

Capítulo 7

Resolução Numérica de Equações Diferenciais

Neste Capítulo nosso objetivo é encontrar a solução de uma equação diferencial de primeira ordem que tem a forma

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (7.1)$$

onde x é a variável independente, y é a dependente. Resolver esta equação significa encontrar a função $y(x)$ que a satisfaz, o que na maioria dos casos não é possível de se fazer analiticamente. Os problemas de interesse atualmente em Física envolvem equações diferenciais muito complicadas cujas soluções analíticas são obtidas, na melhor das hipóteses, para aproximações bastante drásticas do problema original, e por isso existe um enorme interesse na obtenção de soluções numéricas. Os métodos que veremos aqui são muito simples mas já servirão para analisar uma série de problemas.

O ponto de partida para todos os métodos de solução numérica é a própria definição de derivada

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad (7.2)$$

O problema de calcular a derivada numericamente está no limite $\Delta x \rightarrow 0$. Como fazer esse limite na prática? O quanto pequeno deve ser Δx para que possamos considerá-lo satisfazendo esse limite? Essas são as questões cruciais aqui. O uso de um Δx finito, embora pequeno, vai trazer um erro no nosso cálculo, e o melhor que se pode fazer é minimizá-lo. Ess problema é muito mais complicado do que parece, primeiro por que existe uma questão de custo-benefício, se Δx é muito pequeno teremos problemas na obtenção de um comportamento para $x \rightarrow \infty$, que é o desejado em muitos casos, e além disso, veremos que a discretização da equação diferencial, ou seja, o uso de (7.2), transforma a equação diferencial em um mapa que pode ter comportamento completamente diferente do desejado.

De um modo geral, podemos classificar os erros computacionais de um determinado método como:

Erros de discretização: Se Δx fosse realmente infinitesimal todos os métodos seriam exatos. Infelizmente um tamanho de passo infinitesimal requereria infinitos passos para varrer um determinado intervalo. A acurácia do cálculo pode ser monitorada se observamos as variações nos valores computados quando o tamanho do passo de Δx para $\frac{1}{2}\Delta x$, por exemplo. A redução do passo melhora a acurácia com relação ao valor teórico (valor obtido pela equação contínua) às custas da execução de mais passos e conseqüentemente mais operações aritméticas.

Erros de truncagem: A origem desse tipo de erro pode ser entendida se observamos o desenvolvimento por série de Taylor de uma função. A série de Taylor nos diz como podemos aproximar o comportamento de uma função $y(x)$ numa vizinhança de tamanho Δx do ponto x_0 , por uma soma de potências de Δx .

$$y(x_0 \pm \Delta x) = y(x_0) \pm \Delta x \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} + \frac{1}{2!}(\Delta x)^2 \left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{x=x_0} \pm \frac{1}{3!}(\Delta x)^3 \left. \frac{d^3y}{dx^3} \right|_{x=x_0} \dots \quad (7.3)$$

Cada termo da série é menor, em módulo, que o anterior. Deste modo se decidirmos parar a soma no segundo termo, por exemplo

$$y(x_0 \pm \Delta x) = y(x_0) \pm \Delta x \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0}. \quad (7.4)$$

O maior termo que estaremos omitindo será da ordem de $(d^2y/dx^2)(\Delta x)^2$, ou seja, um erro $\mathcal{O}((d^2y/dx^2)\Delta x^2)$. Nesta aproximação, estaremos indo do ponto $y(x_0)$ para o ponto $y(x_0 + \Delta x)$ através de uma linha reta que vai de x_0 até $x_0 + \Delta x$. Esta aproximação pode ser adequada se $y(x_0)$ é uma função suave e se o tamanho do passo, Δx , é pequeno o suficiente, mas certamente não é própria para funções que variem muito rapidamente. A solução é considerar termos de ordem mais elevada na expansão de Taylor, o que gera um algoritmo consideravelmente mais complicado.

Erros de arredondamento Toda operação aritmética executada por um computador envolvendo números reais resulta em perda de acurácia devido ao tamanho finito da representação interna dos números reais, como discutido no Capítulo ???. Essa questão é relevante quando milhares ou milhões de operações são realizadas, como quando resolvemos equações diferenciais. Quanto mais operações efetuamos, maior o erro de arredondamento, e este em geral aumenta quando o tamanho do passo diminui ou quando consideramos termos de ordem mais elevada na expansão de Taylor.

Quando desenvolvemos uma solução numérica para uma equação diferencial devemos considerar todos os tipos de erro e procurar otimizar o tamanho do passo que minimiza o erro de uma forma global.

Em termos do algoritmo computacional nosso objetivo é a determinação da seqüência de pares $(x_0, y(x_0))$, $(x_0 + \Delta x, y(x_0 + \Delta x))$, $(x_0 + 2\Delta x, y(x_0 + 2\Delta x))$ etc, o que faremos avançando a posição inicial $(x_0, y(x_0))$ de acordo com um determinado algoritmo. No que se segue, $y(x_i)$ é o valor exato da solução na posição x_i , e y_i é o valor computado.

7.1 O Método de Euler

O método de passo único mais simples é o método de Euler e se baseia na seguinte definição de derivada

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad (7.5)$$

que corresponde a tomar apenas o termo linear da expansão em série de Taylor de $y(x)$. Portanto, é um método $\mathcal{O}(\Delta x)$ e estaremos cometendo um erro de truncagem $\mathcal{O}(f'\Delta x^2)$.

Aqui, Δx é finito, e pode ser usado para se escrever o algoritmo computacional

$$y_{i+1} = y_i + f_i \Delta x \quad (7.6)$$

onde f_i representa a função $f(x, y)$, calculada no ponto inicial do intervalo, (x_i, y_i) .

A representação gráfica de (7.6) pode ser vista na figura 7.1. O cálculo de y_{i+2} vai depender do valor calculado no passo anterior, y_{i+1} , e assim por diante. Chamamos de *processo iterativo* esta forma de cálculo. Note que não há como determinar um valor y_n sem calcular todos os valores y_i anteriores. Em geral precisamos calcular um número muito grande de iterações, assim, o algoritmo deve ser muito eficiente, ou seja envolver o mínimo de operações. Nisso o método de Euler é muito bom, mas o erro é grande e vai acumulando à medida que a solução avança, deixando o método restrito a poucas aplicações.

7.2 Modificações no Método de Euler

A maneira assimétrica de calcular a derivada no método de Euler, usando o valor de $f(x, y)$ no início do intervalo, é problemática. Certamente se tomarmos o valor da derivada no centro do intervalo, ou a média entre os valores tomados em vários pontos do intervalo, teríamos uma melhora no método. Vamos ver duas formas simples de melhorar muito a acurácia, a primeira usando a média dos valores de derivada no início e no fim do intervalo, e depois usando o valor da derivada no ponto central do intervalo.

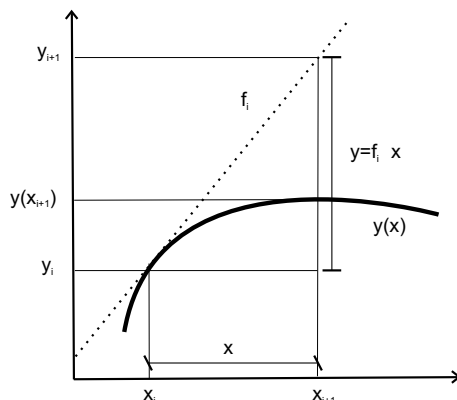


Figura 7.1: Método de Euler para calcular a variação de y_i até y_{i+1} .

Método de Heun

O algoritmo proposto no método de Heun substitui a derivada no início do intervalo, pela média dos valores inicial e final (Fig. 7.2), ou seja

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1})\Delta x \quad (7.7)$$

Note que f_{i+1} depende de y_{i+1} , assim a equação (7.7) não pode ser resolvida diretamente para y_{i+1} . Precisamos fazer uma primeira iteração usando o método de Euler, obtendo uma *estimativa* para y_{i+1} . Veja como fica a seqüência de iterações a partir do valor inicial (x_0, y_0) :

$$\begin{aligned} f_0 &= f(x_0, y_0) \\ y_1 &= y_0 + f(x_0, y_0)\Delta x \rightarrow \text{estimativa pelo método de Euler} \\ x_1 &= x_0 + \Delta x \\ f_1 &= f(x_1, y_1) \\ y_1 &= y_0 + \frac{1}{2}(f_0 + f_1)\Delta x \rightarrow \text{valor final de } y_1 \\ f_1 &= f(x_1, y_1) \rightarrow \text{usando o valor final de } y_1 \\ y_2 &= y_1 + f(x_1, y_1)\Delta x \rightarrow \text{estimativa pelo método de Euler} \\ x_2 &= x_1 + \Delta x \\ f_2 &= f(x_2, y_2) \\ y_2 &= y_1 + \frac{1}{2}(f_1 + f_2)\Delta x \rightarrow \text{valor final de } y_2 \\ \dots & \end{aligned} \quad (7.8)$$

Método do Ponto Central

Neste caso em vez de $y_{i+1} = y_i + f_i\Delta x$ temos

$$y_{i+2} = y_i + f_{i+1}2\Delta x \quad (7.9)$$

onde f_{i+1} é a derivada de $y(x)$ no ponto intermediário x_{i+1} (Fig 7.3. Neste caso, usamos o método de Heun para iniciar o processo. Veja como é o esquema, a partir da condição inicial (x_0, y_0) :

$$\begin{aligned} y_{1a} &= y_0 + f(x_0, y_0)\Delta x = y_0 + (\Delta y)_a \rightarrow \text{primeira estimativa de } y_1 \\ x_1 &= x_0 + \Delta x \end{aligned}$$

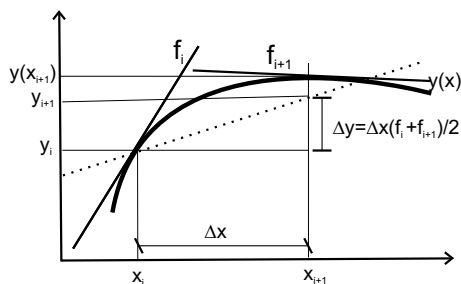


Figura 7.2: Método de Heun para calcular a variação de y_i até y_{i+1} .

$$\begin{aligned}
 f_1 &= f(x_1, y_{1a}) \\
 (\Delta y)_b &= f_1 \Delta x \quad \text{e} \quad y_{1b} = y_0 + \Delta y_b \rightarrow \text{segunda estimativa de } y_1 \\
 \Delta y &= \frac{1}{2} [(\Delta y)_a + (\Delta y)_b] \quad \text{e} \quad y_1 = y_0 + \Delta y \rightarrow \text{valor final de } y_1 \\
 y_2 &= y_0 + f(x_1, y_1) 2\Delta x \\
 x_2 &= x_1 + \Delta x \\
 y_3 &= y_1 + f(x_2, y_2) 2\Delta x \\
 x_3 &= x_2 + \Delta x \\
 y_4 &= y_2 + f(x_3, y_3) 2\Delta x \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{7.10}$$

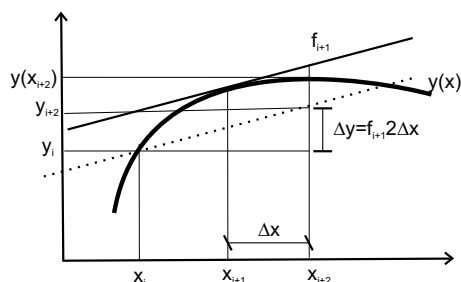


Figura 7.3: Método do ponto central para calcular a variação de y_i até y_{i+2} .

Generalização

A conclusão que tiramos a partir dos métodos de Heun e do ponto central, é que o método de Euler pode ser refinado quando usamos a informação sobre a derivada em pontos intermediários do intervalo, o que significa, como veremos abaixo, levar em conta a curvatura de $y(x)$. Vamos analisar um método generalizado, que toma um ponto intermediário qualquer entre x_i e x_{i+1} , e usa a média ponderada de derivadas, gerando o algoritmo

$$y_{i+1} = y_i + \bar{f} \Delta x, \tag{7.11}$$

onde \bar{f} é determinada pela equação

$$\bar{f} = a f_i + b f_{i'}, \tag{7.12}$$

onde a e b são os pesos e f_i é a derivada calculada no ponto (x_i, y_i) , enquanto que $f_{i'}$ é a derivada calculada em algum ponto intermediário definido como

$$f_{i'} = f(x_i + \alpha \Delta x, y_i + \beta \underbrace{f_i \Delta x}_{\Delta y}) \quad (7.13)$$

onde os parâmetros α e β especificam a posição do ponto intermediário. Os quatro parâmetros devem ser escolhidos de forma a otimizar a acurácia do resultado, e não são totalmente independentes.

A derivada no ponto intermediário pode ser escrita como uma expansão em série de Taylor ao redor do ponto inicial. Mantendo apenas o termo de primeira ordem temos

$$f(x_i + \alpha \Delta x, y_i + \beta \Delta y) = f(x_i, y_i) + \alpha \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i + \beta f_i \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_i + \quad (7.14)$$

Substituindo a expansão (7.14), em (7.12) e levando este resultado em (7.11), obtemos:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x \left[(a+b)f_i + b\alpha \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i, y_i} + b\beta f_i \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x_i, y_i} \right]. \quad (7.15)$$

Considere a solução exata, $y(x)$, expandida em série de Taylor, nas vizinhanças do ponto x_i , até a segunda ordem:

$$\begin{aligned} y(x_i + \Delta x) &= y(x_i) + \Delta x \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_i} + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left. \frac{d^2 y}{dx^2} \right|_{x_i} \\ &= y(x_i) + \Delta x \left[f[x_i, y(x_i)] + \frac{1}{2} \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} \right]. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Mas

$$\frac{df(x, y)}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{dy}{dx} \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial x} + f(x, y) \frac{\partial f}{\partial y}. \quad (7.17)$$

Substituindo (7.17) em (7.16) temos

$$y(x_i + \Delta x) = y(x_i) + \Delta x \left[f[x_i, y(x_i)] + \frac{1}{2} \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i} + \frac{1}{2} \Delta x f[x_i, y(x_i)] \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x_i} \right] \quad (7.18)$$

Quando comparamos a expressão (7.15) com (7.18) vemos que, para que as duas sejam equivalentes, os parâmetros a , b , α e β estão relacionados:

$$\begin{aligned} a + b &= 1 \\ \alpha b &= \beta b = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (7.19)$$

São três equações e quatro incógnitas por isso temos liberdade em escolher os parâmetros. Uma escolha possível é

$$a = 0 \quad b = 1 \quad \alpha = \beta = \frac{1}{2} \quad (7.20)$$

que resulta num algoritmo idêntico ao do método do ponto central discutido anteriormente. A escolha que leva ao algoritmo do método de Heun é

$$a = b = \frac{1}{2} \quad \alpha = \beta = 1 \quad (7.21)$$

Verificamos assim que os dois algoritmos incluem termos $\mathcal{O}(f' \Delta x^2)$ no cálculo de y_{i+1} , evidenciando o fato que levam em conta a concavidade da solução melhorando consideravelmente a acurácia da solução calculada. Esses métodos também são conhecidos como métodos de Runge-Kutta de segunda ordem.

7.3 Representação do movimento no espaço de fase

Os métodos acima podem ser generalizados para um sistema descrito por qualquer número de variáveis se usamos a notação vetorial, definindo como \vec{S} o estado do sistema. Por exemplo, num movimento unidimensional, a componente S_1 pode ser a posição, e S_2 a velocidade. Num movimento bidimensional, S_1 e S_2 podem ser as coordenadas x e y , e S_3 e S_4 as respectivas componentes da velocidade. Com essa generalização, a equação (7.1) é escrita como

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{f}(\vec{S}, x) \quad (7.22)$$

A definição das componentes de \vec{S} não é única, e em geral é feita através da utilização de grandezas físicas, tais como posição e velocidade. O vetor \vec{S} define um ponto, ou um estado do sistema, no que chamamos *espaço de fase*. A evolução temporal de um sistema corresponde à trajetória desse ponto no espaço de fase multidimensional.

A definição do espaço de fase permite que possamos escrever uma equação diferencial de ordem mais elevada como um sistema de equações acopladas, na forma (7.22). Vejamos como fazer isso, usando um exemplo bem conhecido, o oscilador harmônico simples (OHS). O sistema é o corpo que está oscilando ao longo de uma linha, por exemplo pela compressão e descompressão de uma mola. Seu estado é caracterizado pelos valores de posição, x , e velocidade, v . Conhecemos a equação do OHS na forma de equação diferencial de segunda ordem para uma variável escalar [1],

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0, \quad (7.23)$$

onde ω é a frequência natural do oscilador. Esta equação tem como solução uma função harmônica, e pode ser escrita como

$$x(t) = A \cos(\omega t + \phi), \quad (7.24)$$

onde A é a amplitude do movimento e ϕ a constante de fase. Não estamos interessados em variar ω portanto vamos eliminar esse parâmetro redefinindo a escala de tempo: $t' = \omega t$. Nessa escala adimensional o tempo é medido em unidades do período, τ , dividido por 2π . Por exemplo, se $t' = 1$, o tempo decorrido foi $\tau/2\pi$. Abandonando a linha do nome da variável temos,

$$\frac{d^2x}{dt^2} + x = 0, \quad (7.25)$$

e $x(t) = A \cos(t + \phi)$. Para usar os métodos descritos neste capítulo, precisamos escrever a equação (7.25) na forma de duas equações de primeira ordem. Isso pode ser feito com a definição:

$$\frac{dx}{dt} = -v, \quad (7.26)$$

que quando substituída em (7.25) leva a

$$\frac{dv}{dt} = x. \quad (7.27)$$

As duas equações acima podem ser escritas de forma compacta usando uma notação vetorial:

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{f}(\vec{S}) \quad \text{ou seja,} \quad \frac{dS_1}{dt} = f_1(S_1, S_2) = -S_2 \quad \text{e} \quad \frac{dS_2}{dt} = f_2(S_1, S_2) = S_1, \quad (7.28)$$

onde $S_1 \equiv x$ e $S_2 \equiv v$. A determinação das condições iniciais nos diz em que ponto do plano xv o movimento começa, e a evolução temporal do sistema será dada pela seqüência de pares (x, v) , gerando uma trajetória. Neste caso temos que $x^2 + v^2 = A^2$, logo a trajetória no espaço de fase será um círculo de raio A determinado pela condição inicial. A escolha do sinal em (7.26) faz com que o círculo seja percorrido no sentido anti-horário, ou trigonométrico (confira!).

7.4 Escolha do passo de discretização

Em qualquer método usado, a escolha do valor de Δx deve ser feita com muito critério. Uma regra ótima para uma primeira estimativa é que $\Delta x \approx X/100$, onde X é um valor característico de x para o sistema. Aqui estaremos associando a variável independente ao tempo, então $\Delta x = \Delta t$, que é um pequeno intervalo de tempo, e seu valor pode ser escolhido através da estimativa de um tempo característico T . Por exemplo, para o OHS esse tempo característico é o período. Claro que nesse caso sabemos exatamente o valor de T , se tivermos um oscilador qualquer, podemos considerar o valor de T para um OHS similar, ou fazer uma primeira determinação numérica grosseira. A sensibilidade com o Δt escolhido pode ser verificada variando seu valor e analisando como o resultado foi afetado. Veja na figura 7.4 como a escolha errada do passo de discretização pode levar a conclusões equivocadas.

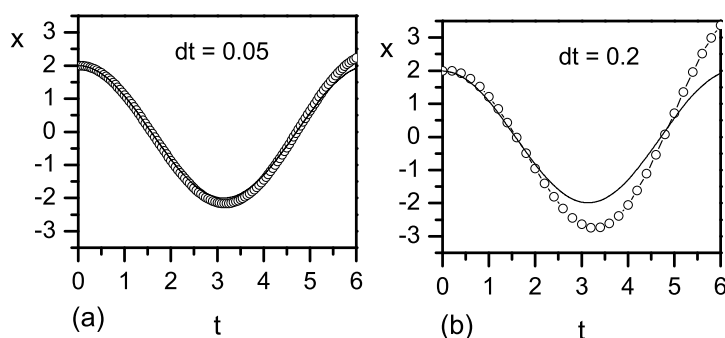


Figura 7.4: Comparação entre a solução analítica (linha contínua) e a numérica obtida pelo método de Euler (círculos), para um oscilador harmônico de período 2π . (a) dt é da ordem de $2\pi/100$, e a concordância é razoável, e (b) dt é grande demais, a solução numérica não parece conservar a energia mecânica.

7.4.1 Instabilidade por discretização

Talvez o pior problema a ser enfrentado na solução numérica de equações diferenciais é a possibilidade de alteração de estabilidade da solução pelo processo de discretização. Em poucas palavras, a discretização de uma equação diferencial transforma um problema contínuo em discreto, e não há qualquer garantia que o tipo de solução dos dois seja a mesma. Vamos ver um exemplo clássico desse problema, a discretização da equação logística.

Um modelo simples para a evolução temporal de uma determinada população foi proposto por Verhulst em 1838, levando em conta uma correção ao modelo de Malthus (1798) que previa um crescimento exponencial da população. No modelo de Verhulst, há um termo que limita o valor máximo da população, representando todos os efeitos já observados em caso de superpopulação, ou seja, epidemias e fome. A equação resultante (equação logística) tem a forma

$$\frac{dp}{dt} = kp(1 - p), \quad (7.29)$$

e tem como solução a função sigmoidal

$$p(t) = \frac{p_0 e^{kt}}{1 + p_0(e^{kt} - 1)}, \quad (7.30)$$

onde k é um parâmetro que combina o efeito da reprodução e da limitação da população, e p fica definida entre 0 e 1, ou seja, p representa a população normalizada pelo maior valor possível para a espécie, devido à

toxicidade mútua ou à falta de nutrientes. A função (7.30) é bem comportada, sua forma para diversos valores de k pode ser vista na figura 7.5. É fácil verificar que a solução (7.30) tem um comportamento razoável: para $p \ll 1$ a população tem uma taxa de crescimento alta, mas à medida que se aproxima de 1, chegando perto da saturação, o crescimento passa a ser muito lento, mostrando uma auto-regulagem do sistema. Se a equação (7.29) for discretizada pelo método de Euler, teremos a seguinte expressão:

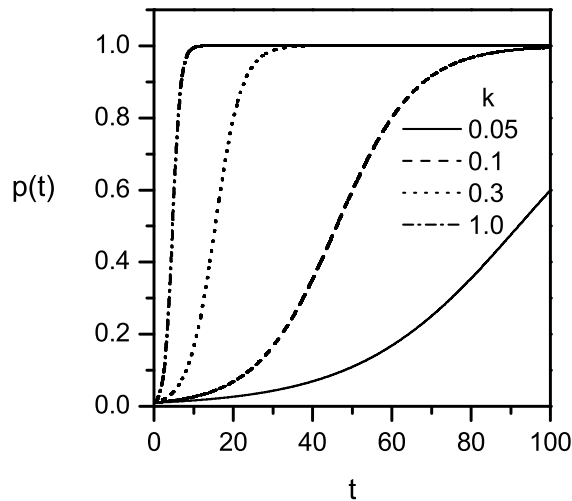


Figura 7.5: Comportamento da solução (7.30) para diversos valores de k .

$$p(t + dt) = p(t) + kp(t)[1 - p(t)]dt. \tag{7.31}$$

Dependendo do valor de $c = k dt$ a seqüência de valores $p(0)$, $p(dt)$, $p(2dt)$, etc, pode ser completamente diferente da solução contínua. Por exemplo, a figura 7.6 mostra a solução a partir de (7.31) para $c = 3.0$, com $dt = 0.5$ e $k = 6$.

A discretização de uma equação diferencial a transforma em um *mapa*, um sistema dinâmico capaz de

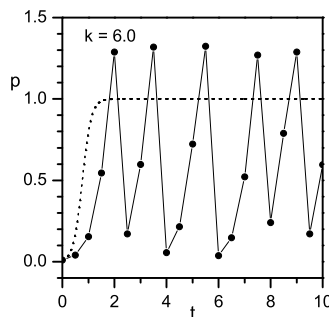


Figura 7.6: Comportamento da solução (7.31) para $k = 6$ e $dt = 0.5$, que resulta em $c = 3$. A linha tracejada corresponde à expressão (7.30) para $k = 6$.

apresentar caos em uma dimensão. Para que uma equação diferencial apresente caos, é preciso que seja pelo

menos de terceira ordem. As primeiras observações de caos determinístico foram feitas exatamente durante o processo de discretização de equações diferenciais [2, 3, 4, 5].

7.5 Exercícios

1. Embora possa ser resolvida analiticamente, a equação de movimento do oscilador harmônico é ótima para testar os métodos apresentados no capítulo.

(a) Escreva programas para obter os valores (x, v) e (x, t) para a equação (7.25) pelos métodos de Euler, Heun e ponto central. O cálculo de \vec{f} deve ser feito com a função

```
void f(float *X, float *F)
{
    F[0] = -X[1];
    F[1] = X[0];
}
```

(b) Faça os gráficos de $x(t)$ obtido pelos métodos acima usando o mesmo valor de dt . Comente os resultados.

(c) Construa o gráfico da trajetória no espaço de fase para os três métodos.

(d) Considere agora que o movimento é amortecido. Repita o item 1c para

$$\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + x = 0, \quad (7.32)$$

para os casos de amortecimento crítico, subcrítico e supercrítico.

Bibliografia

- [1] H. Moysés Nussenzveig. *Curso de Física Básica 2*. Edgard Blucher, 1983.
- [2] P. Collet and J-P. Eckmann. *Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems*. Birkhauser, 1980.
- [3] E. A. Jackson. *Perspectives of nonlinear dynamics*, volume 1. Cambridge, 1989.
- [4] H. Moysés Nussenzveig, editor. *Complexidade e Caos*. Editora UFRJ/COPEA, 1999.
- [5] P. M. Castro de Oliveira. Sistemas complexos. *Ciência Hoje*, 16:35, 1994.