Métodos numéricos para resolução de EDOs

Exercício Computacional
MAP3122 - Quadrimestral 2021
Prof. Antoine Laurain

Este exercício computacional deve ser feito em duplas. Veja as instruções detalhadas no final do texto.

1 Introdução - Método de Euler implícito

Consideramos o sistema de EDOs não linear seguinte:

$$x'(t) = f_1(t, x(t), y(t)) \tag{1}$$
$$y'(t) = f_2(t, x(t), y(t)) \tag{2}$$

para $t \in [T_0, T_f]$, com condições iniciais $u(0) = (x_0, y_0)$. Podemos também escrever o sistema (1)-(2) usando uma notação vetorial:

$$u'(t) = F(t, u(t)) \tag{3}$$

com

$$u(t) \coloneqq \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} \text{ e } F(t, u(t)) \coloneqq \begin{pmatrix} f_1(t, x(t), y(t)) \\ f_2(t, x(t), y(t)) \end{pmatrix}.$$

Para $n \in \mathbb{N}$ dado, escolhemos uma discretização uniforme $t_k = T_0 + kh$ de $[T_0, T_f]$, onde $h = (T_f - T_0)/n$ e $k \in \{1, 2, \ldots, n\}$. Usando a notação vetorial (3), o método de Euler implícito é definido de maneira semelhante ao caso escalar:

$$u_{k+1} = u_k + hF(t_{k+1}, u_{k+1}), \tag{4}$$

ou de maneira equivalente, sem usar a notação vetorial,

$$x_{k+1} = x_k + hf_1(t_{k+1}, x_{k+1}, y_{k+1}), \tag{5}$$
$$y_{k+1} = y_k + hf_2(t_{k+1}, x_{k+1}, y_{k+1}). \tag{6}$$

Para calcular u_{k+1}, precisamos resolver a equação vetorial seguinte:

$$G(u_{k+1}) = 0, \tag{7}$$

com $G(u_{k+1}) \coloneqq u_{k+1} - hF(t_{k+1}, u_{k+1}) - u_k$. Se a função F for não-linear, então a equação (7) é não-linear na variável u_{k+1}.

Podemos usar o método de Newton para calcular uma aproximação de u_{k+1}. Escolhendo uma aproximação inicial $u_{k+1}^{(0)}$, a iteração de Newton é definida por

$$u_{k+1}^{(\ell+1)} = u_{k+1}^{(\ell)} - [J(t_{k+1}, u_{k+1}^{(\ell)})]^{-1} G(t_{k+1}, u_{k+1}^{(\ell)}) \tag{8}$$

onde $u_{k+1}^{(\ell)}$ denota o valor da aproximação na iteração ℓ e

$$J(t, x, y) = \begin{pmatrix} 1 - h\frac{\partial f_1}{\partial x}(t, x, y) & -h\frac{\partial f_1}{\partial y}(t, x, y) \\ -h\frac{\partial f_2}{\partial x}(t, x, y) & 1 - h\frac{\partial f_2}{\partial y}(t, x, y) \end{pmatrix}$$

é a matriz Jacobiana da função G. Para escolher uma aproximação inicial, a opção mas simples é de escolher $u_{k+1}^{(0)} = u_k$. Uma outra possibilidade é de escolher $u_{k+1}^{(0)}$ usando um passo de Euler explicito a partir de u_k, o que é fácil de calcular. Escolha um número máximo de iterações para o método de Newton. Se a discretização do intervalo $[T_0, T_f]$ for suficientemente fina, apenas algumas iterações de Newton devem ser necessárias para alcançar uma precisão alta, tipicamente da ordem 10^{-15} ou 10^{-16}. Verifique se você realmente obtém essa precisão com seu passo de Newton.

Observe que em (8), precisamos calcular o inverso da matriz Jacobiana $J(t_{k+1}, u_{k+1}^{(\ell)})$. Na prática, o custo computacional para calcular a matriz inversa pode ser alto, nesse caso resolvemos o sistema linear seguinte em vez de calcular a matriz inversa:

$$J(t_{k+1}, u_{k+1}^{(\ell)})(u_{k+1}^{(\ell+1)} - u_{k+1}^{(\ell)}) = -G(t_{k+1}, u_{k+1}^{(\ell)}). \tag{9}$$

No caso da equação de Lotka-Volterra no Exercício 2, a matriz Jacobiana é apenas de dimensão 2×2, então a matrix inversa tem uma forma explicita simples e não precisamos resolver (9). Assim, podemos usar (8) direitamente.

2 Exercício 1 - Testes

O objetivo deste exercício é de verificar se sua implementação de RK4 e Euler implicito esta funcionando em caso simples onde uma solução explícita é conhecida. Nestes testes, para $n \in \mathbb{N}$ dado, escolhemos uma discretização uniforme $t_k = T_0 + kh$ de $[T_0, T_f]$, onde $h = (T_f - T_0)/n$ e $k \in \{1, 2, \ldots, n\}$, isto é, dividimos o intervalo $[T_0, T_f]$ em n subintervalos de mesmo tamanho.

1. **Teste Runge-Kutta 4.** Considere a equação $x'(t) = f(t, x(t))$ no intervalo $[0, 2]$ com $x(0) = (1, 1, 1, -1) \in \mathbb{R}^4$ e $f(t, x(t)) = Ax(t)$, onde $A \in \mathbb{R}^{4\times 4}$ é uma matriz dada por

$$A = \begin{pmatrix} -2 & -1 & -1 & -2 \\ 1 & -2 & 2 & -1 \\ -1 & -2 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

   Esta EDO tem a solução explícita seguinte:

$$x^\star(t) = \begin{pmatrix} e^{-t}\sin(t) + e^{-3t}\cos(3t) \\ e^{-t}\cos(t) + e^{-3t}\sin(3t) \\ -e^{-t}\sin(t) + e^{-3t}\cos(3t) \\ -e^{-t}\cos(t) + e^{-3t}\sin(3t) \end{pmatrix}.$$

   Definimos o erro $E_{1,n}(t) \coloneqq \max_{1\le i\le 4} |x_i^\star(t) - x_i(t)|$, onde $x(t)$ é a solução calculada com RK4 usando a subdivisão de $[0, 2]$ em n subintervalos de mesmo tamanho. Para cada valor $n = 20, 40, 80, 160, 320$, calcule a solução numérica $x(t)$ desta EDO usando RK4, calcule e plote $E_{1,n}(t)$ no relatório. Chamando $n_1 = 20, n_2 = 40, n_3 = 80, n_4 = 160, n_5 = 320, n_6 = 640$, calcule

$$R_i \coloneqq \frac{\max_{t\in[0,2]} E_{1,n_i}(t)}{\max_{t\in[0,2]} E_{1,n_{i+1}}(t)} \text{ para } i = 1, 2, 3, 4, 5,$$

   e interpreta o resultado.

2. **Teste Euler implícito.** Considere a equação $x'(t) = F(t, x(t))$ no intervalo $[1.1, 3.0]$ com $x(1.1) = -8.79$ e $f(t, x) = 2t + (x - t^2)^2$. A solução explícita desta equação é $x^\star(t) = t^2 + \frac{1}{1-t}$. Definimos o erro $E_2(t) \coloneqq |x^\star - x|$, onde $x(t)$ é a solução calculada com o método numérico. Resolva esta EDO usando o método de Euler implícito para $n = 5000$ e plote em três figuras, lado ao lado, a solução explícita $x^\star(t)$, a solução numérica $x(t)$ e o erro $E_2(t)$ no relatório. O método de Euler implícito para este problema é semelhante ao padrão descrito na Seção 1. A diferença principal é que a matriz Jacobiana $J(t, x) = G'(t, x)^{-1}$ é apenas uma função com valores escalares neste teste de dimensão um. No método de Newton, 7 passos de Newton (isto é, na equação (8)) são suficientes para atingir uma precisão razoável para calcular x_{k+1}.

3 Exercício 2 - Modelo presa-predador

Vamos considerar um ambiente em que convivam duas espécies, uma que se alimenta dos recursos naturais (digamos, uma população de coelhos) e uma segunda espécie que se nutre basicamente da primeira

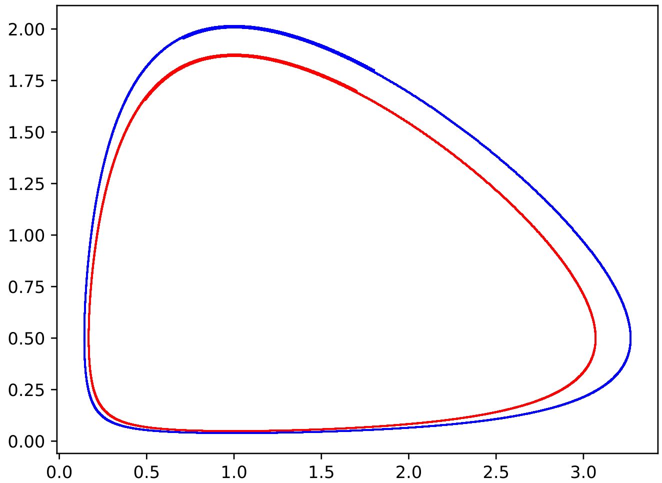

Figura 1: Um exemplo de dois retratos de fase. Um retrato de fase é uma curva paramétrica $(x(t), y(t))$ para $t \in [T_0, T_f]$. Nesta figura são plotados dois retratos de fase (uma curva azul e uma curva vermelha) para a solução do problema (10)-(11). Os dois retratos de fase correspondem aos mesmos parâmetros $\lambda, \alpha, \beta, \gamma$, mas as condições iniciais $x(0), y(0)$ são diferentes para cada curva.

espécie (digamos, uma turma de raposas que se alimenta dos coelhos). O clássico modelo presa- predador, conhecido como modelo de Lotka-Volterra, considera recursos ilimitados, ou seja, na ausência do predador, a população de suas presas apresentaria crescimento exponencial.

As equações são dadas por:

$$x'(t) = \lambda x(t) - \alpha x(t)y(t) \tag{10}$$
$$y'(t) = \beta x(t)y(t) - \gamma y(t) \tag{11}$$

onde $x(t)$ representa os coelhos e $y(t)$ as raposas, e os parâmetros aparecendo nas equações são todos constantes e positivos. Neste caso, se inicialmente houver membros das duas espécies no ambiente, o tamanho das respectivas populações irá variar periodicamente no tempo. Isto significa que o retrato de fase será composto por órbitas periódicas, como ilustrado na Figura 1. O *retrato de fase* é a curva paramêtrica $(x(t), y(t))$ para $t \in [T_0, T_f]$; ver um exemplo na Figura 1.

Neste exercício usaremos os parâmetros seguintes:

$$\lambda = \frac{2}{3}, \quad \alpha = \frac{4}{3}, \quad \beta = 1, \quad \gamma = 1, \quad x(0) = 1.5, \quad y(0) = 1.5, \quad [T_0, T_f] = [0, 10.0].$$

Para $n \in \mathbb{N}$ dado, escolhemos uma discretização uniforme $t_k = T_0 + kh$ de $[T_0, T_f]$, onde $h = (T_f - T_0)/n$ e $k \in \{1, 2, \dots, n\}$, isto é, dividimos o intervalo $[T_0, T_f]$ em n subintervalos de mesmo tamanho.

1. Escreva um código para resolver (10)-(11) usando o método de Euler explícito. Você deve plotar um gráfico do retrato de fase. Faça também uma outro gráfico mostrando simultaneamente o tamanho de cada população ao longo do tempo (plote as raposas em vermelho e os coelhos em azul). Use um valor $n \geq 5000$.

2. Escreva um código para resolver (10)-(11) usando o método de Euler implícito. Você deve plotar um gráfico do retrato de fase. Faça também uma outro gráfico mostrando simultaneamente o tamanho de cada população ao longo do tempo (plote as raposas em vermelho e os coelhos em azul). Use um valor $n \geq 500$.

3. Sejam $x_{im}(t), y_{im}(t)$ e $x_{ex}(t), y_{ex}(t)$ as soluções usando o método de Euler implícito e explícito, respectivamente. Vamos definir $E_x(t) := x_{im}(t) - x_{ex}(t)$, $E_y(t) := y_{im}(t) - y_{ex}(t)$. Para cada valor $n = 250, 500, 1000, 2000, 4000$, plote um gráfico com a função $E_x(t)$ em azul e a função $E_y(t)$ em vermelho. Comente brevemente o resultado.

4. Escreva um código para resolver (10)-(11) usando o método de Runge-Kutta 4. Você deve plotar um gráfico do retrato de fase. Faça também uma outro gráfico mostrando simultaneamente o

tamanho de cada população ao longo do tempo (plote as raposas em vermelho e os coelhos em azul). Use um valor $n \geq 500$.

Observação: Para comparar os resultados obtidos com os três métodos numéricos, pode colocar todos os gráficos e retratos de fase das questões 1,2 e 4 em uma figura só (do tamanho de uma página) com 6 subfiguras. Caso decida proceder desta forma, não se esqueça de indicar nas legendas a qual caso cada subfigura corresponde.

4 Exercício 3 - Modelo duas presas-um predador

Vamos considerar agora que mais uma espécie conviva com os coelhos e as raposas, digamos uma população de lebres que também se alimente apenas dos recursos naturais. Ou seja, coelhos e lebres estarão competindo pelos mesmos recursos. Por outro lado, as raposas poderão se alimentar tanto de coelhos como de lebres. A equação do modelo pode ser posta na forma:

$$x'(t) = x(t)(B_1 - A_{1,1}x(t) - A_{1,2}y(t) - A_{1,3}z(t)) \tag{12}$$
$$y'(t) = y(t)(B_2 - A_{2,1}x(t) - A_{2,2}y(t) - A_{2,3}z(t)) \tag{13}$$
$$z'(t) = z(t)(B_2 - A_{3,1}x(t) - A_{3,2}y(t)) \tag{14}$$

onde $x(t)$ representa os coelhos, $y(t)$ as lebres e $z(t)$ as raposas. Nesta forma os coeficientes B_i e $A_{i,j}$ são positivos para $i = 1$ e $i = 2$, enquanto para $i = 3$ são negativos (Tente entender o significado dos sinais destes coeficientes em relação ao modelo presa-predador tendo em vista as equações (12)-(14)). Note que o modelo acima engloba todos os modelos já apresentados. Na ausência de raposas (seria o caso $z(t) = 0$ para todo t), temos um modelo de competição entre lebres e coelhos. Na ausência de lebres ou coelhos, temos o modelo presa-predador visto no Exercício 2. Tanto as lebres como as raposas experimentam crescimento do tipo logístico na ausência das outras espécies. Procure interpretar o papel de cada termo nas equações. Veremos que a dinâmica deste modelo pode ser bastante complexa.

Neste exercício vamos considerar os seguintes parâmetros para o modelo com duas presas e um predador:

$$B = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 1.0 \\ -1.0 \end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} 0.001 & 0.001 & 0.015 \\ 0.0015 & 0.001 & 0.001 \\ -\alpha & -0.0005 & 0.0 \end{pmatrix}$$

com $0.001 \leq \alpha \leq 0.0055$.

Com esta escolha de parâmetros temos que os coelhos irão levar vantagem sobre as lebres quando há poucas raposas. No entanto, as raposas se nutrem melhor de coelhos do que de lebres. O objetivo desse exercício computacional é estudar esse modelo de competição fazendo variações nos parâmetros do modelo. Para tanto você irá usar os métodos de Euler explícito e Runge-Kutta 4. Para $n \in \mathbb{N}$ dado, escolhemos uma discretização uniforme $t_k = T_0 + kh$ de $[T_0, T_f]$, onde $h = (T_f - T_0)/n$ e $k \in \{1, 2, \ldots, n\}$, isto é, dividimos o intervalo $[T_0, T_f]$ em n subintervalos de mesmo tamanho. Em todos os casos teremos $T_0 = 0$ e usaremos $n \geq 5000$.

- Analise o comportamento do retrato de fase do modelo com relação ao parâmetro α, escolhendo os valores 0.001, 0.002, 0.0033, 0.0036, 0.005 e 0.0055. Inicie com 500 coelhos, 500 lebres e 10 raposas. Nos dois primeiros casos, use $T_f = 100$, nos dois seguintes $T_f = 500$ e nos dois últimos $T_f = 2000$. Determine os casos em que há órbitas periódicas, equilíbrios estáveis ou instáveis.

- Para cada caso você deve fazer gráficos do retrato de fase (ou seja um gráfico 3D cujos eixos são o número de coelhos, lebres e raposas e cada ponto do gráfico se refere a um instante de tempo da integração - existem funções simples usando o pacote `matplotlib` para plotar curvas paramétricas em 3D; ver a Figura 2 para um exemplo de retrato de fase em 3D - não esquecer de colocar os nomes dos eixos). Para melhor visualização, plote também gráficos dos retratos de fase em 2D (um gráfico para coelhos x lebres, um gráfico para coelhos x raposas, um gráfico para lebres x raposas). Faça também um gráfico mostrando simultaneamente o tamanho das três populações ao longo do tempo (plote as raposas em vermelho, os coelhos em azul e os lebres em preto, e coloque legendas para todos os gráficos).

- Teste a sensibilidade em relação aos valores iniciais quando $\alpha = 0.005$, executando o modelo até $T_f = 400$ iniciando com 37 coelhos, 75 lebres e 137 raposas. Imprima o número de raposas, lebres e coelhos no instante final. Repita o mesmo experimento, trocando apenas o número inicial de lebres de 75 para 74. Compare os valores finais e a evolução das três populações nos dois casos.

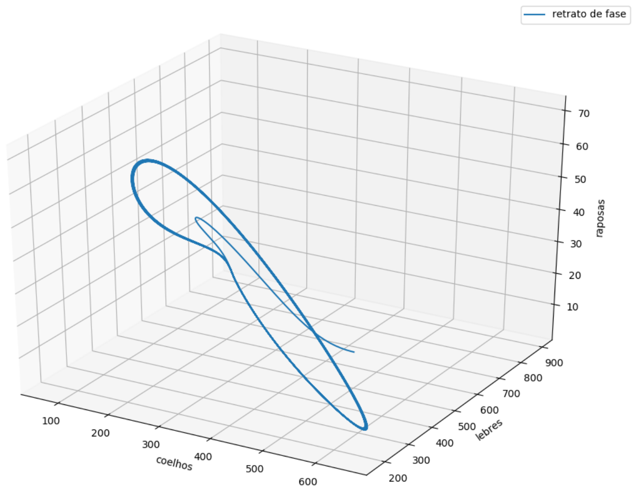

Figura 2: Um exemplo de retrato de fase em 3D para o modelo duas presas-um predador. O retrato de fase é a curva paramétrica $(x(t), y(t), z(t))$ para $t \in [T_0, T_f]$ onde $(x(t), y(t), z(t))$ é a solução de (12)-(14).

5 Instruções

- O exercício deve ser feito em duplas. Apenas um aluno da dupla, o primeiro em ordem alfabética, deve entregar o exercício, destacando no relatório e no programa o nome de ambos os alunos.
- O programa deverá ser escrito em Python 3.x. e deve ser devidamente comentado e bem estruturado. A entrada e a saída deverão ser feitas de forma a ajudar o usuário a executar o programa e devem facilitar a análise dos resultados. Se o seu programa precisa de arquivos de entrada, considere que os mesmos encontram-se na mesma pasta do executável, ou faça de forma que solicite o caminho/nome do arquivo ao usuário.
- Para facilitar a correção, escreve um código para cada exercício e chama os arquivos de `exercicio1.py`, `exercicio2.py` e `exercicio3.py`. Vocês podem definir também um outro arquivo (pode chamar de `metodos.py`) contendo funções que são chamadas em varias questões (por exemplo pode conter uma função que implementa o método RK4, uma outra função que implementa o método de Euler explícito, etc ...). Os vários casos que aparecem nas questões podem ser separados usando `if .. elif .. else`.
- Será usada a biblioteca `matplotlib` para as plotagens.
- As análises e resultados obtidos devem ser organizados em um relatório que deve minimamente discutir os problemas estudados e os resultados obtidos. A entrega deverá conter um relatório (no formato .pdf), contendo a análise do problema estudado e as figuras, e os códigos usados para as simulações computacionais. A entrega também deverá ser feita em um arquivo compactado único (por exemplo um arquivo `zip`).
- O uso de LaTeX para escrever o relatório é fortemente incentivado. Os relatórios escritos em Latex receberão um bônus de 5% da nota final.

Critérios de Correção

- Exercício 1 (2 pts)
- Exercício 2 (3 pts)
- Exercício 3 (3 pts)
- Código bem documentado: comentários, legibilidade. (1 pts)
- Qualidade do relatório (relevância dos comentários e apresentação geral). (1 pts)

- Uso de LaTeX(+5% da nota final)
- Será verificado se o programa entregue roda e produz saídas consistentes com os resultados apresentados no relatório.
- Em caso de atraso de até 48h, -2 pontos. Após isso, o EP não será aceito.