial y} + \cdots \quad (5)$$

Substituindo (5) em (4), temos

$$y_{i+1} = y_i + h b_1 f_i + h b_2 \left[f_i + c_2 h \frac{\partial f_i}{\partial x} + a_{21} h f_i \frac{\partial f_i}{\partial y} + \cdots \right]$$

$$\Rightarrow y_{i+1} = y_i + h(b_1 + b_2)f_i + \frac{h^2}{2}\left[2b_2c_2\frac{\partial f_i}{\partial x} + 2b_2a_{21}f_i\frac{\partial f_i}{\partial y} + \cdots\right]$$

Comparando a equação com a série de Taylor de ordem 2,

$$y_{i+1} = y_i + h\,f(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2!}\left[\,f_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i)f_y(x_i, y_i)\,\right] + \cdots$$

temos

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 &= 1 \\ 2\,b_2\,c_2 &= 1 \\ 2\,b_2\,a_{21} &= 1 \end{aligned}$$

Observação: Temos 4 incógnicas e 3 equações
$\Rightarrow$ infinitas soluções
$\Rightarrow$ temos vários métodos de Runge-Kutta de ordem 2

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Sistema de Eq. Dif. Ordinárias de primeira ordem

$$
\begin{aligned}
\frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \cdots, y_m) \\
\frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \cdots, y_m) \\
&\vdots \\
\frac{dy_m}{dx} &= f_m(x, y_1, y_2, \cdots, y_m)
\end{aligned}
$$

sujeita às condições iniciais

$$
\begin{aligned}
y_1(x_0) &= y_{01} \\
y_2(x_0) &= y_{02} \\
&\vdots \\
y_m(x_0) &= y_{0m}
\end{aligned}
$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Forma Vetorial:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dx}(x) &= F(x, Y(x)) \\ Y(x_0) &= Y_0 \end{aligned}$$

onde

$$Y(x) = \begin{bmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \\ \vdots \\ y_m(x) \end{bmatrix}, \quad F(x, Y(x)) = \begin{bmatrix} f_1(x, Y(x)) \\ f_2(x, Y(x)) \\ \vdots \\ f_m(x, Y(x)) \end{bmatrix}, \quad Y_0 = \begin{bmatrix} y_{01} \\ y_{02} \\ \vdots \\ y_{0m} \end{bmatrix}$$

Método de Euler:

$$Y_{n+1} = Y_n + h\,F(x_n, Y_n)$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Equações Diferenciais Ordinárias de ordem superior:

$$\begin{aligned} \frac{d^2y}{dx^2} - 5x\frac{dy}{dx} + xy^2 &= 0 \\ y(1) &= 2 \\ \frac{dy}{dx}(1) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \frac{dy}{dx} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{dy_1}{dx} \\ \frac{dy_2}{dx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ 5xy_2 - xy_1^2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} y_1(1) \\ y_2(1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Método de Euler:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}_{n+1} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}_n + h \begin{bmatrix} y_2 \\ 5xy_2 - xy_1^2 \end{bmatrix}_n$$

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL

Bibliografia Básica

[1] Algoritmos Numéricos, Frederico F. Campos, Filho - 2ª Ed., Rio de Janeiro, LTC, 2007.

[2] Métodos Numéricos para Engenharia, Steven C. Chapa e Raymond P. Canale, Ed. McGraw-Hill, 5ª Ed., 2008.

[3] Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais, Márcia A. G. Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes, Ed. Pearson Education, 2ª Ed., 1996.

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL