

ALYSSON ALEXANDER NAVES SILVA

ANÁLISE NUMÉRICA DE SISTEMAS DINÂMICOS

Monografia de Graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Lavras
Minas Gerais - Brasil
2007

ALYSSON ALEXANDER NAVES SILVA

ANÁLISE NUMÉRICA DE SISTEMAS DINÂMICOS

Monografia de Graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Área de Concentração:

Matemática Computacional

Orientador:

Prof. Dra. Iraziet da Cunha Charret

Lavras

Minas Gerais - Brasil

2007

**Ficha Catalográfica preparada pela Divisão de Processos Técnicos
da Biblioteca Central da UFLA**

Silva, Alysson Alexander Naves

Análise Numérica de Sistemas Dinâmicos / Alysson Alexander Naves Silva. Lavras - Minas Gerais, 2007. 76p : il.

Monografia de Graduação - Universidade Federal de Lavras. Departamento de Ciência da Computação.

1. Matemática Computacional. 2. Análise Numérica. 3. Sistemas Dinâmicos. I. SILVA, A.A.N. II. Universidade Federal de Lavras. III. Análise Numérica de Sistemas Dinâmicos.

ALYSSON ALEXANDER NAVES SILVA

ANÁLISE NUMÉRICA DE SISTEMAS DINÂMICOS

Monografia de Graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Aprovada em 07 de agosto de 2007

Prof. Msc. Rudini Menezes Sampaio

Prof. Dr. Onofre Rojas Santos

Prof. Dra. Iraziet da Cunha Charret
(Orientadora)

Lavras
Minas Gerais - Brasil

Dedico, com carinho, aos meus pais, Edna e João.

E a minha amada namorada Stefânia.

Agradecimentos

Nunca realizamos um trabalho solitário, pois sempre somos auxiliados, seja com idéias, com compreensão, com conselhos sinceros ou com o silêncio caridoso. Por isso agradeço:

Aos meus pais, Edna e João, por me mostrarem que o maior patrimônio de um ser humano é a educação.

Minhas irmãs, Andressa e Alessandra, pelo carinho, amizade e confiança.

A minha avó Nair, 81 anos de muitas risadas e vontade de viver, sempre levantando o astral de quem está ao seu lado.

A Stefânia, por ter sido a minha grande companheira nesta fase da vida. Obrigado Stê.

Agradeço especialmente a minha professora e orientadora, Iraziet, que com sabedoria e paciência soube me conduzir até aqui. Obrigado.

Resumo

A análise numérica é uma ferramenta muito eficaz no estudo do comportamento de sistemas dinâmicos. Como exemplo, foram estudados dois sistemas de dinâmica populacional modelados através de equações diferenciais ordinárias e de equações diferenciais parciais, que não possuem soluções analíticas. Inicialmente foram utilizados os métodos de Euler de primeiro ponto e Runge-Kutta de quarta ordem, que são respectivamente $O(h)$ e $O(h^2)$, para resolver numericamente o sistema de equações diferenciais ordinárias. Como os métodos numéricos utilizados para equações diferenciais ordinárias não se aplicam a equações diferenciais parciais, foram utilizados métodos explícitos e de Crank-Nicholson. Foram feitas comparações entre os resultados obtidos através dos métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias e verificado qual método numérico é o mais apropriado. O mesmo processo foi realizado para comparar qual método numérico é mais eficiente para se resolver equações diferenciais parciais.

Abstract

The numerical analysis is a very efficient tool in the study of the behavior of dynamic systems. We have studied two systems of population dynamics modeled through ordinary differential equations and partial differential equations that do not possess analytic solutions. Initially, Euler's first point method and Runge-Kutta of fourth order were used, they take $O(h)$ and $O(h^2)$, for solving numerically the system of ordinary differential equations. As the numerical approaches utilized for ordinary differential equations do not apply to partial differential equations, explicit approaches and Crank-Nicholson were used for such equations. We made comparisons between the results obtained through the numerical approaches for ordinary differential equations and verified which numerical approach is the most appropriate one. The same process was carried out to detect which numerical approach is more efficient in solving partial differential equations.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	3
2.1	Introdução	3
2.1.1	Classificação das equações diferenciais	3
2.2	Equações diferenciais ordinárias de primeira ordem	5
2.2.1	Equações diferenciais de variáveis separáveis	5
2.2.2	Equações diferenciais exatas	6
2.2.3	Equações diferenciais lineares	7
2.2.4	Equações diferenciais autônomas	7
2.3	Equações diferenciais ordinárias de segunda ordem	8
2.3.1	Equações diferenciais homogêneas	8
2.3.2	Existência e unicidade da solução	10
2.3.3	Equações diferenciais não-homogêneas	11
2.4	Sistemas de equações diferenciais lineares	12
2.4.1	Sistemas lineares homogêneos	13
2.5	Estabilidade em sistemas lineares	15
2.6	Equações diferenciais parciais	17
2.6.1	Problemas de equilíbrio	17
2.6.2	Problemas transientes	18
3	ANÁLISE NUMÉRICA	22
3.1	Introdução	22
3.1.1	Algoritmos	23
3.2	Etapas na solução numérica de um problema	24
3.2.1	Definição do problema	24
3.2.2	Modelagem matemática	24

3.2.3	Solução numérica	24
3.2.4	Análise dos resultados	25
3.3	Erros	25
3.4	Aproximação por diferenças finitas	27
3.4.1	Expansões em série de Taylor	29
3.5	Métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias	33
3.5.1	Método de Euler	33
3.5.2	Métodos de Runge-Kutta	38
3.5.3	Consistência, convergência e estabilidade	41
3.6	Métodos numéricos para equações diferenciais parciais	43
3.6.1	Discretização de equações diferenciais estacionárias	44
3.6.2	Discretização temporal	46
3.6.3	Método de Crank-Nicholson	49
3.6.4	Discretização bidimensional	50
4	SISTEMAS PRESA-PREDADOR SEM DIFUSÃO	53
4.1	Modelo Presa-Predador	53
4.2	Solução numérica do Modelo de Lotka-Volterra	55
5	SISTEMAS PRESA-PREDADOR COM DIFUSÃO	62
5.1	Difusão unidimensional	63
5.1.1	Modelo contínuo	63
5.2	Discretizações unidimensionais	64
5.2.1	Euler explícito	64
5.2.2	Crank-Nicholson	64
5.3	Resultados	65
5.3.1	Euler explícito X Crank-Nicholson	65
5.3.2	Condições auxiliares	67
5.3.3	Análise da influência dos parâmetros no comportamento do sistema	68
5.4	Notas de implementação	72
6	CONCLUSÕES	73

Lista de Figuras

2.1	Esquema representativo para um modelo de crescimento populacional.	7
2.2	Solução da equação diferencial $6y'' - 5y' + y = 0$ com $y(0) = 4$ e $y'(0) = 0$	10
2.3	Pontos críticos e estabilidade	16
2.4	Chapa plana cujas bordas são mantidas a diferentes temperaturas	18
2.5	Região R com fronteira F_R na qual resolvem-se problemas de equilíbrio.	18
2.6	Barra termicamente isolada	19
2.7	Distribuição da temperatura em uma barra para diferentes instantes de tempo.	20
2.8	Problemas transientes necessitam de condições iniciais e de contorno. A região R em que se determina a solução é aberta.	20
3.1	A matemática computacional e as suas subdivisões.	22
3.2	Representação esquemática para o funcionamento de um algoritmo.	23
3.3	Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema	24
3.4	Representação do intervalo contínuo $[t_0, t_f]$ e de uma malha unidimensional associada a ele.	28
3.5	Malha unidimensional de pontos uniformemente espaçados.	29
3.6	Pontos utilizados na eq.(3.11) para o cálculo da primeira derivada de f por diferença progressiva.	30
3.7	Pontos utilizados na eq.(3.13) para o cálculo da primeira derivada de f por diferença atrasada.	31
3.8	Pontos utilizados na eq.(3.15) para o cálculo da primeira derivada de f por diferença central.	32
3.9	Aproximação pelo método de Euler	34
3.10	Representação de uma região contínua e discretizada	43
3.11	Molécula computacional correspondente à discretização explícita por diferenças centrais considerando uma malha bidimensional.	44

3.12	Domínio para a discretização por diferenças centrais de segunda ordem para a equação de Laplace.	45
3.13	Molécula computacional da discretização explícita da eq.(3.47).	47
3.14	Molécula computacional da discretização implícita da eq.(3.51).	48
3.15	Molécula computacional do método de Crank-Nicholson.	49
3.16	Molécula computacional da eq.(3.58)	50
3.17	Molécula computacional da eq.(3.60)	51
4.1	Esquema representativo da relação de predação envolvendo duas espécies.	54
4.2	Resultados numéricos para a variação temporal da população de presas obtidos utilizando-se os métodos EPP e RK4.	55
4.3	Resultado exato e resultados numéricos para a variação temporal da população de presas obtidos utilizando-se os métodos EPP e RK4.	57
4.4	Diagrama de fase do Modelo Lotka-Volterra, composto por trajetórias fechadas, onde cada trajetória depende das populações iniciais no sistema.	58
4.5	Séries temporais do Modelo Lotka-Volterra, com comportamento oscilatório e periódico obtidas através do método de Runge Kutta de quarta ordem.	58
4.6	Evolução temporal da população de presas na ausência de predadores.	59
4.7	Diagrama de fases, para condições iniciais diferentes a densidade populacional converge para região próxima ao ponto crítico.	60
4.8	Séries temporais do modelo Lotka-Volterra com o acréscimo do fator logístico μN^2	61
5.1	Representação da região R_x para o caso da difusão unidimensional.	63
5.2	Evolução temporal da população de presas para diferentes passos no tempo h_t e diferença percentual entre os resultados para os diferentes passos no tempo.	66
5.3	Diagrama de fases e evolução temporal das populações de presas e predadores para diferentes condições iniciais.	67
5.4	Condições de contorno. (a)Dirichlet (b)Periódica.	68
5.5	Diagrama de fases para e séries temporais com diferentes condições de contorno.	69
5.6	Diagrama de fases para diferentes valores da taxa de morte δ dos predadores, mantendo-se todos os demais parâmetros fixos.	70
5.7	Diagrama de fases e evolução temporal das populações de presas e predadores para diferentes valores da taxa de morte δ dos predadores, mantendo-se todos os demais parâmetros fixos.	70

5.8	Diagrama de fases e evolução temporal das populações de presas e predadores para diferentes valores da taxa de nascimento α das presas.	71
5.9	Diagrama de fases para diferentes valores da taxa de predação β	71

Lista de Tabelas

2.1	Propriedades de Estabilidade de Sistemas Lineares $\vec{X}' = \mathcal{A}\vec{X}$ com $\det(\mathcal{A} - \lambda I) = 0$ e $\det \mathcal{A} \neq 0$	16
4.1	Parâmetros do caso base para o modelo Lotka-Volterra.	56
4.2	Parâmetros do caso base para o modelo Lotka-Volterra com acréscimo do fator logístico μN^2	60
5.1	Parâmetros do caso base.	65

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Os sistemas dinâmicos em geral são sistemas fora do equilíbrio e podem apresentar comportamento não-linear. A maior parte dos fenômenos naturais estão associados com sistemas dinâmicos fora do equilíbrio, como o comportamento ao longo do tempo de colônias de insetos, o clima da Terra, os terremotos, os organismos vivos, os ecossistemas, os fenômenos de turbulência, os sistemas imunológicos, as redes fluviais, e muitos outros.

Determinar, teoricamente, a evolução temporal das grandezas que caracterizam um sistema, pode ser importante em alguns casos, como por exemplo: *(i)* quando o sistema ainda não existe fisicamente; *(ii)* quando se tenta explicar o comportamento de sistemas já existentes; *(iii)* quando os testes experimentais são muito caros e/ou perigosos. O objetivo desses estudos teóricos é conhecer o futuro, ou seja, prever como as mudanças ocorrerão nestes sistemas. O estudo matemático dessas mudanças corresponde ao estudo de sistemas de equações diferenciais, para o caso em que se assume que o tempo evolui continuamente, ou ao estudo de sistemas de equações de diferenças finitas, quando se assume que o tempo evolui discretamente [1].

Nem sempre é possível resolver os modelos matemáticos de forma analítica, e buscam-se então ferramentas alternativas. O objetivo deste trabalho é apresentar um estudo dos métodos numéricos mais utilizados para a resolução de equações diferenciais ordinárias e parciais e aplicar estes métodos para resolver o problema dinâmico presa-predador com difusão.

A modelagem da dinâmica de populações é um problema importante em ecologia, tendo implicações diretas inclusive em programas de conservação ambiental. A proposição de modelos matemáticos para descrever a dinâmica de populações é rotineira há muito tempo, mas somente após o advento dos computadores digitais foi possível sofisticar os modelos para torná-los mais realistas. O estudo de um sistema de dinâmica de populações engloba diferentes áreas do conhecimento, tais como, Física, Matemática, Biologia e Computação, o que torna fascinante este tipo de pesquisa, que não se restringe a apenas uma área do conhecimento. A cooperação entre profissionais de diferentes áreas é, em geral,

bastante proveitosa.

O trabalho está organizado da forma descrita a seguir. No capítulo 2, é apresentado o referencial teórico matemático abrangendo um breve estudo de equações diferenciais ordinárias e parciais, ferramentas matemáticas que são utilizadas para a modelagem de sistemas dinâmicos. No capítulo 3, são apresentados alguns métodos numéricos utilizados para tratar equações diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais, incluindo análise de convergência e estabilidade, bem como a aplicabilidade desses métodos. Nos capítulos 4 e 5, são apresentados alguns modelos de dinâmica de populações, incluindo um estudo dos respectivos sistemas contínuos e os resultados numéricos correspondentes. No capítulo 4, é tratado do caso presa-predador unidimensional sem difusão, descrito por equações diferenciais ordinárias e que, portanto possui solução exata. É feita uma comparação entre os resultados numéricos e os resultados exatos, mostrando o grau de precisão dos métodos numéricos empregados. No capítulo 5, é tratado do caso presa-predador incluindo a difusão, descrito por equações diferenciais parciais que não possuem solução exata. No capítulo 6, são apresentadas as conclusões e perspectivas do trabalho.

Capítulo 2

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

2.1 Introdução

Equações diferenciais foram usadas pela primeira vez no século XVII, para descrever fenômenos físicos. Desde então, elas têm sido aplicadas em diversas áreas. E muitas leis fundamentais da física, química, economia e biologia podem ser formuladas como equações diferenciais. Em ecologia, a modelagem matemática da dinâmica de populações usa, fundamentalmente, equações diferenciais. Diversos fenômenos físicos, tais como fenômenos de difusão e de turbulência, movimento de partículas, e muitos outros sistemas dinâmicos, também são modelados usando-se equações diferenciais [2].

As equações diferenciais são importantes tanto do ponto de vista matemático quanto do ponto de vista físico. Os físicos, ao estudarem algum fenômeno, procuram inicialmente descrevê-lo de forma qualitativa. Após a compreensão qualitativa do fenômeno, tenta-se obter uma explicação quantitativa, na forma de uma ou mais equações matemáticas, que visam descrever matematicamente a experiência e fazer previsões que possam ser verificadas através de outras experiências [3].

Para uma boa parte dos sistemas físicos conhecidos, a equação ou equações que descrevem os fenômenos, pelo menos de forma aproximada, são equações diferenciais [1]. Modelos de sistemas reais podem conter equações diferenciais complexas, e o problema então se transforma em encontrar as soluções destas equações. Sendo assim, é muito importante conhecer métodos de resolução dessas equações diferenciais. Quando a equação não possui solução analítica, métodos de soluções numéricas e/ou processos de simulação computacional são utilizados.

2.1.1 Classificação das equações diferenciais

Uma equação diferencial é uma equação envolvendo derivadas de uma função desconhecida contendo uma ou mais variáveis. Se a função desconhecida depende somente de uma variável a equação é chamada Equação Diferencial Ordinária (EDO). Entretanto, se a função desconhecida depende de mais

de uma variável a equação é chamada Equação Diferencial Parcial (EDP) [2].

Um exemplo de uma EDO é a equação

$$\frac{d^2u}{dt^2} - 2\frac{du}{dt} - 15u = 0 \quad (2.1)$$

onde a função desconhecida $u(t)$ depende apenas da variável independente t . A eq.(2.1) pode ser escrita da seguinte forma

$$u'' - 2u' - 15u = 0 \quad (2.2)$$

A equação de calor (2.3) é um exemplo de uma EDP.

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.3)$$

onde α é a constante de difusão. A equação do calor descreve a condução de calor em um corpo sólido [4]. Note que na eq.(2.1), a função desconhecida u depende apenas da variável independente t , $u(t)$, enquanto que na eq.(2.3), u depende de x e de t , $u(x, t)$.

A ordem de uma equação diferencial é a ordem da derivada de maior ordem que aparece na equação, independente do tipo de derivada [4]. As equações (2.1) e (2.3) são equações de segunda ordem e a eq.(2.4)

$$\frac{d^4y}{dt^4} + \frac{d^3y}{dt^3} + \frac{d^2y}{dt^2} + \frac{dy}{dt} + y = 1 \quad (2.4)$$

é classificada como uma equação diferencial ordinária de quarta ordem.

As equações diferenciais ordinárias podem ser classificadas como lineares e não-lineares. Uma equação diferencial ordinária linear é uma equação que pode ser escrita na forma

$$a_0(x) \frac{dy^n}{dx^n} + a_1(x) \frac{dy^{n-1}}{dx^{n-1}} + \dots + a_{n-1}(x) \frac{dy}{dx} + a_n(x)y = F(x) \quad (2.5)$$

onde $F(x)$ e os coeficientes $a_0(x), a_1(x), \dots, a_n(x)$ são funções de x , e $a_0(x)$ não é identicamente nulo. Uma equação diferencial ordinária que não pode ser escrita na forma (2.5) é chamada equação diferencial não-linear. A equação (2.1) é um exemplo de uma EDO linear, e (2.6) é um exemplo de uma EDO não-linear.

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + x \frac{dy}{dx} - y = 0 \quad (2.6)$$

Observe que uma equação diferencial linear não pode conter funções transcendentais tais como $\sin(x)$, $\cos(x)$ e $\ln(x)$ e também não pode conter produtos entre variáveis dependentes, como por exemplo [3]:

$$[y(x)]^2, \left(\frac{dx}{dt}\right)^2, y(x) \frac{dy}{dx}, \frac{dy}{dt} \frac{dz}{dt}, x(y, z) \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \frac{\partial x}{\partial y} \quad (2.7)$$

2.2 Equações diferenciais ordinárias de primeira ordem

A eq.(2.8) é uma equação diferencial ordinária de primeira ordem, onde $f(t, y)$ é uma função de duas variáveis. Qualquer função $y = \phi$ que satisfaça a eq.(2.8) para todo t em algum intervalo é dita solução da equação.

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad (2.8)$$

Se a função $f(t, y)$ na equação depende linearmente da variável dependente y , então a equação é uma equação linear de primeira ordem [2].

2.2.1 Equações diferenciais de variáveis separáveis

O método de separação de variáveis consiste em transformar equações do tipo

$$\frac{dy}{dx} = \frac{F(x)G(y)}{f(x)g(y)} \quad (2.9)$$

em equações da forma

$$\frac{g(y)}{G(y)} dy = \frac{F(x)}{f(x)} dx \quad (2.10)$$

Esse método é aplicado em equações em que um lado pode ser escrito somente em função de uma das variáveis e o outro somente em função da outra variável [4].

Para resolver este tipo de equação integra-se cada lado da eq.(2.10) em relação às suas variáveis, obtendo-se a eq.(2.11)

$$\int \frac{g(y)}{G(y)} dy = \int \frac{F(x)}{f(x)} dx + C \quad (2.11)$$

onde C é uma constante arbitrária que será determinada segundo a condição inicial do problema [2].

As equações do tipo

$$\frac{dy}{dx} = f(ax + by + c) \quad (2.12)$$

onde a , b e c são constantes, não são equações separáveis, mas podem ser transformadas por meio da seguinte substituição:

$$v = ax + by + c \implies \frac{dv}{dx} = a + b \frac{dy}{dx} \quad (2.13)$$

Considere a seguinte equação de variáveis não separáveis

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y - 4x}{x - y} \quad (2.14)$$

que pode ser escrita como

$$\frac{dy}{dx} = \frac{(y/x) - 4}{1 - (y/x)} \quad (2.15)$$

é possível definir uma nova variável dependente v tal que $v = \frac{y}{x}$, ou $y = xv(x)$. Expressando $\frac{dy}{dx}$ em função de x , v e $\frac{dv}{dx}$ e substituindo y e $\frac{dy}{dx}$ na eq.(2.15) obtém-se

$$v + x \frac{dv}{dx} = \frac{v - 4}{1 - v} \quad (2.16)$$

ou

$$x \frac{dv}{dx} = \frac{v^2 - 4}{1 - v} \quad (2.17)$$

Observe que a eq.(2.17) é separável.

2.2.2 Equações diferenciais exatas

Qualquer equação diferencial de primeira ordem pode ser escrita na forma diferencial

$$M(x, y)dx + N(x, y)dy = 0 \quad (2.18)$$

Esta forma é semelhante à diferencial total dF de uma função F de duas variáveis reais [3].

$$dF(x, y) = \frac{\partial F(x, y)}{\partial x} dx + \frac{\partial F(x, y)}{\partial y} dy \quad (2.19)$$

Pode-se comparar as equações (2.18) e (2.19) identificando-se as derivadas parciais da eq.(2.19) com as funções $M(x, y)$ e $N(x, y)$ da eq.(2.18).

$$\frac{\partial F(x, y)}{\partial x} = M(x, y) \quad \text{e} \quad \frac{\partial F(x, y)}{\partial y} = N(x, y) \quad (2.20)$$

É necessário também que as funções $M(x, y)$ e $N(x, y)$ satisfaçam a seguinte condição

$$\frac{\partial M}{\partial y} = \frac{\partial N}{\partial x} \quad (2.21)$$

Nesse caso diz-se que a equação é exata e pode ser escrita como

$$dF(x, y) = 0 \quad (2.22)$$

que tem como solução geral

$$F(x, y) = c \quad (2.23)$$

A função F é uma função cujas derivadas parciais são iguais a $M(x, y)$ e $N(x, y)$ [3].

2.2.3 Equações diferenciais lineares

Uma equação diferencial linear deve obedecer a eq.(2.5). Um exemplo é dado pela eq.(2.24) abaixo

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y = q(x) \quad (2.24)$$

que pode ser reescrita da seguinte forma:

$$[p(x)y - q(x)]dx + dy = 0 \quad (2.25)$$

A eq.(2.25) é uma equação do tipo $M(x, y)dx + N(x, y)dy = 0$, onde $M(x, y) = p(x)y - q(x)$ e $N(x, y) = 1$. Como

$$\frac{\partial M}{\partial y} \neq \frac{\partial N}{\partial x} \quad (2.26)$$

a eq.(2.25) não é exata. No entanto, pode-se multiplicar a eq.(2.25) por uma função $\mu(x, y)$, denominada de fator integrante, que a transformará em uma equação diferencial exata [3].

$$\mu(x, y)M(x, y)dx + \mu(x, y)N(x, y)dy = 0 \quad (2.27)$$

2.2.4 Equações diferenciais autônomas

São ditas autônomas as equações diferenciais nas quais a variável independente não aparece explicitamente [4].

$$\frac{dy}{dt} = f(y) \quad (2.28)$$

Equações autônomas aparecem no contexto de crescimento populacional ou declínio populacional de uma dada espécie, por exemplo. Um modelo para o crescimento populacional é capaz de descrever a variação no número de indivíduos em uma dada região em relação ao tempo e é composto por um fator correspondente aos nascimentos, proporcional ao número de indivíduos presentes em um dado instante, e por outro fator correspondente as mortes, também proporcional ao número de indivíduos presentes em um dado instante [4].

$$\begin{array}{l} \text{Variação da} \\ \text{população} \end{array} = \text{Nascimentos} - \text{Mortes}$$
$$\frac{dN}{dt} = aN - bN$$

Figura 2.1: Esquema representativo para um modelo de crescimento populacional.

onde a é a taxa de natalidade e b é a taxa de mortalidade, ambas consideradas constantes. Definindo-se $r = a - b$, tem-se que

$$\frac{dN}{dt} = rN \quad (2.29)$$

r é a chamada taxa de crescimento intrínseco. Se $r > 0$ a população aumenta; se $r < 0$ a população diminui. Note que no lado direito da eq.(2.29) a variável independente t não aparece explicitamente.

2.3 Equações diferenciais ordinárias de segunda ordem

Uma equação diferencial linear de segunda ordem tem a forma

$$\frac{d^2y}{dt^2} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right) \quad (2.30)$$

ou a forma geral

$$\frac{d^2y}{dt^2} + p(t)\frac{dy}{dt} + q(t)y = g(t) \quad (2.31)$$

A eq.(2.31) também pode ser escrita da seguinte forma

$$P(t)\frac{d^2y}{dt^2} + Q(t)\frac{dy}{dt} + R(t)y = G(t) \quad (2.32)$$

2.3.1 Equações diferenciais homogêneas

Uma equação diferencial é dita homogênea se na eq.(2.31) $g(t) = 0$. Caso contrário, será classificada como uma equação diferencial não-homogênea [3].

$$\frac{d^2y}{dt^2} + p(t)\frac{dy}{dt} + q(t)y = 0 \quad (2.33)$$

Considere o seguinte exemplo.

$$\frac{d^2y}{dt^2} - y = 0 \quad (2.34)$$

A eq.(2.34) representa uma função com a propriedade de que a sua derivada segunda é igual a ela própria. Lembre-se dos primeiros estudos de cálculo que existe uma função com essa propriedade. Por inspeção pode-se concluir que somente a função exponencial $y(t) = Ce^{rt}$ satisfaz a eq.(2.34), então

$$\begin{aligned} y'(t) &= Cre^{rt} \\ y''(t) &= Cr^2e^{rt} \end{aligned}$$

Substituindo na eq.(2.34), tem-se

$$\begin{aligned} Cr^2e^{rt} - Ce^{rt} &= 0 \\ Ce^{rt}(r^2 - 1) &= 0 \end{aligned}$$

Existem duas possibilidades, $r = -1$ e $r = 1$, e ambas deverão ser consideradas para a obtenção da solução geral da eq.(2.34).

É fundamental que se note que qualquer soma de soluções da eq.(2.34) também é solução [4]. Assim, a solução geral é dada pela combinação linear das funções exponenciais

$$y(t) = c_1 e^t + c_2 e^{-t} \quad (2.35)$$

As constantes c_1 e c_2 são encontradas através das condições iniciais $y(t_0)$ e $y'(t_0)$. Suponha que $y(0) = 2$ e $y'(0) = 3$, que restringe a solução cujo gráfico contenha o ponto $(0, 2)$ e cujo coeficiente angular da reta tangente ao gráfico nesse ponto seja 3. As constantes seriam $c_1 = \frac{5}{2}$ e $c_2 = -\frac{1}{2}$. Inserindo estes valores na eq.(2.35), obtêm-se

$$y(t) = \frac{5}{2} e^t - \frac{1}{2} e^{-t} \quad (2.36)$$

como solução do problema de valor inicial (PVI), que consiste na eq.(2.34) e nas condições iniciais $y(0) = 2$ e $y'(0) = 3$.

Considere a eq.(2.32) com parâmetros constantes, por exemplo, a equação homogênea abaixo

$$\begin{aligned} 6 \frac{d^2 y}{dt^2} - 5 \frac{dy}{dt} + y &= 0 \\ y(0) &= 4 \\ y'(0) &= 0 \end{aligned} \quad (2.37)$$

Suponha que $y = e^{rt}$ é a solução da eq.(2.37). Segue que $y' = r e^{rt}$ e $y'' = r^2 e^{rt}$. Substituindo y , y' e y'' na eq.(2.37), têm-se

$$6r^2 e^{rt} - 5r e^{rt} + e^{rt} = 0 \quad (2.38)$$

que pode ser reescrita da seguinte forma

$$(6r^2 - 5r + 1)e^{rt} = 0$$

como $e^{rt} \neq 0$,

$$6r^2 - 5r + 1 = 0 \quad (2.39)$$

A eq.(2.39) é chamada equação característica da equação diferencial (2.37). Pelo fato da equação característica ser de segundo grau, suas duas raízes podem ser reais e distintas, reais e iguais ou complexas conjugadas [2].

As raízes da eq.(2.39) são $r_1 = \frac{1}{3}$ e $r_2 = \frac{1}{2}$. Logo a solução geral é

$$y(t) = c_1 e^{\frac{1}{3}t} + c_2 e^{\frac{1}{2}t} \quad (2.40)$$

Com as condições iniciais $y(0) = 4$ e $y'(0) = 0$, o seguinte sistema pode ser obtido

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= 4 \\ \frac{1}{3}c_1 + \frac{1}{2}c_2 &= 0 \end{aligned}$$

Encontra-se $c_1 = 12$ e $c_2 = -8$. Utilizando-se esses valores na eq.(2.41), obtêm-se a solução particular da eq.(2.37). A fig. 2.2 mostra o gráfico da função (2.41).

$$y(t) = 12e^{\frac{1}{3}t} - 8e^{\frac{1}{2}t} \quad (2.41)$$

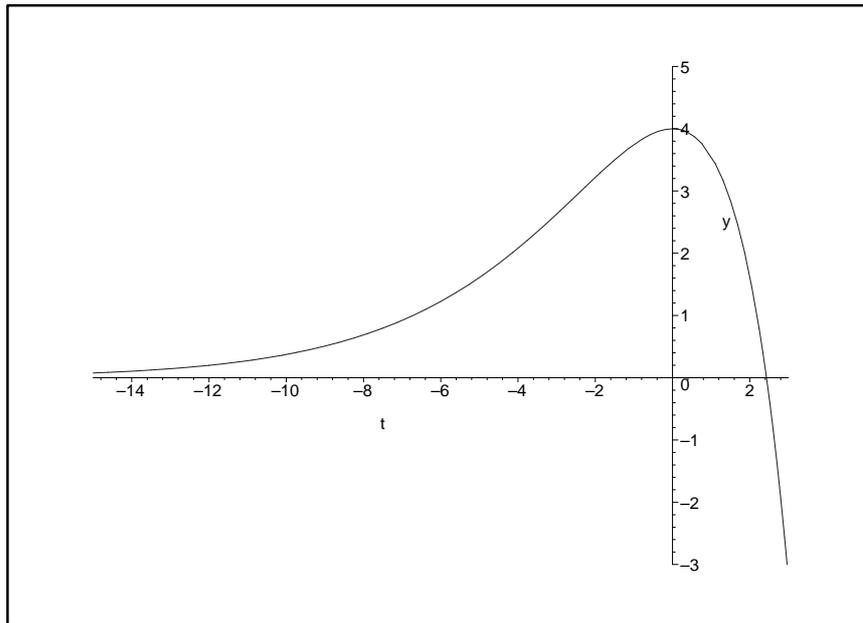


Figura 2.2: Solução da equação diferencial $6y'' - 5y' + y = 0$ com $y(0) = 4$ e $y'(0) = 0$

2.3.2 Existência e unicidade da solução

As condições suficientes para a existência de uma solução única de uma equação diferencial de primeira ordem são definidas pelo teorema da existência e unicidade das soluções [3].

Considere o problema de valor inicial

$$\frac{dy}{dt} + p(t)y = g(t) \quad (2.42)$$

$$y(t_0) = y_0 \quad (2.43)$$

De acordo com o teorema da existência e unicidade das soluções, se as funções p e g são contínuas no domínio de definição das funções contendo um ponto $t = t_0$, é possível encontrar uma única função $y = \phi(t)$ que satisfaça a equação diferencial [4]. Ao encontrar uma solução para a equação diferencial

linear, não é necessário buscar outras soluções que satisfaçam as condições da equação, pois a solução encontrada é única.

2.3.3 Equações diferenciais não-homogêneas

Se na eq.(2.44) $g(t) \neq 0$ tem-se uma equação não-homogênea.

$$\frac{d^2y}{dt^2} + p(t)\frac{dy}{dt} + q(t)y = g(t) \quad (2.44)$$

onde $p(t)$, $q(t)$ são funções constantes e $g(t)$ uma função qualquer. Como foi visto, a eq.(2.45)

$$\frac{d^2y}{dt^2} + p(t)\frac{dy}{dt} + q(t)y = 0 \quad (2.45)$$

é uma equação homogênea. Neste caso, é a equação homogênea associada a eq.(2.44), para as mesmas funções $p(t)$ e $q(t)$ da equação não-homogênea [4].

A solução geral de uma equação não-homogênea pode ser escrita na forma

$$y(t) = y_h(t) + y_p(t) \quad (2.46)$$

onde $y_h(t)$ é a solução homogênea da eq.(2.45) e $y_p(t)$ é alguma solução específica da eq.(2.44), chamada de solução particular da equação não-homogênea.

Para algumas funções $g(t)$ é fácil descobrir a solução particular da equação. Considere o caso em que a função $g(t)$ é uma função exponencial. Sendo a eq.(2.37), a equação homogênea associada a eq.(2.47)

$$6\frac{d^2y}{dt^2} - 5\frac{dy}{dt} + y = 3e^{2t} \quad (2.47)$$

sabe-se que a solução geral da equação não-homogênea será

$$y(t) = c_1e^{\frac{1}{3}t} + c_2e^{\frac{1}{2}t} + y_p(t) \quad (2.48)$$

O objetivo será encontrar uma função y_p tal que $6y_p'' - 5y_p' + y_p$ seja igual a $3e^{2t}$. Como as derivadas da função exponencial são múltiplos da própria função, espera-se que existam soluções particulares da forma

$$y_p(t) = Ae^{2t} \quad (2.49)$$

onde A é um coeficiente a ser determinado. As derivadas da função $y_p(t)$ são

$$\frac{dy_p}{dt} = 2Ae^{2t} \quad \frac{d^2y_p}{dt^2} = 4Ae^{2t} \quad (2.50)$$

quando substituídas na eq.(2.47) obtêm-se

$$(24A - 10A + A)e^{2t} = 3e^{2t} \quad (2.51)$$

com $A = \frac{1}{5}$ e a solução particular

$$y_p = \frac{1}{5}e^{2t} \quad (2.52)$$

2.4 Sistemas de equações diferenciais lineares

Uma equação diferencial de ordem n pode ser reescrita na forma de um sistema de n equações de primeira ordem [1]. Suponha uma equação diferencial linear de ordem n dada inicialmente como

$$y^{(n)} = -\frac{a_0}{a_n}y - \frac{a_1}{a_n}y' - \dots - \frac{a_{n-1}}{a_n}y^{(n-1)} + \frac{f(t)}{a_n} \quad (2.53)$$

Introduzindo as variáveis

$$y = x_1, \quad y' = x_2, \quad y'' = x_3, \quad \dots \quad y^{(n-1)} = x_n \quad (2.54)$$

decorre que $y' = x_1' = x_2$, $y'' = x_2' = x_3$, ..., $y^{(n-1)} = x_{n-1}' = x_n$, e $y^{(n)} = x_n'$. Logo, das equações (2.53) e (2.54), verifica-se que uma equação diferencial linear de ordem n pode ser expressa como um sistema de ordem n [5].

$$\begin{aligned} x_1' &= x_2 \\ x_2' &= x_3 \\ x_3' &= x_4 \\ &\vdots \\ &\vdots \\ x_{n-1}' &= x_n \\ x_n' &= -\frac{a_0}{a_n}x_1 - \frac{a_1}{a_n}x_2 - \dots - \frac{a_{n-1}}{a_n}x_n + \frac{f(t)}{a_n} \end{aligned} \quad (2.55)$$

O sistema (2.55) é equivalente à equação (2.53). Entretanto, há algumas vantagens em se escrever uma equação de ordem n como n equações de primeira ordem. Uma delas é a possibilidade do uso da representação matricial para esse sistema. Quando se usam métodos computacionais para se resolver a eq.(2.53), é mais conveniente se trabalhar com um sistema, em vez de se trabalhar com uma única equação. [1].

Se \vec{X} , \mathcal{A} e \vec{F} denotam respectivamente, as matrizes

$$\vec{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \mathcal{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -\frac{a_0}{a_n} & -\frac{a_1}{a_n} & -\frac{a_2}{a_n} & \dots & -\frac{a_{n-1}}{a_n} \end{bmatrix}, \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{f(t)}{a_n} \end{bmatrix}$$

então o sistema de equações diferenciais (2.55) pode ser escrito como

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -\frac{a_0}{a_n} & -\frac{a_1}{a_n} & -\frac{a_2}{a_n} & \dots & -\frac{a_{n-1}}{a_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{f(t)}{a_n} \end{bmatrix}$$

ou simplesmente

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \mathcal{A}\vec{X} + \vec{F}(t) \quad (2.56)$$

2.4.1 Sistemas lineares homogêneos

Se o sistema é dito homogêneo, então o vetor $\vec{F}(t)$ é nulo e a eq.(2.56) pode ser escrita como

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \mathcal{A}\vec{X} \quad (2.57)$$

onde \mathcal{A} é uma matriz quadrada de coeficientes constantes. Considere o sistema composto por duas equações diferenciais

$$\frac{dx}{dt} = ax + by \quad (2.58)$$

$$\frac{dy}{dt} = cx + dy \quad (2.59)$$

que pode ser escrito na forma da eq.(2.57), onde $\vec{X} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ e $\mathcal{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$

Para escrever o sistema de duas equações (2.58) como uma única equação diferencial de segunda ordem, deve-se derivar $\frac{dx}{dt}$ em relação a t , obtendo

$$\frac{d^2x}{dt^2} = a\frac{dx}{dt} + b\frac{dy}{dt} \quad (2.60)$$

Como $\frac{dy}{dt}$ é conhecida, pode-se substituir na eq.(2.60).

$$\frac{d^2x}{dt^2} = a\frac{dx}{dt} + b(cx + dy) \quad (2.61)$$

Na eq.(2.61), ainda sobra um termo dependente de y que pode ser substituído se o valor de y for isolado na eq.(2.58). Substituindo esse valor na eq.(2.61), obtém-se a eq.(2.62), que é uma equação de segunda ordem [5].

$$\frac{d^2x}{dt^2} - (a+d)\frac{dx}{dt} + (ad-bc) = 0 \quad (2.62)$$

A solução geral da eq.(2.62) é

$$x = c_1 e^{r_1 t} + c_2 e^{r_2 t} \quad (2.63)$$

Adotando a notação vetorial, a solução será dada por

$$\vec{X} = c_1 \vec{K} e^{\lambda_1 t} + c_2 \vec{K} e^{\lambda_2 t} \quad (2.64)$$

sendo λ um autovalor e \vec{K} um autovetor associado a matriz \mathcal{A} . Note que os vetores solução apresentam a forma básica

$$\vec{X} = \vec{K} e^{\lambda t} \quad (2.65)$$

para o sistema linear homogêneo de primeira ordem (2.57). Se (2.65) deve ser um vetor solução do sistema (2.57), então $\vec{X}' = \vec{K} \lambda e^{\lambda t}$ de modo que o sistema se torna

$$\vec{K} \lambda e^{\lambda t} = \mathcal{A} \vec{K} e^{\lambda t} \quad (2.66)$$

dividindo por $e^{\lambda t}$ e reordenando, obtem-se

$$\mathcal{A} \vec{K} = \lambda \vec{K} \quad (2.67)$$

ou

$$(\mathcal{A} - \lambda I) \vec{K} = 0 \quad (2.68)$$

onde I é a matriz identidade 2×2 . Para encontrar um solução \vec{X} não trivial do sistema (2.57), deve-se encontrar um vetor não-trivial \vec{K} que satisfaça a eq.(2.68). Mas para que a eq.(2.68) tenha soluções não triviais, deve-se ter

$$\det(\mathcal{A} - \lambda I) = 0 \quad (2.69)$$

A eq.(2.69) é a equação característica da matriz \mathcal{A} . Em outras palavras, $\vec{X} = \vec{K} e^{\lambda t}$ será uma solução do sistema (2.57) se e somente se λ for um autovalor de \mathcal{A} e \vec{K} um autovetor correspondente a λ [5].

Para o caso do sistema composto pelas equações (2.58) e (2.59), calcula-se inicialmente os autovalores λ da matriz \mathcal{A} .

$$\det(\mathcal{A} - \lambda I) = \begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (a + d)\lambda + ad - cb = 0 \quad (2.70)$$

Como a equação característica é de segunda ordem, podem ser encontrados dois autovalores λ_1 e λ_2 , que são soluções da eq.(2.70). Conhecidos os autovalores, deve-se encontrar os autovetores \vec{K}_i da matriz, resolvendo a eq.(2.67) para cada valor de λ .

$$\begin{bmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.71)$$

que é equivalente a

$$\begin{aligned}(a - \lambda)k_1 + bk_2 &= 0 \\ ck_1 + (d - \lambda)k_2 &= 0\end{aligned}$$

Com os autovalores e autovetores da matriz é possível escrever a solução geral dada pela eq.(2.64). A solução geral do sistema formado pelas equações (2.58) e (2.59) será

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \end{bmatrix} e^{\lambda_1 t} + c_2 \begin{bmatrix} k'_1 \\ k'_2 \end{bmatrix} e^{\lambda_2 t} \quad (2.72)$$

É importante notar que a solução encontrada trata-se de uma função vetorial paramétrica, que poderá desenhar um caminho ou uma trajetória percorrida por uma partícula com velocidade dx/dt em um espaço cujos eixos representam cada componente do sistema x e y . Este espaço é chamado de espaço de fase do sistema, e quando existe uma trajetória traçada através da solução do sistema nesse espaço, ele passa a ser chamado de retrato de fase [4]. Esta abordagem, tem caráter geométrico e nos leva a uma compreensão qualitativa do comportamento das soluções. Existem muitas equações diferenciais, especialmente as não-lineares, que não possuem solução analítica, mas a análise qualitativa é capaz de fornecer informações importantes sobre o comportamento do sistema estudado.

2.5 Estabilidade em sistemas lineares

O sistema autônomo com duas equações diferenciais da forma

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= P(x, y) \\ \frac{dy}{dt} &= Q(x, y)\end{aligned}$$

origina um campo vetorial $V(x, y) = (P(x, y), Q(x, y))$ e uma solução $\vec{X} = X(t)$ pode ser interpretada como a trajetória resultante de uma partícula colocada inicialmente na posição $\vec{X}(0) = X_0$. Se X_0 é um ponto crítico, a partícula permanece estacionária [2]. Entretanto, se X_0 é colocado próximo a um ponto crítico X_1 , pode-se formular algumas questões:

- A partícula voltará ao ponto crítico? Mais precisamente, se $\vec{X} = X(t)$ é a solução que satisfaz $X(0) = X_0$, então é verdade que $\lim_{t \rightarrow \infty} X(t) = X_1$
- Se a partícula não volta ao ponto crítico, ela permanece próxima dele ou se afasta do ponto crítico? É concebível, por exemplo, que a partícula simplesmente circunde o ponto crítico ou volte a um ponto crítico diferente.

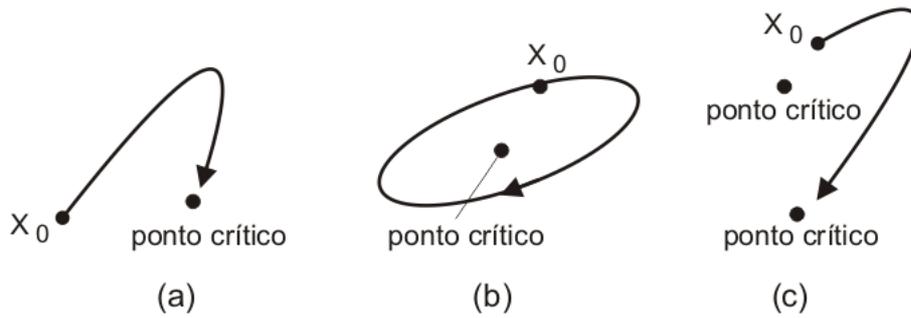


Figura 2.3: Pontos críticos e estabilidade

Se o caso (a) ou o caso (b) da fig. 2.3 sempre ocorrerem em alguma vizinhança do ponto crítico, tal ponto crítico é chamado localmente estável. Se, entretanto, for possível achar em qualquer vizinhança dada um valor inicial X_0 que resulte em um comportamento semelhante ao caso (c), então o ponto crítico é chamado instável [5].

Como visto na seção 2.4.1, pode-se notar que as soluções de um sistema linear homogêneo com coeficientes constantes dependem basicamente dos autovalores e autovetores da matriz de coeficientes. Assim, é natural que se possa descrever o comportamento dessas soluções, isto é, as suas curvas solução ou trajetórias, com base nos autovalores e autovetores da matriz de coeficientes. A seguir é apresentado um resumo das situações possíveis, indicando o tipo de ponto crítico e de estabilidade observada em cada situação de um sistema de segunda ordem.

Autovalores	Tipo de Ponto Crítico	Estabilidade
$\lambda_1 > \lambda_2 > 0$	Nó	Instável
$\lambda_1 < \lambda_2 < 0$	Nó	Assintoticamente estável
$\lambda_2 < 0 < \lambda_1$	Ponto de sela	Instável
$\lambda_1 = \lambda_2 > 0$	Nó próprio ou impróprio	Instável
$\lambda_1 = \lambda_2 < 0$	Nó próprio ou impróprio	Assintoticamente estável
$\lambda_1, \lambda_2 = \alpha \pm i\mu$	Ponto espiral	
$\alpha > 0$		Instável
$\alpha < 0$		Assintoticamente estável
$\lambda_1 = i\mu, \lambda_2 = -i\mu$	Centro	Estável

Tabela 2.1: Propriedades de Estabilidade de Sistemas Lineares $\vec{X}' = \mathcal{A}\vec{X}$ com $\det(\mathcal{A} - \lambda I) = 0$ e $\det \mathcal{A} \neq 0$

2.6 Equações diferenciais parciais

Em muitos problemas físicos importantes, existem duas ou mais variáveis independentes, de modo que o modelo matemático correspondente envolve equações diferenciais parciais. Tais equações podem ser classificadas em três categorias básicas:

- Elípticas
- Parabólicas
- Hiperbólicas

Essa classificação não é meramente acadêmica, uma vez que cada classe de equações está associada a uma categoria diferente de fenômenos físicos [6]. Na natureza pode-se distinguir dois tipos básicos de fenômenos físicos: aqueles que evoluem no tempo (transientes) e aqueles que estão em um estado de equilíbrio (estacionários). Frequentemente esses processos aparecem juntos.

2.6.1 Problemas de equilíbrio

Equações elípticas

Problemas de equilíbrio são aqueles nos quais a propriedade de interesse não se altera com o passar do tempo. São representados matematicamente por equações diferenciais parciais elípticas, cuja equação modelo é a Equação de Laplace. Em coordenadas cartesianas, essa equação pode ser escrita como:

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (2.73)$$

onde ϕ é a variável dependente e ∇^2 é o operador laplaciano que, em coordenadas cartesianas bidimensionais, é dado por

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

Considere como exemplo uma chapa plana de metal mostrada na figura 2.4. Ela está termicamente isolada nas faces, possui espessura desprezível e só pode trocar calor pelas bordas laterais, que são mantidas às temperaturas T_0 , T_1 , T_2 e T_3 .

Quando a chapa está em equilíbrio térmico, a temperatura T em cada ponto interno satisfaz a equação

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (2.74)$$

que é a equação de Laplace. A solução única para esse e outros problemas que envolvem EDP's é obtida especificando-se condições sobre a variável dependente na fronteira F_R da região R , em que se

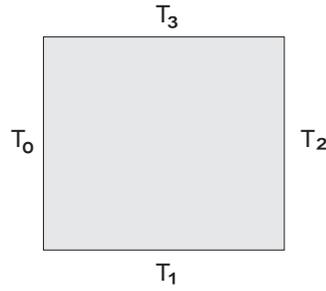


Figura 2.4: Chapa plana cujas bordas são mantidas a diferentes temperaturas

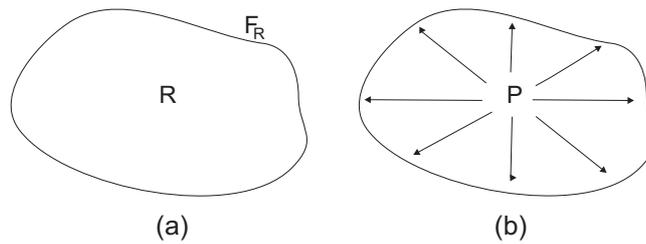


Figura 2.5: Região R com fronteira F_R na qual resolvem-se problemas de equilíbrio. (a) As condições sobre a variável dependente são aplicadas ao longo de toda a fronteira da região. (b) Perturbação no ponto P influencia toda região R .

quer resolver o problema. Problemas que exigem condições ao longo da fronteira (contorno) F_R de toda a região são denominados de problemas de valor de contorno (PVC) [6].

Uma característica dos problemas regidos por equações elípticas é que toda a região R é imediatamente afetada por qualquer mudança no valor da variável dependente em um ponto P no interior da região R , como pode ser visto na fig. 2.5b, ou em sua fronteira.

2.6.2 Problemas transientes

Os problemas transientes, ou de propagação, envolvem a variação temporal das grandezas físicas de interesse. Os fenômenos transientes são modelados por equações diferenciais parabólicas ou hiperbólicas. Quando apresentam mecanismos de dissipação de energia (por exemplo na difusão de calor e no escoamento de fluidos viscosos), os fenômenos ditos dissipativos são descritos por equações parabólicas. Caso contrário, são representados por equações hiperbólicas [5].

Equações parabólicas

Um exemplo clássico tratado no estudo de equações diferenciais parciais é o problema da difusão de calor. Nesse problema, considere uma barra de metal homogênea de comprimento 10cm , com

espessura e largura desprezíveis. A função $T(x, t)$ determina a temperatura da barra em um ponto x em um instante t . Considere para este problema que a barra está isolada termicamente ao longo de seu comprimento, mas que tem suas extremidades mantidas às temperaturas de $T_0 = T_1 = 50^\circ C$, ou seja, as condições de contorno $T(0, t) = T(10, t) = 50^\circ C$ descrevem a temperatura da barra nas extremidades. O modelo é descrito pela seguinte equação parabólica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \quad (2.75)$$

na qual T é a temperatura, α é o coeficiente de difusividade térmica característica do material e ∇^2 é o *operador laplaciano* [7]. Como existe troca de calor somente no sentido do comprimento, a equação pode ser reescrita da seguinte forma

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.76)$$

Supondo a barra inicialmente à temperatura $T = 0^\circ C$, deseja-se conhecer a evolução temporal da temperatura ao longo da barra.



Figura 2.6: Barra termicamente isolada

A figura 2.7 mostra o gráfico da temperatura da barra em diferentes instantes de tempo. A partir do estado inicial, há uma sucessão de distribuições de temperaturas transientes. Após um tempo suficientemente longo, o equilíbrio térmico é alcançado e a temperatura da barra não varia mais. Obtém-se, então, uma distribuição uniforme de temperaturas, como esperado.

Para se estudar a evolução temporal da temperatura na barra, é necessário que o valor inicial da temperatura ao longo da mesma seja especificado. Com essa informação, e sabendo que a temperatura nos extremos da barra é mantida constante a $50^\circ C$ (condição de contorno), pode-se obter a distribuição da temperatura ao longo da barra para diferentes instantes de tempo. As condições de contorno, combinadas com as condições iniciais, são denominadas condições auxiliares. Problemas transientes que necessitam de condições iniciais em $t = 0$ além de condições de contorno para $t > 0$ são denominados problemas de valor inicial (PVI) [6].

Diferente dos problemas elípticos, pode-se calcular a temperatura da barra em qualquer instante de tempo $t > 0$. Portanto, a região R (ver fig. 2.8) de solução de problemas parabólicos é aberta.

Considere o exemplo da chapa em duas dimensões espaciais da fig. 2.4. A eq.(2.75) se torna a equação de difusão transiente de calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (2.77)$$

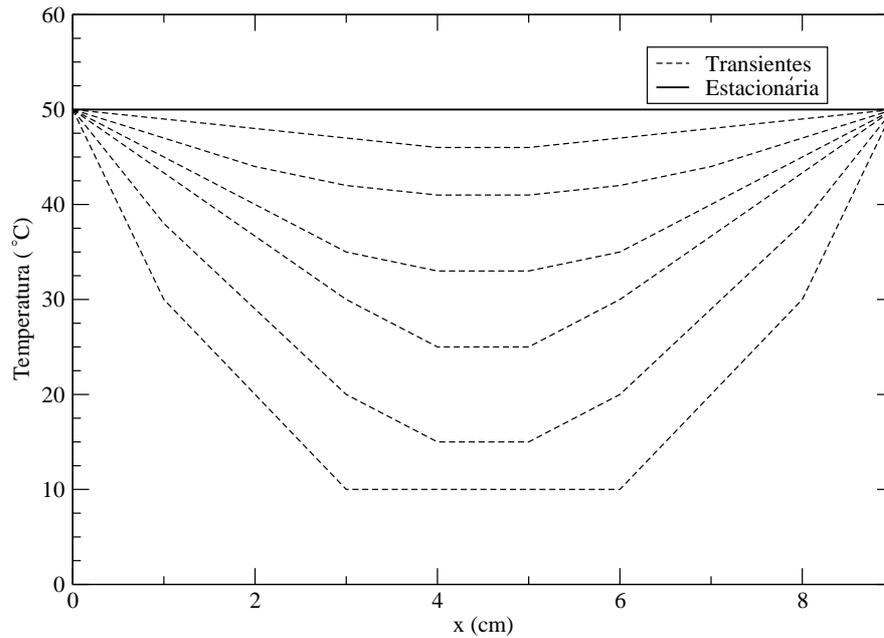


Figura 2.7: Distribuição da temperatura em uma barra para diferentes instantes de tempo.

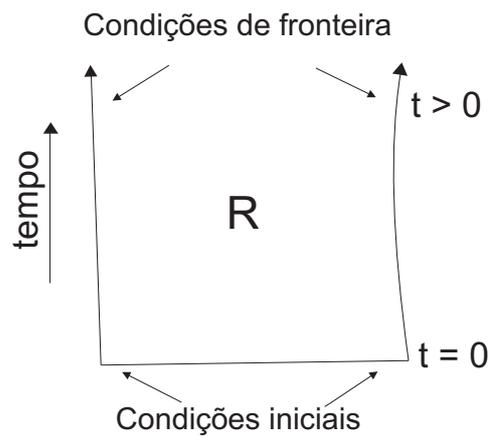


Figura 2.8: Problemas transientes necessitam de condições iniciais e de contorno. A região R em que se determina a solução é aberta.

Para o caso em que as condições de contorno são constantes a tendência é que a temperatura não se altere após determinado tempo t , ou seja, a solução de um problema parabólico tende à solução do problema elíptico equivalente se $\frac{\partial T}{\partial t} \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$, atingindo assim o estado estacionário. Note então que a equação parabólica 2.77 se torna a equação de Laplace

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (2.78)$$

Equações hiperbólicas

Equações hiperbólicas estão relacionadas a problemas de vibração ou de convecção, em que os fenômenos dissipativos são mínimos ou podem ser desprezados. Problemas descritos por equações hiperbólicas são problemas de valor inicial, e da mesma forma que em problemas parabólicos, a região R da solução também é aberta [4].

A equação modelo do problema hiperbólico é a equação de convecção que, para uma dimensão espacial, é escrita como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.79)$$

onde ϕ é transportado para a direita ao longo de x com velocidade $\nu > 0$. O produto $-\nu \frac{\partial \phi}{\partial x}$ é denominado termo convectivo ou inercial.

Capítulo 3

ANÁLISE NUMÉRICA

3.1 Introdução

Antes do advento dos computadores, a aplicação dos métodos numéricos sofria grandes restrições, pois muitos dos cálculos necessários demandavam grande esforço humano. Antes da década de 40 haviam dispositivos que, embora facilitassem alguns cálculos, criavam muitos problemas na sua utilização. A partir do surgimento dos computadores na década de 40, muitos problemas passaram a ser resolvidos a contento e, a partir daí, cada vez mais ampliaram-se o tipo e o número de problemas tratáveis pela nova máquina. Algumas das propriedades básicas da aritmética real não valem quando executadas no computador, pois, enquanto na matemática alguns números são representados por infinitos dígitos, no computador isso não é possível, pois uma palavra da memória é finita e a própria memória também. Surgem então problemas e várias maneiras de solucioná-los. O estudo da matemática do ponto de vista computacional constitui a matemática computacional [8].

A análise numérica ou matemática numérica insere-se no contexto da matemática computacional, que é a área da matemática que se preocupa com o desenvolvimento, emprego e estudo de métodos numéricos, podendo ser subdividida da seguinte forma:

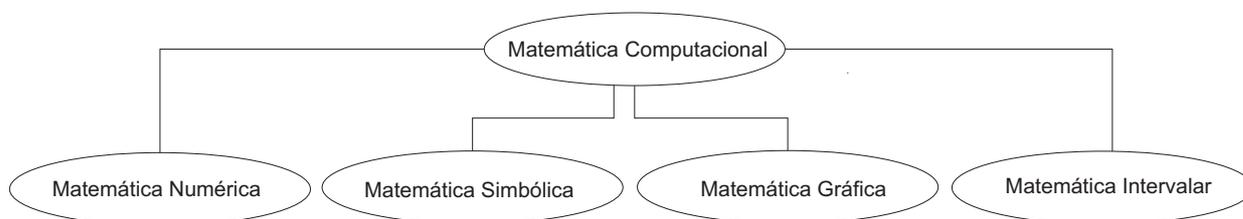


Figura 3.1: A matemática computacional e as suas subdivisões.

A análise numérica é a parte da matemática computacional que se preocupa com o desenvolvimento de algoritmos para resolução aproximada de problemas. Utiliza como sistema de operações o

conjunto básico de operações aritméticas $\{+, -, *, /\}$, e através delas são implementadas as demais operações necessárias [9]. A matemática simbólica lida com modelos de forma literal e busca uma solução analítica exata para os problemas matemáticos. A matemática gráfica trabalha com dados de forma gráfica e busca representar a solução dos seus problemas também na forma gráfica. A matemática intervalar lida com dados na forma de intervalos numéricos, buscando controlar os limites de erro dos processos da matemática numérica [8].

A análise numérica é o estudo de algoritmos para encontrar a solução de problemas intratáveis na matemática contínua [10], visando à máxima economia e confiabilidade.

3.1.1 Algoritmos

Informalmente, um algoritmo é um procedimento computacional bem-definido que toma como entrada um ou mais valores e produz como saída um ou mais valores correspondendo a solução de um problema computacional [11].



Figura 3.2: Representação esquemática para o funcionamento de um algoritmo.

Algoritmos numéricos

São os algoritmos voltados ao processamento numérico, isto é, as operações aritméticas formam o cerne do algoritmo e seu objetivo é obter um ou mais resultados numéricos [8]. Um algoritmo numérico de boa qualidade tem as seguintes características:

- inexistência de erro lógico
- inexistência de erro em tempo de execução
- quantidade finita de cálculos
- existência de um critério de exatidão
- independência da máquina
- precisão infinita
- eficiência

3.2 Etapas na solução numérica de um problema

A solução numérica de um problema pode ser obtida em quatro etapas básicas: definição do problema, modelagem matemática, solução numérica e análise dos resultados [12]. O processo de solução de um problema físico, por meio da aplicação de métodos numéricos, é representado na fig. 3.3 de uma forma geral



Figura 3.3: Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema

3.2.1 Definição do problema

Nesta etapa, defini-se qual é o problema real a ser resolvido.

3.2.2 Modelagem matemática

Um modelo matemático é uma representação idealizada e muitas vezes simplificada da natureza. Quando derivado de maneira criteriosa, sua solução simula propriedades dos processos naturais envolvidos tais como velocidade e pressão no escoamento de um fluido, temperatura, umidade, direção dos ventos e precipitação na previsão do tempo, trajetória de um satélite artificial, entre outras muitas aplicações [13]. Para investigar os problemas que surgem nas áreas de Física, Biologia, Engenharia e outras, torna-se imprescindível a construção de modelos matemáticos que descrevem aproximadamente o comportamento de um sistema real [14].

Os sistemas físicos reais, em sua grande maioria, recebem influência de variáveis do ambiente e de características que estão ligadas à sua própria constituição. Essas influências são inúmeras e cabe ao pesquisador investigar e selecionar as características que têm maior impacto no comportamento do sistema. Essa filtragem é fundamental, pois, se um modelo contiver todas as características que o sistema físico real apresenta, provavelmente será tão difícil de tratar quanto o fenômeno que se propõe a modelar [15].

3.2.3 Solução numérica

A escolha do método numérico mais apropriado para resolver o modelo matemático é feita nesta fase. Após a escolha do método, este é descrito por intermédio de um algoritmo, o qual é posteriormente

implementado em um computador para obtenção dos resultados numéricos. Esta etapa pode ser dividida em três fases: elaboração do algoritmo, codificação do programa e processamento do programa [12].

Elaboração do algoritmo

Um algoritmo é a descrição de um conjunto de comandos que, quando ativados, resultam em uma sucessão finita de acontecimentos. Em vez de implementar um método diretamente em uma linguagem de programação, é preferível descrevê-lo por meio de uma notação algorítmica. Com isto, é possível abstrair dos detalhes da linguagem de programação e concentrar apenas nos aspectos matemáticos do método [12].

A descrição do método em uma notação algorítmica facilita a sua implementação em qualquer linguagem de programação.

Codificação do programa

Nesta fase, o algoritmo é implementado na linguagem de programação escolhida. A preocupação aqui é apenas com os detalhes da linguagem.

Processamento do programa

Finalmente, o código do programa obtido da implementação do algoritmo em uma linguagem de programação deve ser editado em um arquivo para que possa ser executado pelo computador. Se for detectado algum erro de sintaxe, ele tem que ser corrigido para que a execução do programa produza os resultados aguardados.

3.2.4 Análise dos resultados

A adequação da solução numérica ao problema real é verificada nesta última etapa. Se a solução não se mostra satisfatória, deve-se obter um novo modelo matemático e determinar uma nova solução numérica [16].

Usualmente, a solução do modelo matemático pode produzir soluções que não têm sentido físico, como, por exemplo, tempo negativo. A função da análise dos resultados é justamente diferenciar qual solução é válida.

3.3 Erros

A obtenção de uma solução numérica para um problema físico por meio da aplicação de métodos numéricos nem sempre fornece valores que se encaixam dentro dos limites razoáveis. Esta afirmação é

verdadeira mesmo quando se aplica um método adequado e os cálculos são efetuados de uma maneira correta [16].

Esta diferença é chamada de erro e é inerente ao processo, não podendo, em muitos dos casos, ser evitada. É de importância fundamental conhecer as causas desses erros para minimizar as suas conseqüências [12].

Erros na modelagem

Ao tentar representar um fenômeno do mundo físico por meio de um modelo matemático, raramente se tem uma descrição correta deste fenômeno. Normalmente, são necessárias várias simplificações do mundo físico para que se tenha um modelo matemático com o qual se possa trabalhar além da utilização de dados obtidos por medidas experimentais. Entretanto, pode ocorrer tanto uma modelagem incorreta, na qual a expressão matemática não reflete perfeitamente o fenômeno físico, quanto os dados terem sido obtidos com pouca exatidão [16].

Erros de arredondamento

Um número decimal qualquer, por exemplo $0,3_{10}$ ($0,3$ na base 10), não pode ser representado exatamente em um computador, porque ele tem que ser convertido para a base 2 e armazenado em um número finito de *bits*. O erro causado por esta imperfeição na representação de um número é chamado de erro de arredondamento [12].

Um erro de arredondamento é produzido quando uma calculadora ou um computador é utilizado para realizar cálculos com números reais. O erro ocorre porque a aritmética utilizada pela máquina utiliza apenas números com um número finito de dígitos, o que faz com que os cálculos sejam executados com valores aproximados dos números verdadeiros envolvidos. Em um computador típico, apenas um subconjunto relativamente pequeno do campo dos números reais é utilizado para a representação de todos os números reais. Esse subconjunto contém apenas números racionais, tanto positivos como negativos, e armazena a porção fracionária juntamente com uma porção exponencial [9].

Erros de truncamento

São erros provenientes da utilização de processos que deveriam ser infinitos ou muito grandes para a determinação de um valor e que, por razões práticas, são truncados.

Estes processos infinitos são muito utilizados na avaliação de funções matemáticas, tais como, exponenciação, logaritmos, funções trigonométricas e várias outras que uma máquina pode executar [16].

Por exemplo, para avaliar $f(x) = \text{sen}(x)$ esta tem que ser aproximada por uma série, tal como,

$$\text{sen}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, 0 \leq x \leq \frac{\Pi}{4} \quad (3.1)$$

À medida que n aumenta, mais o valor da série se aproxima do valor real e o erro de truncamento diminui, ficando claro que estes erros são devidos ao truncamento da série.

Erro absoluto e erro relativo

O erro cometido na computação de um resultado pode ser medido de duas maneiras. Se \wp é uma aproximação para p , o erro absoluto é

$$\text{erro absoluto} = |p - \wp| \quad (3.2)$$

e o erro relativo é

$$\text{erro relativo} = \frac{|p - \wp|}{|p|} \quad (3.3)$$

Como uma medida de precisão, o erro absoluto pode ser enganoso e o erro relativo é mais significativo, na medida que este último leva em consideração a magnitude dos valores [9].

Erro grosseiro

A possibilidade de um computador cometer um erro é muito pequena. No entanto, podem ser cometidos erros na elaboração do algoritmo, na sua implementação e mesmo na digitação de dados. Executar o programa, cujo resultado seja conhecido, ajuda a remover erros, mas demonstra, apenas, que o programa está correto para aquela massa de dados. A solução seria elaborar uma prova de correção de programa através de métodos formais para validar o programa, que é uma tarefa não trivial [12].

3.4 Aproximação por diferenças finitas

“A essência dos métodos numéricos está na discretização do contínuo. É esta discretização que torna finito o problema e portanto viabiliza sua solução através dos computadores [17].”

Computacionalmente, só é possível lidar com uma região contínua $[t_0, t_f]$ se existir uma fórmula analítica para a solução do problema. O computador pode, então, ser utilizado para calcular a solução em qualquer ponto desejado da região, com o uso dessa fórmula [6].

No caso de técnicas numéricas de solução não é possível tratar a região $[t_0, t_f]$ como contínua, já que o método numérico obtém a solução em pontos t da região, ou seja, não será obtida uma aproximação

contínua para a solução $y(t)$; pelo contrário, serão geradas aproximações para essa solução em diversos valores, chamados pontos da rede ou da malha, no intervalo $[t_0, t_f]$. Obtida a aproximação nos pontos, pode-se obter, por interpolação, a solução aproximada em outros pontos do intervalo.

Será tratado aqui apenas o problema unidimensional, pois isto facilita o entendimento e a generalização pode ser obtida sem muitas dificuldades. Primeiramente, estipula-se que os pontos de uma rede têm uma distribuição uniforme em todo o intervalo $[t_0, t_f]$. Essa condição é garantida ao selecionar um número inteiro positivo N e os pontos de rede

$$t_i = t_0 + ih, \text{ para cada } i = 0, 1, 2, \dots, N \quad (3.4)$$

em que $h = \frac{(t_f - t_0)}{N}$ é a distância comum entre os pontos, chamada de tamanho do passo.

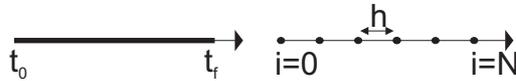


Figura 3.4: Representação do intervalo contínuo $[t_0, t_f]$ e de uma malha unidimensional associada a ele.

Esse processo recebe o nome de discretização e ao conjunto de pontos discretos, é dado o nome de malha [9].

Para que seja possível tratar numericamente equações diferenciais, elas devem ser expressas na forma de operações aritméticas que o computador possa executar, ou seja, deve-se discretizar a equação diferencial. Portanto, antes de resolver qualquer equação diferencial de forma numérica, é necessário encontrar para os termos que nela aparecem, as respectivas expressões escritas em função dos pontos da malha. Essas expressões são denominadas de aproximações por diferenças finitas. O resultado final desse processo é uma equação algébrica, denominada equação de diferenças finitas (EDF) [6].

Pode-se pensar nas aproximações de diferenças finitas como o inverso do processo de determinação do limite utilizado para obter a derivada de uma função f . Considere-se a definição da derivada de uma função f contínua.

$$\frac{df}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h} \quad (3.5)$$

Uma aproximação de diferenças finitas para $\frac{df}{dt}$ é dada pelo lado direito da eq.(3.5), sem tomarmos o limite da expressão. Utilizando-se dois valores de f separados por uma distância finita h , a eq.(3.5) representa uma aproximação algébrica para a primeira derivada de f . Aproximações de diferenças finitas efetivamente substituem o operador diferencial contínuo por uma aproximação discreta, calculada a partir dos valores de f em um número finito de pontos.

3.4.1 Expansões em série de Taylor

A expansão em série de Taylor de uma função f é a base para as aproximações de diferenças finitas. Supondo que f seja contínua no intervalo $[t_0, t_f]$ e que possua derivadas até ordem N contínuas nesse intervalo, o Teorema de Taylor nos permite escrever, para todo ponto $t \in [t_0, t_f]$,

$$f(t) = f^{(0)}(t_0) + (t - t_0)f^{(1)}(t_0) + \frac{(t - t_0)^2}{2!}f^{(2)}(t_0) + \frac{(t - t_0)^3}{3!}f^{(3)}(t_0) + \dots + \frac{(t - t_0)^N}{N!}f^{(N)}(\xi) \quad (3.6)$$

em que $\xi \in [t_0, t_f]$ e $f^{(n)}(t_0)$ representa a derivada de ordem n da função f calculada no ponto t_0 .

Considere a região discretizada da fig. 3.5, em que os pontos são uniformemente espaçados de $\Delta t = t_{i+1} - t_i$.

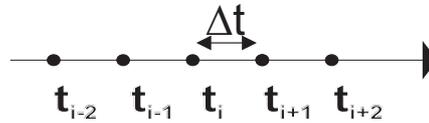


Figura 3.5: Malha unidimensional de pontos uniformemente espaçados.

A primeira derivada de uma função f no ponto $t_i = i\Delta t$, pode ser encontrada expandindo $f(t_i + \Delta t)$ em série de Taylor em torno do ponto t_i [7].

$$f(t_i + \Delta t) = f(t_i) + (\Delta t)f'(t_i) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}f''(t_i) + \frac{(\Delta t)^3}{3!}f^{(3)}(t_i) + \dots \quad (3.7)$$

em que “...” indica os termos restantes da série de Taylor até a N -ésima derivada de f . Para garantir a existência das expansões em série de Taylor, N será considerado sempre maior que a maior ordem das derivadas que aparecem nessas expansões. É importante ressaltar que a derivada não é apropriada para o caso em que a função f é quase contínua, neste caso a diferença entre $f(t_i + \Delta t)$ e $f(t_i)$ é muito pequena, o que poderia parecer um ruído.

Isolando a primeira derivada, a eq.(3.7) pode ser reescrita como

$$f'(t_i) = \frac{f(t_i + \Delta t) - f(t_i)}{\Delta t} + \left[-\frac{(\Delta t)}{2!}f''(t_i) - \frac{(\Delta t)^2}{3!}f^{(3)}(t_i) - \dots \right] \quad (3.8)$$

A eq.(3.8) indica que a primeira derivada $f'(t_i)$ é igual ao quociente

$$\frac{f(t_i + \Delta t) - f(t_i)}{\Delta t} \quad (3.9)$$

mais os termos da série de Taylor até a N -ésima derivada de f

$$= \left[-\frac{(\Delta t)}{2!}f''(t_i) - \frac{(\Delta t)^2}{3!}f^{(3)}(t_i) - \dots \right] \quad (3.10)$$

Ao conjunto desses termos é dado o nome de erro local de truncamento (ELT). Esse erro aparece devido à utilização de um número finito de termos na série de Taylor. O ELT fornece uma medida da diferença entre o valor exato da derivada e sua aproximação numérica, indicando também como essa diferença varia com a redução do espaçamento Δt , isto é, com o refinamento da malha [6].

Considerando-se $0 < \Delta t < 1$, pode-se supor que o termo dominante do ELT será o primeiro, isto é, aquele com a menor potência de Δt . A eq.(3.10) sugere que o erro descrece linearmente com a redução do espaçamento Δt . Assim para que o ELT seja reduzido por cinco, deve-se utilizar um espaçamento $\frac{1}{5}\Delta t$ e, portanto, cinco vezes mais pontos na malha, o que aumenta consideravelmente o custo computacional. Os termos do ELT (3.10) serão representados por $O(\Delta t)$, ou seja, erro da ordem Δt . Deve-se notar que uma expressão do tipo $O(\Delta t)$ só indica como o erro local de truncamento varia com o refinamento da malha, e não o valor do erro.

A eq.(3.8) pode ter a notação simplificada se escrevermos f_i para $f(t_i)$ ou, em geral, $f_i \pm k$ para $f(t_i \pm k\Delta t)$.

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.11)$$

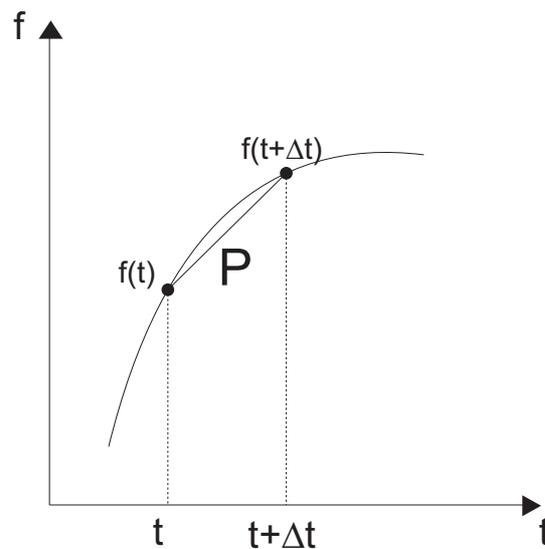


Figura 3.6: Pontos utilizados na eq.(3.11) para o cálculo da primeira derivada de f por diferença progressiva.

A eq.(3.11) é uma equação de diferenças finitas que representa uma aproximação de primeira ordem para a derivada de f . É de primeira ordem porque, no termo dominante do ELT, Δt aparece elevado à primeira potência. É de diferenças progressivas porque, no cálculo da derivada no ponto t_i , foi utilizado um ponto adiante de t_i , no caso, t_{i+1} . A inclinação de f em t_i é aproximada pela inclinação da reta P na fig(3.6).

Percebe-se intuitivamente que, quanto menor o espaçamento Δt , mais próxima de $f'(t_i)$ será a

inclinação da reta P .

De modo semelhante, tomando $-\Delta t$ em (3.7), obtêm-se a eq.(3.12) que é uma aproximação por diferenças atrasadas. A fig.(3.7) mostra os pontos utilizados nessa aproximação e a inclinação da reta A aproxima a inclinação da função f em t_i .

$$f(t_i - \Delta t) = f(t_i) - (\Delta t)f'(t_i) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}f''(t_i) - \frac{(\Delta t)^3}{3!}f^{(3)}(t_i) + \dots \quad (3.12)$$

Isolando a primeira derivada, têm-se

$$f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.13)$$

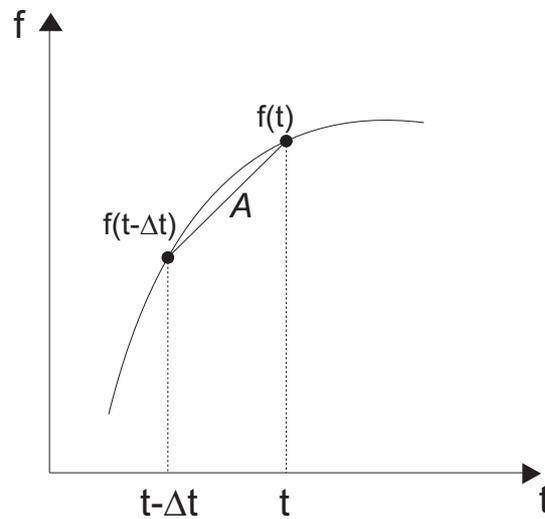


Figura 3.7: Pontos utilizados na eq.(3.13) para o cálculo da primeira derivada de f por diferença atrasada.

Uma aproximação de $O(\Delta t)^2$ pode ser obtida para a primeira derivada de f , manipulando convenientemente as expansões em série de Taylor (3.7) e (3.12).

$$f(t_i + \Delta t) = f(t_i) + (\Delta t)f'(t_i) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}f''(t_i) + \frac{(\Delta t)^3}{3!}f^{(3)}(t_i) + \dots$$

$$f(t_i - \Delta t) = f(t_i) - (\Delta t)f'(t_i) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}f''(t_i) - \frac{(\Delta t)^3}{3!}f^{(3)}(t_i) + \dots$$

Subtraindo a aproximação por diferenças atrasadas da aproximação por diferenças progressivas, têm-se uma aproximação de segunda ordem.

$$f(t_i + \Delta t) - f(t_i - \Delta t) = +2(\Delta t)f'(t_i) + \frac{(\Delta t)^3}{3!}f^{(3)}(t_i) + \dots \quad (3.14)$$

ou

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta t} + O(\Delta t)^2 \quad (3.15)$$

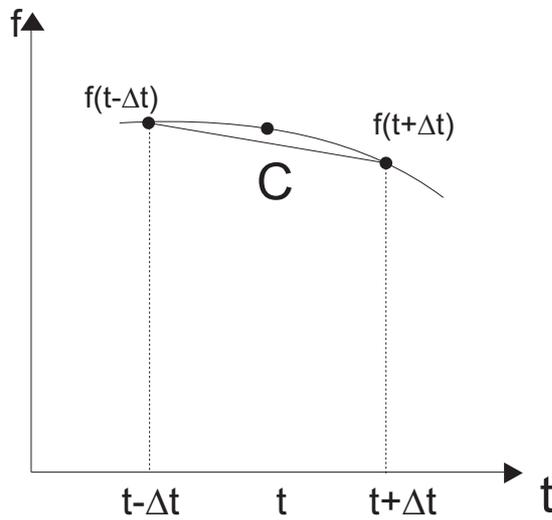


Figura 3.8: Pontos utilizados na eq.(3.15) para o cálculo da primeira derivada de f por diferença central.

Note que a eq.(3.15) é uma aproximação que utiliza os pontos t_{i+1} e t_{i-1} para o cálculo da primeira derivada de f no ponto central t_i . Esta aproximação é denominada aproximação por diferenças centrais. Reduções sucessivas do espaçamento Δt provocam uma redução quadrática no erro da aproximação da primeira derivada de f pela eq.(3.15). Isso é uma propriedade extremamente útil, já que, com menor número de pontos e, portanto, menor esforço computacional, pode-se conseguir uma aproximação melhor que as aproximações de primeira ordem [6].

Expressões para derivadas de ordem superior a 1 podem ser construídas da mesma maneira como foram obtidas as fórmulas para as primeiras derivadas, isto é, por meio de manipulações adequadas da série de Taylor. Como exemplo, pode-se determinar uma aproximação de diferenças centrais de segunda ordem para a derivada segunda de f , utilizando as expansões (3.7) e (3.12), de forma quando combinadas a primeira derivada de f seja eliminada, pois têm-se interesse na segunda derivada. As

derivadas de ordem superior a 2, que permanecerem, farão parte do ELT. Assim

$$f(t_i + \Delta t) + f(t_i - \Delta t) = 2f(t_i) + (\Delta t)^2 f''(t_i) + \frac{2(\Delta t)^4}{4!} f^{(4)}(t_i) + \dots \quad (3.16)$$

Rearranjando os termos,

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta t)^2} + O(\Delta t)^2 \quad (3.17)$$

A eq.(3.17) é a aproximação mais comum encontrada na literatura para derivadas de segunda ordem [6].

O método de Taylor tem mais interesse teórico do que importância prática, porque os resultados obtidos com a aplicação da eq. (3.11) não diferem essencialmente dos obtidos com o método de Euler que será discutido na próxima seção.

3.5 Métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias

Uma equação diferencial ordinária não tem necessariamente uma solução, e mesmo que a possua, nem sempre pode ser encontrada através de métodos analíticos, que são restritos apenas a algumas formas especiais de função [5]. Os métodos numéricos não possuem tal limitação. Contudo, a solução numérica é obtida como uma tabela de valores da função em vários valores da variável independente, em vez de uma relação funcional como na solução analítica. Desde modo, praticamente qualquer EDO pode ser resolvida numericamente. No entanto, se as condições iniciais forem alteradas, toda a tabela deverá ser recalculada.

3.5.1 Método de Euler

Baseado na aproximação por diferença progressiva, Euler elaborou em 1768, um método numérico para aproximação de equações diferenciais chamado Método de Euler [13]. O Método de Euler, ou método das tangentes, constitui umas das técnicas mais simples para aproximar soluções de equações diferenciais. Apesar dele raramente ser utilizado na prática, a simplicidade de sua derivação serve para exemplificar as técnicas envolvidas na construção de métodos mais avançados [9].

Esse método tem por objetivo a obtenção de uma aproximação de um problema de valor inicial

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= f(t, y) \\ y(t_0) &= y_0 \\ t_0 &\leq t \leq t_f \end{aligned} \quad (3.18)$$

Como foi visto na seção 3.4.1, o Teorema de Taylor é utilizado para derivar o método de Euler [7]. Suponha que $y(t)$, a única solução da eq.(3.18), tenha duas derivadas contínuas em $[t_0, t_f]$, de modo

que, para cada $i = 0, 1, 2, \dots, N - 1$,

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + (t_{i+1} - t_i)y'(t_i) + \frac{(t_{i+1} - t_i)^2}{2}y''(\xi_i) \quad (3.19)$$

para algum número ξ_i em (t_i, t_{i+1}) . Como $h = t_{i+1} - t_i$, então

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_i) \quad (3.20)$$

e, como $y(t)$ satisfaz a equação diferencial (3.18),

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_i) \quad (3.21)$$

Pode-se escrever a eq.(3.21) na forma da eq.(3.11),

$$f(t_i, y(t_i)) = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} + \left[-\frac{h}{2}y''(\xi_i) \right] \quad (3.22)$$

Note que o erro local de truncamento no método de Euler é $O(h)$. O método de Euler constrói $w_i \approx y(t_i)$ para cada $i = 0, 1, 2, \dots, N$, ao eliminar o termo restante. Dessa forma o método de Euler é

$$\begin{aligned} w_0 &= y_0 \\ w_{i+1} &= w_i + hf(t_i, w_i), \text{ para cada } i = 0, 1, 2, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (3.23)$$

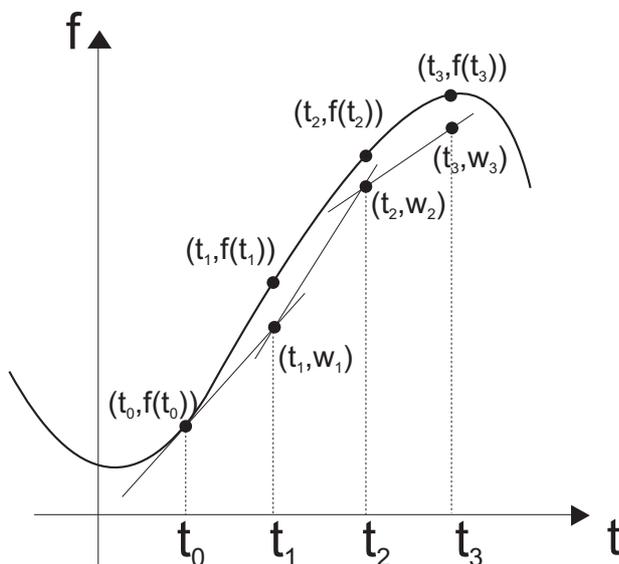


Figura 3.9: Aproximação pelo método de Euler

A eq.(3.23) é a equação de diferenças finitas associada ao método de Euler. A solução desses tipos de equações são similares, em muitos aspectos, à teoria e à solução das equações diferenciais [9].

Equivalente a eq.(3.11), a eq.(3.23) é uma aproximação de diferenças progressivas, também conhecida como aproximação explícita.

O método de Euler possui um erro que aumenta à medida que o valor de h aumenta. Esse aumento controlado do erro é consequência da estabilidade do método de Euler, que implica que, no pior dos casos, o erro aumenta de forma linear.

Da mesma forma a versão implícita do método de Euler pode ser calculada pela eq.(3.24)

$$\begin{aligned}w_0 &= y_0 \\w_{i+1} &= w_i + h.f(t_{i+1}, w_{i+1}), \text{ para cada } i = 0, 1, 2, \dots, N-1\end{aligned}\tag{3.24}$$

No caso em que f é não linear a eq.(3.24) define o vetor y_{i+1} implicitamente e portanto seu cálculo exige a utilização de métodos para a solução de sistemas de equações não lineares, como por exemplo, o método das aproximações sucessivas ou método de Newton [12].

Um pseudo-código para a solução do problema de valor inicial pelo método de Euler é mostrado no algoritmo 3.5.1.

Algoritmo 3.5.1 Método de Euler

Para aproximar a solução do problema de valor inicial

$$y' = f(t, y), t_0 \leq t \leq t_f, y(t_0) = y_0$$

em $(N+1)$ números uniformemente espaçados no intervalo $[t_0, t_f]$;

ENTRADA: pontos extremos t_0, t_f ; inteiro N ; condição inicial y_0

SAÍDA: aproximação w a y nos $(N + 1)$ valores de t .

Passo 1 - Faça

$$h = (t_f - t_0)/N;$$

$$t = t_0;$$

$$w = y_0;$$

SAÍDA (t, w) .

Passo 2 - Para $i = 0, 1, 2, \dots, N$ siga os *Passos 3, 4*.

Passo 3 - Faça

$$w_{i+1} = w_i + hf(t, w_i); \quad (\text{Calcula } w_{i+1})$$

$$t = t_0 + ih; \quad (\text{Calcula } t_i)$$

Passo 4 - SAÍDA (t, w) .

Passo 5 - PARE

O método de Euler pode ser utilizado também para resolver equações diferenciais de segunda ordem. Considere a eq.(3.25)

$$\frac{d^2x}{dt^2} = a \tag{3.25}$$

que representa a derivada segunda da posição x em relação ao tempo t igual a aceleração a . Esta equação pode ser reescrita na forma de um sistema de duas equações diferenciais de primeira ordem

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= a \end{aligned} \tag{3.26}$$

em que v é a velocidade.

Método de Euler do primeiro ponto (EPP)

As equações do sistema (3.26) podem ser discretizadas pelo método de Euler e resolvidas numericamente

$$\begin{aligned}v_{i+1} &= v_i + a_i h \\x_{i+1} &= x_i + v_i h\end{aligned}\tag{3.27}$$

Estas equações constituem o conhecido método de Euler ou método do primeiro ponto, pois, no cálculo de x_{i+1} a velocidade utilizada é a velocidade calculada no passo anterior, ou seja, v_i [9].

Método de Euler do ponto final (EPF)

Na aproximação pelo método de Euler do ponto final, a velocidade é obtida da mesma forma que no método EPP, porém, no cálculo da posição, em vez de utilizar a velocidade no começo do intervalo, utiliza-se a velocidade no fim do intervalo, ou seja

$$\begin{aligned}v_{i+1} &= v_i + a_i h \\x_{i+1} &= x_i + v_{i+1} h\end{aligned}\tag{3.28}$$

Apesar da diferença entre a aproximação EPP e a aproximação EPF ser apenas a troca de v_i por v_{i+1} , esta última pode ser iterada um número maior de vezes fornecendo soluções mais precisas.

Método de Euler do ponto médio (EPM)

Assim como o método EPF, o método EPM ou método do Trapézio é uma variante do método EPP, onde no cálculo de x_{i+1} utiliza-se a média aritmética das velocidades no início e no fim do intervalo de iteração,

$$\begin{aligned}v_{i+1} &= v_i + a_i h \\x_{i+1} &= x_i + \frac{v_i + v_{i+1}}{2} h\end{aligned}\tag{3.29}$$

Substituindo-se v_{i+1} do sistema (3.27) na equação x_{i+1} do sistema (3.29), obtêm-se

$$x_{i+1} = x_i + v_i h + \frac{1}{2} a_i h^2\tag{3.30}$$

A aproximação EPM é mais razoável do que a aproximação EPP. Na verdade ela reproduz resultados exatos quando a aceleração é constante [12]. No entanto, EPP e EPM não são indicadas na solução de sistemas periódicos, pois os erros introduzidos em cada iteração são acumulativos.

3.5.2 Métodos de Runge-Kutta

Provavelmente um dos processos numéricos mais populares e, ao mesmo tempo, mais precisos para obter soluções aproximadas de equações diferenciais ordinárias é o método de Runge-Kutta de quarta ordem [5].

Os métodos de Runge-Kutta (RK) possuem um erro local de truncamento de alta ordem. Essa propriedade tem um impacto direto no custo computacional do problema, pois os valores de h estão diretamente relacionados ao número de iterações necessárias para a convergência da solução. Quanto menor for o valor do passo h , maior será o número de iterações necessárias para solucionar a equação para o mesmo intervalo $[t_0, t_f]$.

Método de Runge-Kutta de segunda ordem (RK2)

$$\begin{aligned}w_0 &= y_0 \\k_1 &= hf(t_i, w_i) \\k_2 &= hf\left(t_i + \frac{h}{2}, w_i + \frac{1}{2}k_1\right) \\w_{i+1} &= w_i + k_2 + O(h^2)\end{aligned}\tag{3.31}$$

para cada $i = 0, 1, 2, \dots, N - 1$.

Método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4)

$$\begin{aligned}w_0 &= y_0 \\k_1 &= hf(t_i, w_i) \\k_2 &= hf\left(t_i + \frac{h}{2}, w_i + \frac{1}{2}k_1\right) \\k_3 &= hf\left(t_i + \frac{h}{2}, w_i + \frac{1}{2}k_2\right) \\k_4 &= hf(t_i + h, w_i + k_3) \\w_{i+1} &= w_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^4)\end{aligned}\tag{3.32}$$

para cada $i = 0, 1, 2, \dots, N - 1$. Esse método tem o erro local de truncamento $O(h^5)$ e o erro global que é formado pela acumulação dos erros de truncamento local a cada passo, juntamente com os erros de arredondamento, ou seja, é erro máximo do método no intervalo total da aproximação é $O(h^4)$ [5].

O algoritmo 3.5.2 implementa o método de Runge-Kutta de quarta ordem [9].

Algoritmo 3.5.2 Método de Runge-Kutta de quarta ordem

Para aproximar a solução do problema de valor inicial

$$y' = f(t, y), t_0 \leq t \leq t_f, y(t_0) = y_0$$

em $(N+1)$ números uniformemente espaçados no intervalo $[t_0, t_f]$;

ENTRADA: pontos extremos t_0, t_f ; inteiro N ; condição inicial y_0

SAÍDA: aproximação w a y nos $(N + 1)$ valores de t .

Passo 1 - Faça

$$h = (t_f - t_0)/N; \quad t = t_0; \quad w = y_0;$$

SAÍDA (t, w) .

Passo 2 - Para $i = 0, 1, 2, \dots, N$ siga os Passos 3-5.

Passo 3 - Faça

$$k_1 = hf(t, w);$$

$$k_2 = hf(t + h/2, w + k_1/2);$$

$$k_3 = hf(t + h/2, w + k_2/2);$$

$$k_4 = hf(t + h, w + k_3);$$

Passo 4 - Faça

$$w = w + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6; \text{ (Calcula } w_i)$$

$$t = t_0 + ih; \quad \text{(Calcula } t_i)$$

Passo 5 - SAÍDA (t, w) .

Passo 6 - PARE

O método de Runge-Kutta pode ser generalizado para equações diferenciais de ordem superior.

$$\begin{aligned} u_1' &= f_1(t, u_1, u_2, \dots, u_m) \\ u_2' &= f_2(t, u_1, u_2, \dots, u_m) \\ u_3' &= f_3(t, u_1, u_2, \dots, u_m) \\ &\vdots \\ u_m' &= f_m(t, u_1, u_2, \dots, u_m) \end{aligned} \tag{3.33}$$

para $t_0 \leq t \leq t_f$ com as condições iniciais

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

Selecione um inteiro $N > 0$ e utilize $h = (t_f - t_0)/N$. Realizada a partição do intervalo $[t_0, t_f]$ em N subintervalos com os pontos da rede $t_j = t_0 + jh$, para cada $j = 0, 1, 2, \dots, N$. Utilize a notação

w_{ij} para indicar uma aproximação $u_i(t_j)$ para cada $j = 0, 1, 2, \dots, N$ e para cada $i = 0, 1, 2, \dots, m$, ou seja, w_{ij} aproxima a i -ésima solução $u_i(t)$ de (3.33) no j -ésimo ponto da rede t_j . Como condições iniciais utilize,

$$w_{1,0} = \alpha_1, w_{2,0} = \alpha_2, \dots, w_{m,0} = \alpha_m \quad (3.34)$$

O algoritmo 3.5.3 implementa o método de Runge-Kutta de quarta ordem para os sistemas de valor inicial [9].

Algoritmo 3.5.3 Método de Runge-Kutta de quarta ordem para Sistemas de Equações Diferenciais

Para aproximar a solução do sistema de m -ésima ordem dos problemas de valor inicial de primeira ordem

$$u'_j = f_j(t, u_1, u_2, \dots, u_m), t_0 \leq t \leq t_f, \text{ com } u_j(t_0) = \alpha_j,$$

para $j = 1, 2, \dots, m$ em $(N+1)$ números uniformemente espaçados no intervalo $[t_0, t_f]$;

ENTRADA: pontos extremos t_0, t_f ; número de equações m ; inteiro N ; condições iniciais $\alpha_1, \dots, \alpha_m$

SAÍDA: aproximações w_j para $u_j(t)$ nos $(N + 1)$ valores de t .

Passo 1 - Faça

$$h = (t_f - t_0)/N;$$

Passo 2 - para $j = 1, 2, \dots, m$ faça $w_j = \alpha_j$;

Passo 3 SAÍDA $(t, w_1, w_2, \dots, w_m)$.

Passo 4 - Para $i = 0, 1, 2, \dots, N$ siga os *Passos 5-7*.

Passo 5 - Para $j = 1, 2, \dots, m$ faça

$$k_{1,j} = hf_j(t, w_1, w_2, \dots, w_m);$$

$$k_{2,j} = hf_j(t + h/2, w_1 + k_{1,1}/2, w_2 + k_{1,2}/2, \dots, w_m + k_{1,m}/2);$$

$$k_{3,j} = hf_j(t + h/2, w_1 + k_{2,1}/2, w_2 + k_{2,2}/2, \dots, w_m + k_{2,m}/2);$$

$$k_{4,j} = hf_j(t + h, w_1 + k_{3,1}, w_2 + k_{3,2}, \dots, w_m + k_{3,m});$$

$$w_j = w_j + (k_{1,j} + 2k_{2,j} + 2k_{3,j} + k_{4,j})/6;$$

Passo 6 Faça $t = t_0 + ih$;

Passo 7 - SAÍDA $(t, w_1, w_2, \dots, w_m)$.

Passo 8 - PARE

3.5.3 Consistência, convergência e estabilidade

Seja $y(t_i)$ a solução exata do problema de valor inicial (3.18) no ponto t_i e w_i uma aproximação obtida por um método numérico para essa solução.

Quando uma equação diferencial é resolvida numericamente, é natural questionar se a solução calculada w_i se aproxima, de alguma forma, da solução exata $y(t_i)$. Este questionamento faz muito sentido, já que o erro local de truncamento influencia na qualidade da aproximação numérica de equações diferenciais [6].

A resposta a essa pergunta depende da consistência das equações de diferenças finitas e da estabilidade e convergência do método numérico empregado.

Consistência

A consistência com a equação diferencial é uma característica importante de uma dada aproximação de diferenças finitas. Quando os erros de arredondamento são desprezados nos cálculos, e quanto menor for Δt , melhor será a aproximação para as derivadas de uma função f . Isso equivale afirmar que, quando $\Delta t \rightarrow 0$, o ELT tende a zero, e é possível recuperar a partir da expressão discreta, a aproximação contínua original [13].

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\phi(t + \Delta t) - \phi(t)}{\Delta t} = \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3.35)$$

Para verificar a consistência de uma discretização, deve-se substituir as expansões em série de Taylor na equação de diferenças finitas, e fazer $\Delta t \rightarrow 0$. Se o ELT vai para zero, a discretização é consistente com a equação diferencial. Esse é o caminho inverso da discretização.

Como exemplo, considere a equação diferencial (3.18)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

e sua aproximação pelo método de Euler(3.23)

$$w_{i+1} = w_i + hf(t_i, w_i), \text{ para cada } i = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

Para verificar se a discretização pelo método de Euler é consistente, deve-se expandir w_{i+1} em torno de t_i

$$w_{i+1} = w_i + (\Delta t)y'(t_i) + \frac{(\Delta t)^2}{2}y''(t_i) + O(\Delta t)^3 \quad (3.36)$$

Substituindo a eq.(3.36) em (3.23), obtêm-se

$$\begin{aligned}
 w_i + (\Delta t)y'(t_i) + \frac{(\Delta t)^2}{2}y''(t_i) + O(\Delta t)^3 &= w_i + \Delta t f(t_i, w_i) \\
 (\Delta t)y'(t_i) &= \Delta t f(t_i, w_i) - \frac{(\Delta t)^2}{2}y''(t_i) - O(\Delta t)^3 \\
 \underbrace{\frac{dy}{dt} = f(t_i, w_i)}_{EDO} &- \underbrace{\frac{(\Delta t)}{2} \frac{d^2y}{dt^2} - O(\Delta t)^2}_{\text{Erro local de truncamento}}
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Quando $\Delta t \rightarrow 0$, o ELT presente na eq.(3.37) tende a zero, fornecendo

$$\frac{dy}{dt} = f(t_i, w_i) \tag{3.38}$$

Isso indica que a discretização (3.23) é consistente com a equação diferencial (3.18). Embora possa parecer óbvio que todas as discretizações são consistentes com a equação diferencial original, algumas delas não o são, ou são apenas em alguns casos. Por isso, deve-se sempre verificar a consistência da discretização antes de trabalhar numericamente com ela [6].

Esse processo pode ser aplicado para verificar se uma equação de diferenças finitas é consistente tanto com EDO quanto com EDP.

Convergência

Definição 3.1 *O erro global no ponto t_i é definido por*

$$\xi_i = y(t_i) - w_i \tag{3.39}$$

A análise do erro global permite estabelecer a convergência de um método. Esta é uma propriedade muito desejável para um método numérico, pois ela garantirá que ao aplicar um refinamento na malha, o resultado numérico fique mais próximo do resultado exato.

Um método numérico é dito convergente se a solução numérica w_i se aproxima da solução exata $y(t_i)$, conforme $\Delta t \rightarrow 0$. A consistência é uma condição necessária para convergência, pois, se ao fazermos $\Delta t \rightarrow 0$ não recuperarmos a equação diferencial original, então, também a solução numérica w_i não se aproximará da solução exata $y(t_i)$ da equação diferencial original. No entanto, um esquema consistente é inútil se a solução numérica não for convergente [6].

Estabilidade

Um método numérico estável é aquele no qual quaisquer erros ou perturbações na solução não são amplificadas sem limite. Se esta amplificação está presente, a solução pode "explodir", ou seja, sofrer *overflow* ou *underflow*. O conceito de estabilidade está relacionado ao crescimento, ou diminuição dos erros introduzidos nos cálculos [5].

Para garantir a estabilidade do método numérico, deve-se seguir os seus critérios de estabilidade, isto é, condições que garantem que o método numérico seja estável.

Em relação à estabilidade dos métodos numéricos, eles podem ser classificados em:

- *Condicionalmente estáveis*: para fornecerem soluções numéricas estáveis, devem satisfazer uma condição de estabilidade. Métodos explícitos, em geral, são desse tipo.
- *Incondicionalmente estáveis*: não necessitam satisfazer quaisquer critérios de estabilidade para produzirem soluções estáveis. Em geral, métodos implícitos e alguns métodos explícitos pertencem a essa categoria.
- *Incondicionalmente instáveis*: não existem valores de Δt que permitem a eles fornecerem soluções estáveis. Tais métodos não devem ser utilizados.

A estabilidade de um método numérico é condição necessária e suficiente para a convergência [6].

3.6 Métodos numéricos para equações diferenciais parciais

A aproximação numérica da solução de uma equação a derivadas parciais é obtida pela transformação do problema contínuo em um problema discreto finito, exatamente como no caso das equações diferenciais ordinárias. No caso de equações diferenciais parciais o problema tem a dificuldade adicional do número de variáveis independentes ser maior que 1, isto é, o domínio deixa de ser um intervalo e passa a ser uma região do plano ou do espaço [13].

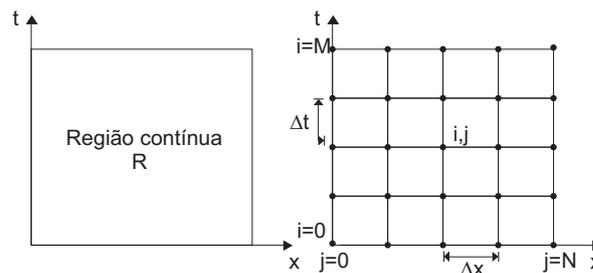


Figura 3.10: Representação de uma região contínua e discretizada

Observe que os pontos da malha localizam-se na interseção das linhas horizontais com as verticais, estando separados entre si por uma distância Δt e Δx não necessariamente iguais. Os índices i e j identificam um ponto na i -ésima linha e na j -ésima coluna, respectivamente. Assim um ponto (i, j) possui coordenadas $(t_0 + i\Delta t, x_0 + j\Delta x)$, em que o ponto (t_0, x_0) representa a origem do sistema de coordenadas.

3.6.1 Discretização de equações diferenciais estacionárias

Conforme mencionado na seção 2.6, os fenômenos físicos podem ser divididos em estacionários e transientes. No caso dos estacionários, o interesse é somente na solução estacionária, e não há a necessidade de calcular soluções em múltiplos instantes de tempo. Já os fenômenos transientes exigem o cálculo da solução em instantes sucessivos de tempo [13].

Considere a eq.(2.73) que é a equação de Laplace.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0$$

Essa equação pode ser discretizada por diferenças centrais de segunda ordem eq.(3.17), resultando em

$$\frac{f_{j+1,k} - 2f_{j,k} + f_{j-1,k}}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{j,k+1} - 2f_{j,k} + f_{j,k-1}}{(\Delta y)^2} = 0 \quad (3.40)$$

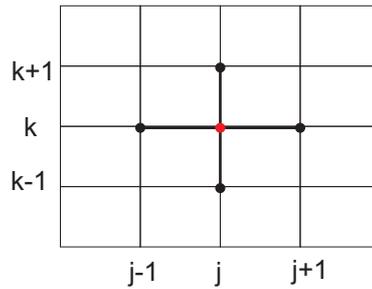


Figura 3.11: Molécula computacional correspondente à discretização explícita por diferenças centrais considerando uma malha bidimensional.

A molécula computacional é uma tradução gráfica de uma equação de diferenças finitas. A fig. 3.11 refere-se a eq.(3.40). Ela indica a posição relativa dos pontos presentes na equação. Isso permite visualizar a dependência entre eles, tanto na coordenada temporal i , como nas coordenadas espaciais j e k .

A eq.(3.40) pode ser simplificada multiplicando ambos os lados por $(\Delta x)^2$.

$$f_{j+1,k} - 2f_{j,k} + f_{j-1,k} + \frac{(\Delta x)^2}{(\Delta y)^2}(f_{j,k+1} - 2f_{j,k} + f_{j,k-1}) = 0 \quad (3.41)$$

e agrupando os termos

$$f_{j+1,k} + f_{j-1,k} - 2(1 + \beta^2)f_{j,k} + \beta^2(f_{j,k+1} + f_{j,k-1}) = 0 \quad (3.42)$$

em que $\beta = \frac{(\Delta x)^2}{(\Delta y)^2}$.

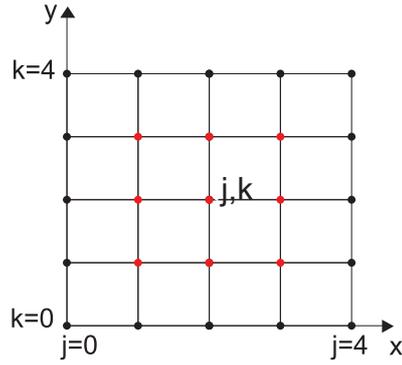


Figura 3.12: Domínio para a discretização por diferenças centrais de segunda ordem para a equação de Laplace.

A eq.(3.42) vale para todos os nove pontos discretos (j, k) , $1 \leq j \leq 3$ e $1 \leq k \leq 3$, do interior da região discretizada representada na fig. 3.12. Portanto, pode-se escrever

$$\text{Em (1,1): } f_{2,1} + f_{0,1} - 2(1 + \beta^2)f_{1,1} + \beta^2(f_{1,2} + f_{1,0}) = 0$$

$$\text{Em (2,1): } f_{3,1} + f_{1,1} - 2(1 + \beta^2)f_{2,1} + \beta^2(f_{2,2} + f_{2,0}) = 0$$

$$\text{Em (3,1): } f_{4,1} + f_{2,1} - 2(1 + \beta^2)f_{3,1} + \beta^2(f_{3,2} + f_{3,0}) = 0$$

$$\text{Em (1,2): } f_{2,2} + f_{0,2} - 2(1 + \beta^2)f_{1,2} + \beta^2(f_{1,3} + f_{1,1}) = 0$$

$$\text{Em (2,2): } f_{3,2} + f_{1,2} - 2(1 + \beta^2)f_{2,2} + \beta^2(f_{2,3} + f_{2,1}) = 0$$

$$\text{Em (3,2): } f_{4,2} + f_{2,2} - 2(1 + \beta^2)f_{3,2} + \beta^2(f_{3,3} + f_{3,1}) = 0$$

$$\text{Em (1,3): } f_{2,3} + f_{0,3} - 2(1 + \beta^2)f_{1,3} + \beta^2(f_{1,4} + f_{1,2}) = 0$$

$$\text{Em (2,3): } f_{3,3} + f_{1,3} - 2(1 + \beta^2)f_{2,3} + \beta^2(f_{2,4} + f_{2,2}) = 0$$

$$\text{Em (3,3): } f_{4,3} + f_{2,3} - 2(1 + \beta^2)f_{3,3} + \beta^2(f_{3,4} + f_{3,2}) = 0$$

Temos aqui um sistema linear com nove equações e igual número de incógnitas, o que garante que o sistema possua solução única. Deve-se notar que alguns valores de $f_{j,k}$ não são incógnitas (pontos na extremidade da região), já que, por estarem na fronteira da região, têm seus valores dados pela condição de contorno. Pode-se então escrever o sistema na forma matricial $Af = b$, sendo que b é formado pelas condições de contorno.

$$\begin{bmatrix}
\gamma & 1 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & \gamma & 1 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & \gamma & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 \\
\beta^2 & 0 & 0 & \gamma & 1 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 \\
0 & \beta^2 & 0 & 1 & \gamma & 1 & 0 & \beta^2 & 0 \\
0 & 0 & \beta^2 & 0 & 1 & \gamma & 0 & 0 & \beta^2 \\
0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & \gamma & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 1 & \gamma & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 1 & \gamma
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
f_{1,1} \\
f_{2,1} \\
f_{3,1} \\
f_{1,2} \\
f_{2,2} \\
f_{3,2} \\
f_{1,3} \\
f_{2,3} \\
f_{3,3}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
-f_{0,1} - \beta^2 f_{1,0} \\
-\beta^2 f_{2,0} \\
-f_{4,1} - \beta^2 f_{3,0} \\
-f_{0,2} \\
0 \\
-f_{4,2} \\
-f_{0,3} - \beta^2 f_{1,4} \\
-\beta^2 f_{2,4} \\
-f_{4,3} - \beta^2 f_{3,4}
\end{bmatrix}$$

Em que $\gamma = -2(1 + \beta^2)$. Resolvendo o sistema linear anterior, encontra-se a distribuição de f na região discretizada.

3.6.2 Discretização temporal

A partir dos valores iniciais das grandezas em t_0 , problemas transientes exigem o cálculo da solução da EDP em intervalos sucessivos de tempo Δt até o instante final t_f .

$$t_0, t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, t_0 + 3\Delta t, \dots, t_f - \Delta t, t_f$$

Considere a equação parabólica de difusão do calor (2.76) com condição inicial $f(t_0, x) = f_0$ e com condições de contorno do tipo Dirichlet $f(t, x_0) = C_1$ e $f(t, x_f) = C_2$, em que C_1 e C_2 são constantes.

$$\begin{aligned}
f(t_0, x) &= f_0 \\
f(t, x_0) &= C_1 \\
f(t, x_f) &= C_2 \\
\frac{\partial f}{\partial t} &= \alpha \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}
\end{aligned} \tag{3.43}$$

A eq.(3.43) possui duas variáveis independentes e deve ser discretizada tanto na dimensão temporal t quanto na dimensão espacial x .

Inicialmente, discretiza-se a eq.(3.43) na coordenada espacial, no ponto x_i . Suponha-se que a derivada espacial é discretizada por diferenças centrais de segunda ordem.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \alpha \frac{f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \tag{3.44}$$

É necessário discretizar (3.44) na coordenada temporal. A discretização temporal pode ser explícita ou implícita.

Discretização explícita

A derivada temporal da eq.(3.44) pode ser aproximada pela equação de diferenças progressivas de primeira ordem.

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{f^{i+1} - f^i}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.45)$$

Para a discretização temporal, o índice será sobrescrito f^{i+1} , e para a discretização espacial, o índice será subscrito, f_j . Substituindo (3.45) em (3.44), obtemos

$$\frac{f_j^{i+1} - f_j^i}{\Delta t} = \alpha \frac{f_{j-1}^i - 2f_j^i + f_{j+1}^i}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta t), (\Delta x)^2] \quad (3.46)$$

A eq.(3.46) pode ser reescrita na forma

$$f_j^{i+1} = f_j^i + \alpha s (f_{j-1}^i - 2f_j^i + f_{j+1}^i) \quad (3.47)$$

em que $s = \alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta x)^2}$. O lado direito da eq.(3.47) depende somente de valores de f conhecido no passo anterior i , ou seja, para o cálculo de f^{i+1} , são necessários todos os valores de f^i , este é o método de Euler explícito. A molécula computacional da eq.(3.47) está representada na figura 3.13.

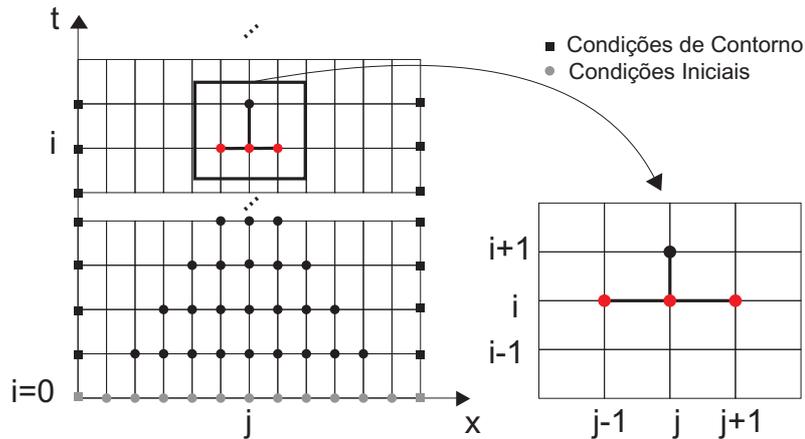


Figura 3.13: Molécula computacional da discretização explícita da eq.(3.47).

Uma característica das discretizações explícitas é que elas excluem valores das condições de contorno (fronteira), no nível de tempo i , que têm influência sobre a solução numérica do problema no nível de tempo $i + 1$. Esse é um efeito puramente numérico, sendo equivalente à existência de um atraso na propagação das condições de fronteira para dentro da região de domínio, e pode causar sérias imprecisões quando a condição de fronteira apresentar variações consideráveis entre sucessivos instantes de tempo [6].

Discretização implícita

As aproximações implícitas utilizam o mesmo processo de discretização temporal apresentado na aproximação explícita. A diferença entre as aproximações está, principalmente, na forma como se calcula f^{i+1} .

Ao contrário das discretizações explícitas, nos métodos implícitos as derivadas espaciais são discretizadas no nível de tempo $i + 1$ [13].

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \alpha \frac{f_{j-1}^{i+1} - 2f_j^{i+1} + f_{j+1}^{i+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad (3.48)$$

A derivada temporal pode ser aproximada por diferenças atrasadas em torno de $i + 1$.

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{f^{i+1} - f^i}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.49)$$

Substituindo (3.49) em (3.48), têm-se

$$\frac{f_j^{i+1} - f_j^i}{\Delta t} = \alpha \frac{f_{j-1}^{i+1} - 2f_j^{i+1} + f_{j+1}^{i+1}}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta t), (\Delta x)^2] \quad (3.50)$$

ou, agrupando os termos,

$$-s f_{j-1}^{i+1} + (1 + 2s) f_j^{i+1} - s f_{j+1}^{i+1} = f_j^i \quad (3.51)$$

em que $s = \alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta x)^2}$. A discretização (3.51) representa o método de Euler implícito.

A molécula computacional dá-nos uma idéia precisa da relação de dependência entre os diversos elementos da fórmula. Observe que a eq.(3.51) forma um sistema tridiagonal de equações, e ao resolvê-

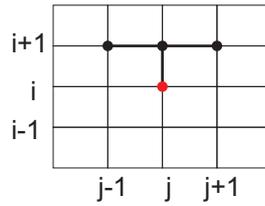


Figura 3.14: Molécula computacional da discretização implícita da eq.(3.51).

lo encontra-se todas as aproximações no nível $i + 1$. Esse conjunto de equações pode ser escrito na forma matricial $Af = b$ como

$$\begin{bmatrix} 1 + 2s & -s & 0 & \dots & 0 \\ -s & 1 + 2s & -s & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & -s & 1 + 2s & -s \\ 0 & \dots & 0 & -s & 1 + 2s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1^{i+1} \\ f_2^{i+1} \\ \vdots \\ f_{j_f-2}^{i+1} \\ f_{j_f-1}^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^i + s f_0^{i+1} \\ f_2^i \\ \vdots \\ f_{j_f-2}^i \\ f_{j_f-1}^i + s f_{j_f}^{i+1} \end{bmatrix}$$

Nos métodos explícitos as equações resultantes são independentes, permitindo, portanto, solução direta. Já nos métodos implícitos, as equações são acopladas, o que exige a resolução de um sistema de equações a cada passo no tempo. O sistema linear formado pela eq.(3.51) é esparso, sendo resolvido por procedimentos iterativos.

O critério de estabilidade do método explícito representado pela eq.(3.47) é dado por

$$s = \alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \quad (3.52)$$

Apesar de sua existência não ser intuitiva, o critério expresso pela eq.(3.52) deve ser seguido à risca para que não haja acúmulo de erros de arredondamento que, eventualmente, destruiriam a solução numérica. Caso a malha seja refinada para melhorar a precisão da solução, é necessário reduzir o valor de Δt . Suponha que sejam adotados os valores de Δt_0 e Δx_0 que satisfazem $\alpha \frac{(\Delta t_0)}{(\Delta x_0)^2} = \frac{1}{2}$. Se for utilizado o novo espaçamento $\Delta x_1 = \frac{\Delta x_0}{2}$, para manter $s = \frac{1}{2}$, o novo valor de Δt_1 será $\Delta t_1 = \frac{\Delta t_0}{4}$. Em termos computacionais, esse resultado implica, uma computação oito vezes mais longa, pois temos o dobro de pontos na malha e um passo de tempo 1/4 do original [6].

Foi visto que a desvantagem do método de Euler explícito é a sua instabilidade quando $s > \frac{1}{2}$. Os métodos implícitos, por serem incondicionalmente estáveis, são capazes de lidar sem problemas com valores de $s > \frac{1}{2}$. Com o objetivo de reduzir o tempo total de simulação, é possível adotar no método de Euler implícito, valores de Δt superiores aos dos métodos explícitos [9].

3.6.3 Método de Crank-Nicholson

Este é um dos métodos mais utilizados na solução numérica de EDP's parabólicas. O método de Crank-Nicholson é a média aritmética do método explícito com o implícito. Tomando a média entre as equações (3.46) e (3.50) obtemos o método de Crank-Nicholson [13].

$$\frac{f_j^{i+1} - f_j^i}{\Delta t} = \frac{1}{2} \alpha \left[\frac{f_{j-1}^i - 2f_j^i + f_{j+1}^i}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{j-1}^{i+1} - 2f_j^{i+1} + f_{j+1}^{i+1}}{(\Delta x)^2} \right] \quad (3.53)$$

O método semi-implícito de Crank-Nicholson é $O[(\Delta t)^2, (\Delta x)^2]$. A molécula computacional da eq.(3.53) está representada na figura 3.15.

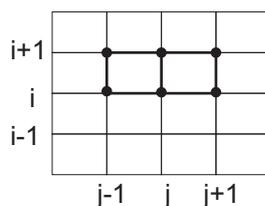


Figura 3.15: Molécula computacional do método de Crank-Nicholson.

3.6.4 Discretização bidimensional

A discretização de EDPs estacionárias para duas dimensões é apenas uma generalização direta das técnicas válidas para funções de uma única variável. O mesmo ocorre com os procedimentos para a discretização temporal [6].

Considere a equação parabólica de difusão em duas dimensões (3.54).

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \quad (3.54)$$

Discretização explícita

Podemos discretizar a eq.(3.54) pelo método de Euler explícito e diferenças centrais de segunda ordem:

$$\frac{f_{j,k}^{i+1} - f_{j,k}^i}{\Delta t} = \alpha \frac{f_{j-1,k}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j+1,k}^i}{(\Delta x)^2} + \alpha \frac{f_{j,k-1}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j,k+1}^i}{(\Delta y)^2} + O[(\Delta t), (\Delta x)^2, (\Delta y)^2] \quad (3.55)$$

ou

$$f_{j,k}^{i+1} = f_{j,k}^i + \alpha(\Delta t) \left[\frac{f_{j-1,k}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j+1,k}^i}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{j,k-1}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j,k+1}^i}{(\Delta y)^2} \right] + O[(\Delta t), (\Delta x)^2, (\Delta y)^2] \quad (3.56)$$

A restrição de estabilidade da eq.3.56 é a mesma vista na seção 3.6.2.

$$s = \alpha(\Delta t) \left[\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right] \leq \frac{1}{2} \quad (3.57)$$

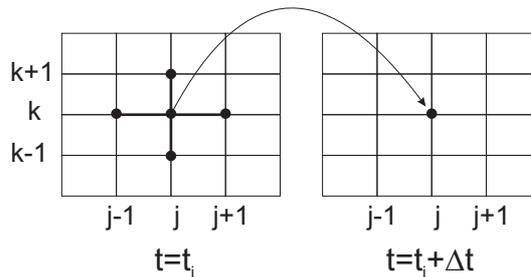


Figura 3.16: Molécula computacional da eq.(3.58)

A eq.(3.56) pode ser reescrita como

$$f_{j,k}^{i+1} = f_{j,k}^i + s_x(f_{j-1,k}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j+1,k}^i) + s_y(f_{j,k-1}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j,k+1}^i) \quad (3.58)$$

em que $s_x = \alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta x)^2}$ e $s_y = \alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta y)^2}$.

Apesar da discretização explícita 3.58 ser de implementação direta, sua restrição de estabilidade, muitas vezes, faz com que o valor de Δt seja muito pequeno. O método exige muitas iterações e, conseqüentemente, um longo tempo de computação. Para uma malha uniforme, onde $\Delta x = \Delta y = \Delta S$, a restrição de estabilidade 3.57 se torna

$$s = 2\alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta S)^2} \leq \frac{1}{2} \Rightarrow s = \alpha \frac{(\Delta t)}{(\Delta S)^2} \leq \frac{1}{4}$$

O critério de estabilidade 3.57 é duas vezes mais restritivo que a condição do caso unidimensional (3.52). Ao refinarmos a malha dividindo ΔS por dois, será preciso dividir o valor de Δt por quatro. Como há quatro vezes mais pontos, o custo computacional necessário será 16 vezes superior ao do problema original. A utilização de métodos implícitos ou semi-implícitos apresentam vantagens, pois o valor de Δt poderá ser escolhido apenas baseado na precisão desejada da solução.

Discretização implícita

A discretização implícita pode ser obtida se avaliarmos as derivadas espaciais no nível de tempo $i + 1$.

$$\frac{f_{j,k}^{i+1} - f_{j,k}^i}{\Delta t} = \alpha \frac{f_{j-1,k}^{i+1} - 2f_{j,k}^{i+1} + f_{j+1,k}^{i+1}}{(\Delta x)^2} + \alpha \frac{f_{j,k-1}^{i+1} - 2f_{j,k}^{i+1} + f_{j,k+1}^{i+1}}{(\Delta y)^2} + O[(\Delta t), (\Delta x)^2, (\Delta y)^2] \quad (3.59)$$

ou

$$-s_x(f_{j-1,k}^{i+1} + f_{j+1,k}^{i+1}) + (1 + 2(s_x + s_y))f_{j,k}^{i+1} - s_y(f_{j,k-1}^{i+1} + f_{j,k+1}^{i+1}) = f_{j,k}^i \quad (3.60)$$

A eq.(3.60) possui mais de uma incógnita, e deve ser resolvido um sistema de equações a cada passo no tempo, o que origina uma matriz de coeficientes pentadiagonal. O sistema linear resultante pode ser resolvido por métodos diretos ou iterativos com alto custo computacional [6].

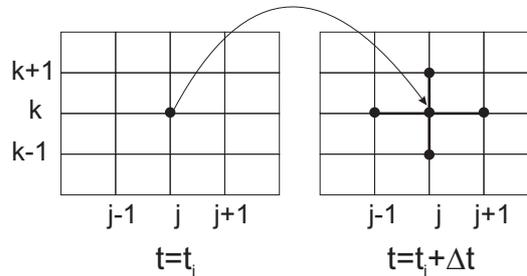


Figura 3.17: Molécula computacional da eq.(3.60)

Alternating-direction implicit

O método iterativo *Alternating-Direction Implicit*(ADI) é uma discretização semi-implícita semelhante ao método de Crank-Nicholson, que reduz o custo computacional da solução numérica. Este método é muito utilizado na solução de problemas nos quais, devido aos custos computacionais, o tratamento implícito de todos os termos das equações não é conveniente [20].

Aplicado à solução de problemas parabólicos em duas dimensões, o método ADI fatora a matriz pentadiagonal em duas matrizes tridiagonais. Desse modo cada passo no tempo Δt é feito em duas etapas.

Primeiramente a eq.(3.54) é discretizada como

$$\frac{f_{j,k}^{i+1/2} - f_{j,k}^i}{\Delta t/2} = \alpha \left[\frac{f_{j-1,k}^i - 2f_{j,k}^i + f_{j+1,k}^i}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{j,k-1}^{i+1/2} - 2f_{j,k}^{i+1/2} + f_{j,k+1}^{i+1/2}}{(\Delta y)^2} \right] \quad (3.61)$$

em que $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ foi aproximado explicitamente no nível de tempo i , enquanto os valores de $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ foi aproximado no nível de tempo $i + 1/2$. A eq.(3.61) gera um sistema tridiagonal que pode ser resolvido como no método de Crank-Nicholson.

Em seguida a eq.(3.54) é discretizada como

$$\frac{f_{j,k}^{i+1} - f_{j,k}^{i+1/2}}{\Delta t/2} = \alpha \left[\frac{f_{j-1,k}^{i+1} - 2f_{j,k}^{i+1} + f_{j+1,k}^{i+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{j,k-1}^{i+1/2} - 2f_{j,k}^{i+1/2} + f_{j,k+1}^{i+1/2}}{(\Delta y)^2} \right] \quad (3.62)$$

em que ao contrário de (3.61), o termo $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ foi aproximado implicitamente no nível de tempo $i + 1$, enquanto os valores de $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ foi aproximado explicitamente no nível de tempo $i + 1/2$. Novamente é gerado um sistema tridiagonal. Os valores de $f^{i+1/2}$ na eq.(3.62), são obtidos com a solução das equações (3.61) para todos os pontos do domínio [6].

Capítulo 4

SISTEMAS PRESA-PREDADOR SEM DIFUSÃO

4.1 Modelo Presa-Predador

A relação de predação ocorre quando indivíduos de uma espécie precisam caçar indivíduos de outra espécie para obter energia. Essa relação tem um grande impacto no comportamento do número de indivíduos que compõe essas duas populações ao longo do tempo.

O biofísico Alfred James Lotka (1880-1949) e o matemático Vito Volterra (1860-1940) de forma independente propuseram um mesmo modelo, então denominado Lotka-Volterra, com o objetivo de analisar o comportamento ao longo do tempo de duas populações de espécies interagentes que coabitam a mesma região.

As equações de Lotka-Volterra retratam um sistema presa-predador de duas espécies em que, o número de indivíduos da população de predadores depende diretamente da quantidade de indivíduos da população de presas na região e vice-versa.

Devido à interação entre as espécies, o sistema pode apresentar basicamente três estados estacionários:

1. coexistência de presas e predadores;
2. presas são extintas e em consequência os predadores também;
3. somente os predadores são extintos.

A variação da densidade populacional é representada pelo esquema na fig. 4.1.

Um modelo que leva em conta apenas a interação entre duas espécies não é capaz de descrever completamente as relações existentes em um ecossistema. No entanto o entendimento de modelos simplifi-

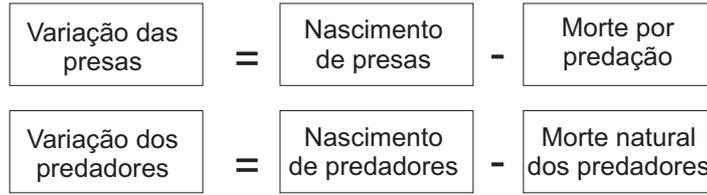


Figura 4.1: Esquema representativo da relação de predação envolvendo duas espécies.

cados é o passo inicial para a compreensão de modelos mais realísticos. Supondo-se que a alimentação da presa é abundante, e não há predadores naturais para as presas, o modelo de Lotka-Volterra apresenta um crescimento exponencial para a população de presas. De acordo com esse modelo, a variação do número de presas é proporcional ao tamanho da população e a um termo de interação envolvendo as duas populações. Este termo, que representa morte por predação, será negativo para a população de presas, pois há uma “retirada de energia” da população de presas, e é dependente da quantidade de predadores que há no sistema. Logo, se muitos predadores habitam a região, uma grande quantidade de energia será retirada da população de presas, ou seja, ocorrerão muitas predações. Este termo de interação também é dependente do número de presas disponíveis na região e de uma taxa de predação que está relacionada com a habilidade do predador caçar determinada presa.

Para a população de predadores, a equação diferencial possui um termo de interação positivo, pois existe um acréscimo de energia na população devido a predação. Este termo é acompanhado de uma constante que representa a porcentagem de energia coletada que é “transformada” em novos indivíduos. Logo, este primeiro termo representa a reprodução dos predadores. Nesta abordagem, os predadores não possuem outra forma de morte além da morte natural. O termo de morte da população é proporcional à uma constante δ e ao número de indivíduos. Neste caso, se a população de presas for nula, a população de predadores tende a decrescer exponencialmente, indo a extinção [15].

Se $N(t)$ é a população de presas e $P(t)$ a população de predadores em um instante t , então o modelo é dado pelo seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt} &= \alpha N - \beta NP \\ \frac{dP}{dt} &= \gamma \beta NP - \delta P \end{aligned} \tag{4.1}$$

em que α é a taxa intrínseca de crescimento da população de presas, β a probabilidade de sucesso de caça, γ é a taxa de transformação de energia em novos predadores e δ é a taxa de mortalidade dos predadores.

Este modelo é não-linear, logo, para este sistema, não é possível obter uma solução analítica geral. Entretanto, além dos métodos numéricos, é possível uma abordagem qualitativa sobre o comportamento

das soluções, que pode substituir a informação quantitativa. Uma maneira de se obter informações sobre o comportamento é realizando uma análise em torno dos pontos de equilíbrio do sistema [4].

4.2 Solução numérica do Modelo de Lotka-Volterra

O método de Euler do primeiro ponto (EPP) visto na seção 3.5.1, pode ser utilizado para discretizar o sistema (4.1). O sistema de equações de diferenças finitas correspondente é:

$$\begin{aligned} N_{t+1} &= N_t + N_t h(\alpha - \beta P_t) \\ P_{t+1} &= P_t + P_t h(\gamma \beta N_t - \delta P_t) \end{aligned} \quad (4.2)$$

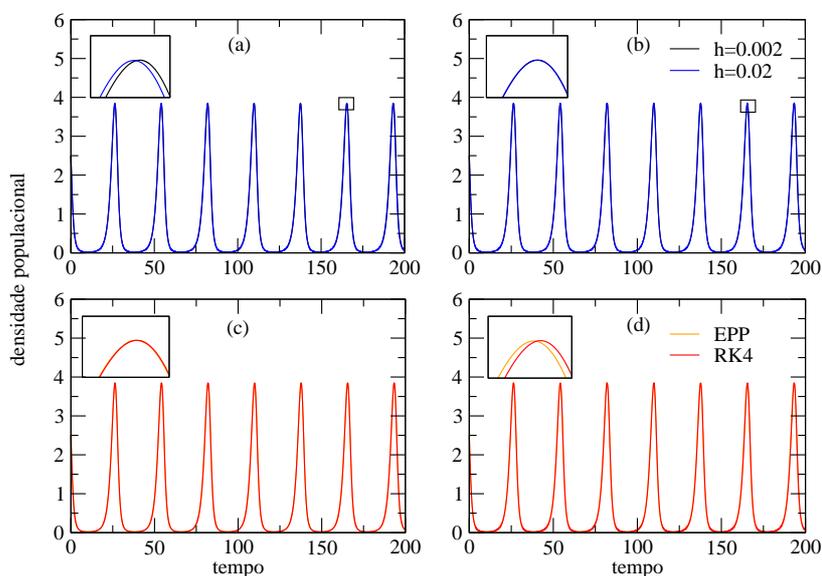


Figura 4.2: Resultados numéricos para a variação temporal da população de presas obtidos utilizando-se os métodos EPP e RK4 com $h = 0.02$ e $h = 0.002$ e os parâmetros dados na tabela 4.1. (a)EPP com $h = 0.002$ e $h = 0.02$. (b)RK4 com com $h = 0.002$ e $h = 0.02$. (c)EPP e RK4 com $h = 0.002$ (d)EPP e RK4 com $h = 0.02$.

Os resultados obtidos utilizando-se o método de Euler de primeiro ponto (EPP) e o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) são mostrados nas figuras 4.2a e 4.2b, respectivamente. Na fig. 4.2c são mostrados os resultados utilizando EPP X RK4 com $h = 0.002$ e na fig. 4.2d com $h = 0.02$.

Nos resultados mostrados na fig. 4.2, utilizou-se os seguintes valores para os parâmetros do modelo:

Parâmetros	Valores
α	0.8
β	0.55
γ	0.25
δ	0.1

Tabela 4.1: Parâmetros do caso base para o modelo Lotka-Volterra.

Esses valores dos parâmetros permitem que o sistema atinja o estado estacionário em que as duas populações coexistem. Como se pode observar ainda na fig. 4.2, a população de presas apresenta um comportamento oscilatório característico do modelo Lotka-Volterra [4]. O mesmo comportamento se observa para a população de predadores.

Comparando-se os resultados para diferentes tamanhos de passo h , ($h = 0.002$ e $h = 0.02$), observa-se que há uma diferença entre os resultados obtidos com o EPP, o que não ocorre com o método de RK4, cujo resultado quando $h = 0.02$, é praticamente o mesmo obtido com o passo $h = 0.002$. Note na fig. 4.2c que os resultados obtidos pelos métodos EPP e RK4 com o passo $h = 0.002$ são muito próximos, entretanto, quando $h = 0.02$, o resultado obtido com EPP difere do resultado obtido com RK4. Foi visto na seção 3.5.2 que quanto menor o passo h , mais fina será a malha e conseqüentemente maior será o custo computacional. O resultado obtido pelo método de Runge Kutta com passo $h = 0.02$ é praticamente o mesmo resultado obtido pelos métodos de EPP e RK4 com passo $h = 0.002$. Esta é uma grande vantagem, pois conseguem-se resultados satisfatórios com menor custo computacional.

Nos resultados mostrados na fig. 4.3, utilizou-se os valores para os parâmetros da tabela 4.1, fazendo-se $\beta = 0$.

Para esses valores dos parâmetros, em que $\beta = 0$, o sistema atinge um estado estacionário em que somente a população de presas sobrevive e esse sistema possui uma solução exata. A população de presas cresce exponencialmente. Como se pode observar na fig.4.3 o resultado usando EPP com $h = 0.02$ (curva preta) fica bem diferente do resultado exato, enquanto o resultado obtido com RK4 e com o mesmo valor de h (curva azul) é bem mais próximo do resultado exato. Isso significa que é possível obter-se resultados melhores com menor custo computacional se for utilizado o método RK4 para esse sistema.

Um dos resultados previstos para o modelo Lotka-Volterra são soluções periódicas para ambas populações. Esse resultado se traduz em trajetórias fechadas no espaço de fases do sistema ou órbitas, que oscilam em torno de pontos chamados de pontos críticos do sistema. Esses pontos críticos depen-

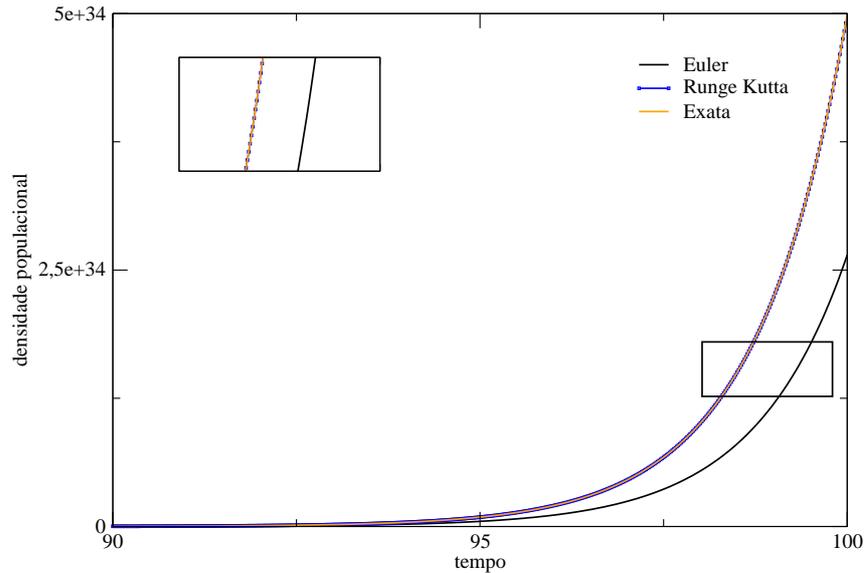


Figura 4.3: Resultado exato e resultados numéricos para a variação temporal da população de presas obtidos utilizando-se os métodos EPP e RK4 com $h=0.02$ e os parâmetros dados na tabela 4.1

dem dos valores das populações iniciais. Na fig. 4.4 é mostrado um diagrama de fase para o modelo Lotka-Volterra obtido com o conjunto de parâmetros da tabela 4.1, utilizando-se o método de RK4 com $h = 0.02$, com diferentes valores para as populações iniciais. Cada trajetória representa uma amplitude diferente para as séries temporais das duas populações.

Na fig. 4.5 é mostrado um resultado para o sistema utilizando-se o conjunto de parâmetros da tabela 4.1 e o método de RK4 com $h = 0.02$. Pode-se observar que a população de predadores é atrasada em relação à série da população de presas. No instante inicial, ambas populações são pequenas. Como há poucos predadores, a população de presas tende a aumentar. Em seguida, a população de predadores encontra comida (presa) abundante e também cresce. Com o aumento da predação, a população de presas diminui e conseqüentemente a população de predadores também diminui e o ciclo continua [4].

Como dito anteriormente, o modelo Lotka-Volterra prevê que as presas tenham um crescimento exponencial na ausência de predadores. Essa abordagem não é muito realista pois a população cresce indefinidamente quando $t \rightarrow \infty$. Como o sistema ecológico é fechado, existem limitações naturais para o crescimento das populações tais como água, alimento, espaço físico. Pierre Verhulst (1804-1849) supôs que uma população vivendo em um determinado meio, deveria crescer até um limite máximo, ou seja, ela deveria estar condicionada a esta limitação de recursos [2]. De acordo com o modelo proposto por Verhulst a taxa de morte natural considerada é proporcional ao quadrado do número de indivíduos em um dado instante. Na fig. 4.6 são mostradas essas duas modelagens: o crescimento exponencial previsto pelo modelo de Lotka-Volterra e o crescimento logístico proposto por Verhulst.

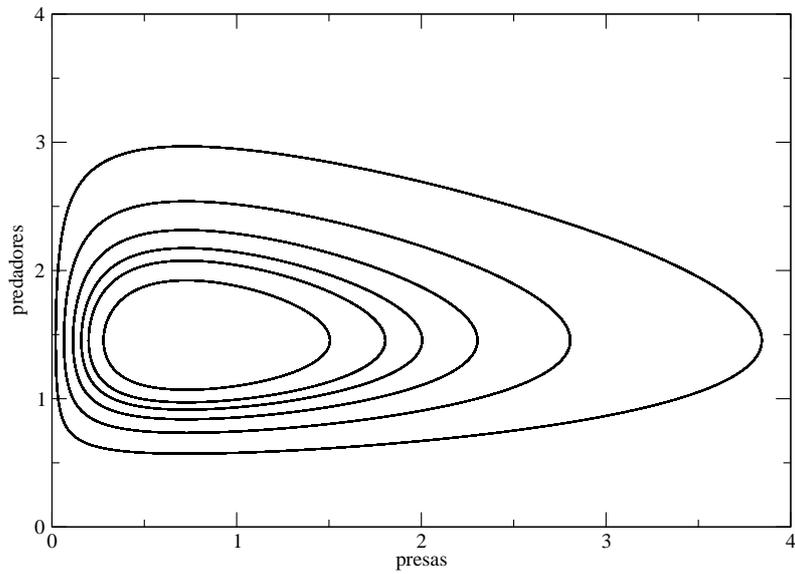


Figura 4.4: Diagrama de fase do Modelo Lotka-Volterra, composto por trajetórias fechadas, onde cada trajetória depende das populações iniciais no sistema.

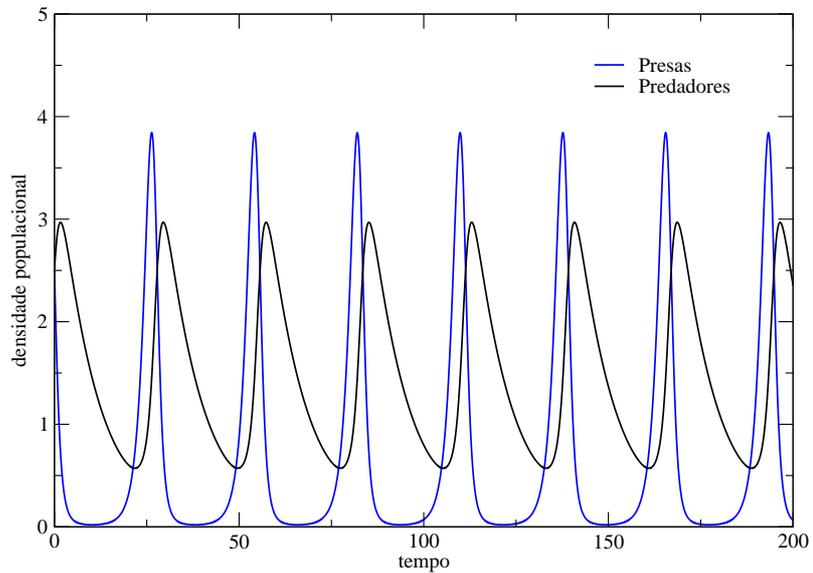


Figura 4.5: Séries temporais do Modelo Lotka-Volterra, com comportamento oscilatório e periódico obtidas através do método de Runge Kutta de quarta ordem.

O modelo populacional de Verhulst é dado pela equação logística (4.3). Uma população representada por este modelo, poderia crescer até um limite, alcançando a estabilidade e atingindo a chamada

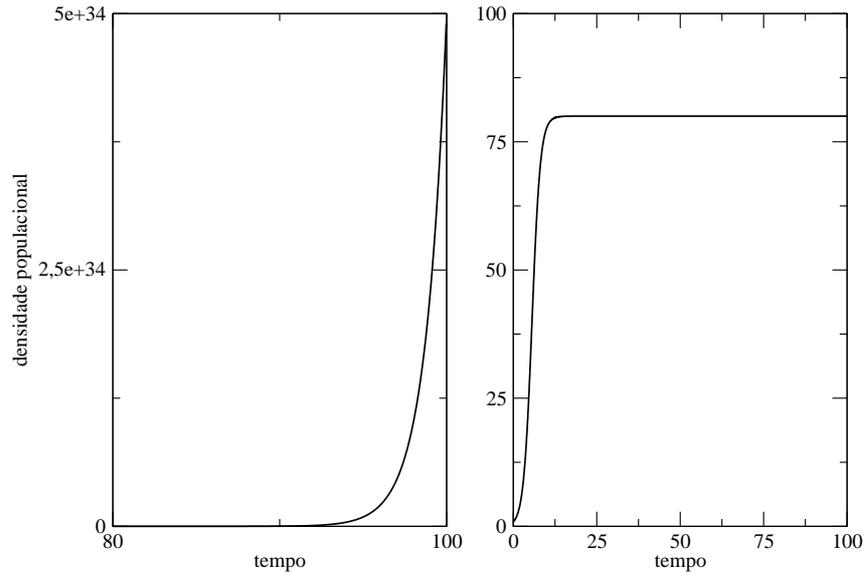


Figura 4.6: Evolução temporal da população de presas na ausência de predadores. O primeiro gráfico representa o Modelo Lotka-Volterra e o segundo o Modelo Lotka-Volterra logístico.

capacidade suporte do ambiente.

$$\frac{dN}{dt} = \alpha N - \mu N^2 \quad (4.3)$$

em que μ é a taxa de mortalidade.

A eq.(4.3) combinada com a eq.(4.1), torna o modelo Lotka-Volterra mais realístico.

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt} &= \alpha N - \mu N^2 - \beta NP \\ \frac{dP}{dt} &= \gamma \beta NP - \delta P \end{aligned} \quad (4.4)$$

Com o acréscimo do termo não-linear μN^2 ao modelo Lotka-Volterra os resultados anteriores são significativamente alterados. O ponto crítico no diagrama de fases tem seu valor alterado e deixam de aparecer as trajetórias fechadas, conforme visto na fig. 4.4. O ponto de equilíbrio agora passa a ser um ponto assintoticamente estável conforme pode ser visto na fig. 4.7.

Nos resultados mostrados na fig. 4.7, utilizou-se os seguintes valores para os parâmetros do modelo:

Parâmetros	Valores
α	0.8
μ	0.01
β	0.55
γ	0.25
δ	0.1

Tabela 4.2: Parâmetros do caso base para o modelo Lotka-Volterra com acréscimo do fator logístico μN^2 .

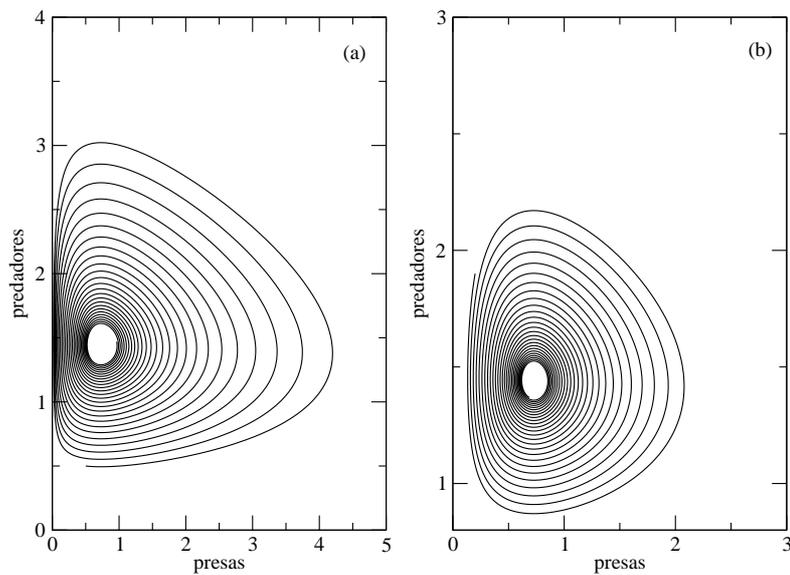


Figura 4.7: Diagrama de fases, para condições iniciais diferentes: a densidade populacional converge para região próxima ao ponto crítico. (a) As populações iniciais de presas (N_0) e de predadores (P_0) são iguais a 0.5 em (b) $N_0 = 0.2$ e $P_0 = 1.9$.

A evolução temporal das populações de presas e predadores na fig. 4.8 apresenta um comportamento oscilatório inicial. Entretanto, essas oscilações convergem para o ponto crítico quanto $t \rightarrow \infty$.

Quando a taxa de mortalidade de presas μ tende a zero, as trajetórias do modelo se aproximam das trajetórias do modelo de Lotka-Volterra sem a inclusão do fator de Verhulst.

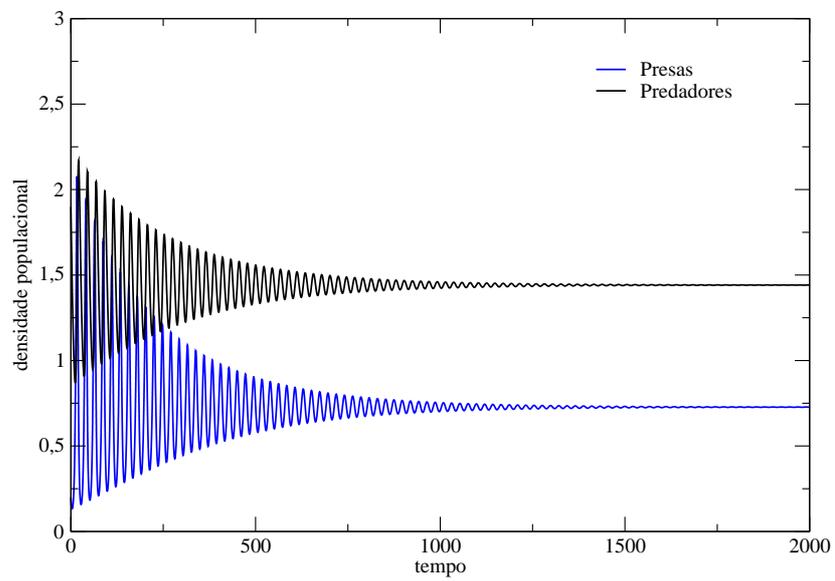


Figura 4.8: Séries temporais do modelo Lotka-Volterra com o acréscimo do fator logístico μN^2 , para o caso da fig. 4.7a.

Capítulo 5

SISTEMAS PRESA-PREDADOR COM DIFUSÃO

O sistema presa-predador estudado no capítulo 4, considera a interação entre as espécies em uma mesma região ou sítio no espaço, ou seja, é possível analisar somente o comportamento global do sistema. Este tipo de modelo, dito sem estrutura espacial, trata a população de toda uma região como uma única entidade homogênea, sendo desprezadas as variações locais das populações. No entanto, o que se observa na natureza é uma distribuição heterogênea das populações em seus habitats. Essa heterogeneidade é fortemente influenciada pelas condições espaciais locais, tais como distribuição de comida e água. Além disso, os indivíduos possuem a capacidade de se movimentar em busca de melhores condições de sobrevivência. No modelo sem difusão, estas características não são levadas em conta, sendo os resultados obtidos apenas o que se denomina de resultados de campo médio, ou seja, informações médias sobre as variações temporais nas densidades populacionais. Com o intuito de tornar o modelo Lotka-Volterra mais realístico, uma das possibilidades é a inclusão de um termo de difusão para os indivíduos das populações nas equações diferenciais que descrevem o sistema. Esse termo de difusão pode ser interpretado como o deslocamento dos indivíduos localmente ou como um fator migratório das populações.

Seja R_x o habitat das populações de presas e predadores. Uma maneira de conhecer o comportamento das populações nesta região R_x é dividindo o ambiente em diversos sítios e adotando modelos locais para cada sítio. Quanto maior o número de sítios utilizados, maior é a precisão do modelo. Se o número de sítios tende ao infinito, então a precisão máxima é alcançada, e o tamanho de cada sítio deve ser um infinitesimal de espaço e, por conseqüência, o modelo resultante seria de natureza contínua em relação ao espaço.

O movimento das espécies ocorre basicamente de modo aleatório em torno de um ou mais fo-

cos de origem e depende dos mecanismos de dispersão próprios da espécie. Trabalhos experimentais mostram que em geral as espécies possuem bons mecanismos de dispersão, permitindo que áreas isoladas e completamente não habitadas sejam alcançadas e povoadas em pequenos intervalos de tempo [21]. Entretanto, a dispersão não ocorre apenas de forma aleatória. Por exemplo, diferenças de umidade, temperatura, quantidade de alimentos presente, entre outros fatores, podem tornar determinados sítios mais atrativos do que seus vizinhos. Quando a região é considerada homogênea, a questão é simplificada e a dispersão é um fenômeno aleatório de difusão de indivíduos.

5.1 Difusão unidimensional

A fim de simplificar o tratamento matemático do modelo presa-predador com difusão, será tratado o caso da difusão unidimensional, isto é, o espaço será considerado uma linha. Com isso a região R_x compreenderá o eixo x . Isso significa que as populações poderão se deslocar somente ao longo dessa linha, conforme representado na fig. 5.1.

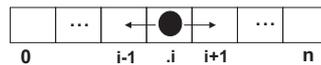


Figura 5.1: Representação da região R_x para o caso da difusão unidimensional.

5.1.1 Modelo contínuo

Considere o sistema 4.4 visto na seção 4.2

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= \alpha N - \mu N^2 - \beta NP \\ \frac{dP}{dt} &= \gamma \beta NP - \delta P\end{aligned}$$

Note que o modelo acima não considera o fenômeno migratório. Para acrescentar a possibilidade de movimento aleatório em torno da vizinhança, deve-se considerar que as densidades populacionais obedecem a equação de difusão (2.75). A rapidez com que a difusão ocorre está relacionada à constante de difusão k , que pode ser diferente entre as espécies.

Sendo assim, o modelo que representa a dinâmica entre presas e predadores em um sítio x no tempo t com movimento (difusão) de indivíduos entre os sítios é representado por um sistema contínuo não-linear de equações diferenciais parciais acopladas.

$$\begin{aligned}\frac{\partial N}{\partial t} &= k_1 \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \alpha N - \mu N^2 - \beta NP \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= k_2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \gamma \beta NP - \delta P\end{aligned}\tag{5.1}$$

em que k_1 é a constante de difusão das presas, α é a taxa intrínseca de crescimento, μ é a taxa de mortalidade das presas, β a probabilidade de sucesso de caça, k_2 é a constante de difusão dos predadores, γ a taxa de transformação de energia em novos predadores, δ é a taxa de mortalidade dos predadores.

As equações que compõem o sistema (5.1) são funções dependentes de x e t e, portanto, envolvem derivadas parciais, tornando a resolução do sistema e a sua análise, processos mais difíceis. Como o problema envolve agora informações sobre a posição dos indivíduos, além da especificação das condições iniciais, o problema também necessita das condições de contorno para poder ser solucionado.

5.2 Discretizações unidimensionais

Os métodos utilizados na solução de problemas descritos por equações diferenciais ordinárias não são aplicados em equações diferenciais parciais. Com o objetivo de ilustrar as características dos processos de solução numérica, serão aplicados ao sistema de equações diferenciais parciais 5.1 os métodos de Euler explícito e de Crank-Nicholson.

5.2.1 Euler explícito

Na seção 3.6.2 foi apresentada a técnica de discretização temporal explícita, em que a variável no instante $i+1$ depende apenas da variável no instante anterior i . Sendo assim, a discretização explícita das equações do sistema 5.1 é dada pelo sistema

$$\begin{aligned}\frac{N_j^{i+1} - N_j^i}{h_t} &= k_1 \frac{N_{j-1}^i - 2N_j^i + N_{j+1}^i}{(h_x)^2} + \alpha N_j^i - \mu(N_j^i)^2 - \beta N_j^i P_j^i \\ \frac{P_j^{i+1} - P_j^i}{h_t} &= k_2 \frac{P_{j-1}^i - 2P_j^i + P_{j+1}^i}{(h_x)^2} + \gamma \beta N_j^i P_j^i - \delta P_j^i\end{aligned}\quad (5.2)$$

em que h_t é o tamanho do intervalo de tempo e h_x o tamanho do intervalo espacial. O sistema (5.2) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}N_j^{i+1} &= [(1 - 2s) + (\alpha - \mu N_j^i - \beta P_j^i)h_t]N_j^i + (N_{j-1}^i + N_{j+1}^i)s \\ P_j^{i+1} &= [(1 - 2u) + (\gamma \beta N_j^i - \delta)h_t]P_j^i + (P_{j-1}^i + P_{j+1}^i)u\end{aligned}\quad (5.3)$$

em que $s = k_1 \frac{h_t}{(h_x)^2}$, $u = k_2 \frac{h_t}{(h_x)^2}$, $i = \frac{t_i - t_0}{h_t}$ e $j = \frac{x_j - x_0}{h_x}$.

5.2.2 Crank-Nicholson

Na seção 3.6.3, foi apresentado o método de Crank-Nicholson, que nada mais é do que a média aritmética dos métodos explícito e implícito vistos na seção 3.6.2. As equações discretizadas pelo método de Crank-Nicholson que representam o sistema (5.1) são dadas por

$$\begin{aligned}\frac{N_j^{i+1} - N_j^i}{h_t} &= \frac{1}{2}k_1 \left(\frac{N_{j-1}^i - 2N_j^i + N_{j+1}^i}{(h_x)^2} + \frac{N_{j-1}^{i+1} - 2N_j^{i+1} + N_{j+1}^{i+1}}{(h_x)^2} \right) + \alpha N_j^i - \mu(N_j^i)^2 - \beta N_j^i P_j^i \\ \frac{P_j^{i+1} - P_j^i}{h_t} &= \frac{1}{2}k_2 \left(\frac{P_{j-1}^i - 2P_j^i + P_{j+1}^i}{(h_x)^2} + \frac{P_{j-1}^{i+1} - 2P_j^{i+1} + P_{j+1}^{i+1}}{(h_x)^2} \right) + \gamma \beta N_j^i P_j^i - \delta P_j^i\end{aligned}\quad (5.4)$$

O sistema (5.4) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}-s_1 N_{j-1}^{i+1} + (1 + 2s_1)N_j^{i+1} - s_1 N_{j+1}^{i+1} &= s_1 N_{j-1}^i + (1 - 2s_1)N_j^i + s_1 N_{j+1}^i + h_t(\alpha - \mu N_j^i - \beta P_j^i)N_j^i \\ -u_1 P_{j-1}^{i+1} + (1 + 2u_1)P_j^{i+1} - u_1 P_{j+1}^{i+1} &= u_1 P_{j-1}^i + (1 - 2u_1)P_j^i + u_1 P_{j+1}^i + h_t(\gamma \beta N_j^i - \delta)P_j^i\end{aligned}\quad (5.5)$$

em que $s_1 = \frac{k_1}{2} \frac{h_t}{(h_x)^2}$ e $u_1 = \frac{k_2}{2} \frac{h_t}{(h_x)^2}$. Lembre-se que a discretização explícita é $O[(h_t), (h_x)^2]$, enquanto o método de Crank-Nicholson é $O[(h_t)^2, (h_x)^2]$.

5.3 Resultados

5.3.1 Euler explícito X Crank-Nicholson

Utilizando-se o conjunto de parâmetros dados na tabela 5.1, e variando o tamanho do passo temporal mantendo o tamanho do passo espacial fixo e igual a $h_x = 0.5$, foi possível obter-se os resultados mostrados na fig. 5.2.

Parâmetros	Valores
$k_1 = k_2$	0.6
α	0.03
μ	0.01
β	0.5
γ	0.8
δ	0.03
h_t	0.2
h_x	0.5

Tabela 5.1: Parâmetros do caso base.

Inicialmente, foi calculado para diferentes passos no tempo (h_t), a evolução temporal da população de presas utilizando a condição de contorno periódica.

Na parte (a) da fig.5.2, correspondente ao método de Euler explícito com dois tamanhos de passos temporais diferentes, observa-se que a diferença percentual entre os dois resultados chega a ser de 20%; já na parte (b), correspondente ao método de Crank-Nicholson, esta diferença percentual chega a um máximo de 4%.

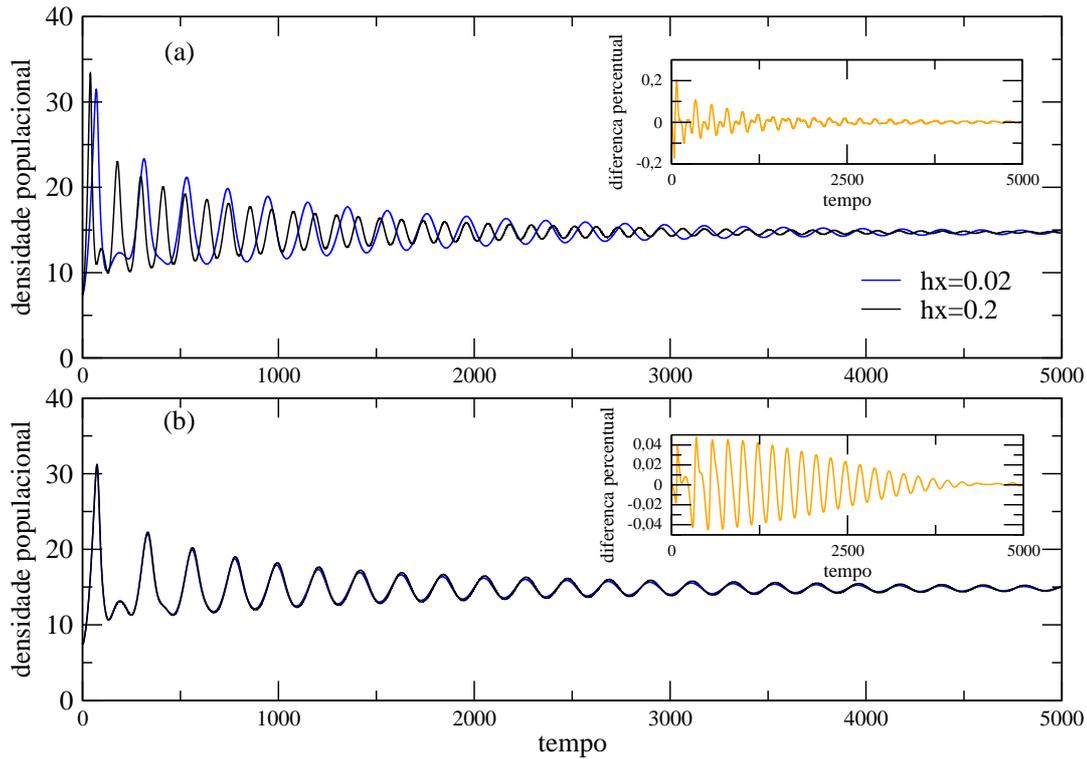


Figura 5.2: Evolução temporal da população de presas para diferentes passos no tempo h_t e diferença percentual entre os resultados para os diferentes passos no tempo. (a) Método de Euler Explícito (b) Método de Crank-Nicholson. Os valores dos parâmetros são da tabela 5.1, extensão da região igual a 100, $tempo = 5000$ e $h_t = 0.02$ e $h_t = 0.2$.

Apesar de o esquema explícito (5.3) ser de implementação direta, sua restrição de estabilidade, muitas vezes, faz com que o valor de h_t tenha que ser muito pequeno. O método, então, exige muitas iterações e, conseqüentemente, um longo tempo de computação.

Com o passo no tempo discreto igual a $h_t = 0.02$ foram necessárias 250.000 iterações para varrer todo intervalo de $[0, 5000]$. Com o aumento do passo para 0.2, é preciso 10 vezes menos iterações, ou seja, 25.000 iterações. Se conseguirmos um resultado satisfatório com um menor custo computacional podemos dedicar os recursos computacionais para realizar outras tarefas, como por exemplo aumentar a região a ser analisada.

Foi visto na seção 3.6.2 que quanto maior o valor de $s = \frac{h_t}{(h_x)^2}$, menor é a precisão dos resultados. Isso é esperado, uma vez que o ELT é proporcional a h_t (Euler) e a $(h_t)^2$ (Crank-Nicholson). Devido ao menor ELT na discretização temporal, normalmente o método de Crank-Nicholson fornece melhores resultados do que os métodos de Euler explícito e implícito, para os mesmos valores de h_t . É exatamente por essa razão que métodos $O(h_t)^2$ são indicados na análise de fenômenos transientes. Por esse motivo os resultados apresentados a seguir foram obtidos utilizando-se o método de Crank-Nicholson, que é de

ordem $O[(h_t)^2]$.

5.3.2 Condições auxiliares

Para resolver numericamente um problema modelado por uma EDP, é importante que ele esteja *bem posto*, isto é, que a solução exista, seja única e dependa continuamente das condições auxiliares (condições de fronteira e condições iniciais) [6].

Condições de fronteira ou condições iniciais especificadas incorretamente, por “falta” ou “excesso”, frequentemente fazem com que a solução não seja única ou mesmo fisicamente plausível. Pequenas variações nas condições auxiliares devem produzir mudanças compatíveis na solução numérica. O contrário sugere que alguma condição auxiliar está incorretamente especificada. Portanto, é necessário muito cuidado na especificação das condições auxiliares do problema estudado. Na fig. 5.3 são mostrados dois resultados em que utilizou-se duas condições iniciais distintas.

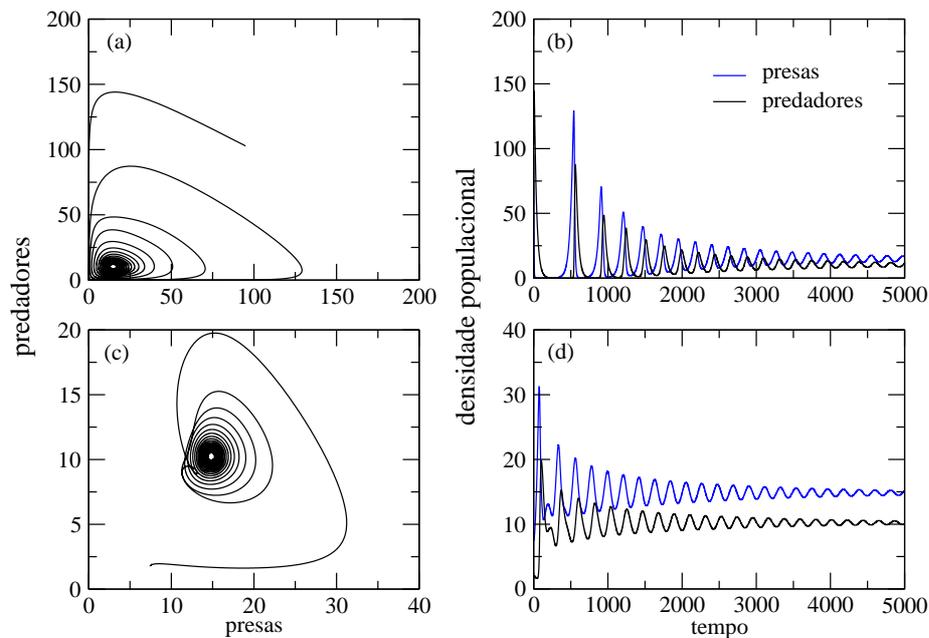


Figura 5.3: Diagrama de fases e evolução temporal das populações de presas e predadores para diferentes condições iniciais.

Na parte (a)(b) todos os sítios da rede foram inicializados com o mesmo número de presas e predadores, isto é, foram consideradas populações iniciais iguais em todos os sítios da rede. Na parte (c)(d) as populações iniciais eram diferentes de zero apenas nos sítios centrais da malha. O estado estacionário alcançado pelo sistema não apresenta nenhuma diferença significativa, o que se pode ver mais claramente nos dois diagramas de fase. Isso indica que o sistema, para essa região de parâmetros utilizada, não é sensível as condições iniciais.

Neste trabalho foram utilizados dois tipos básicos de condições de contorno: as condições do tipo Dirichlet e as condições do tipo periódicas. Na fig. 5.4 são mostradas representações esquemáticas para essas duas condições. Na parte (a) é mostrada a condição do tipo Dirichlet, na qual o número de indivíduos nos sítios da fronteira ($j = 0$ e $j = n$) são mantidos fixos. Na parte (b) é mostrada a condição tipo periódica, em que se pode pensar na malha como um anel, isto é, quando o indivíduo atinge o sítio $j = 0$ ele poderá migrar para o sítio $j = 1$ ou para o sítio $j = n$, o mesmo acontece caso o indivíduo atinge o sítio $j = n$, caso ele migre para seu vizinho a direita ele irá para o sítio $j = 0$, caso contrário, ele irá para o sítio $j = n - 1$.

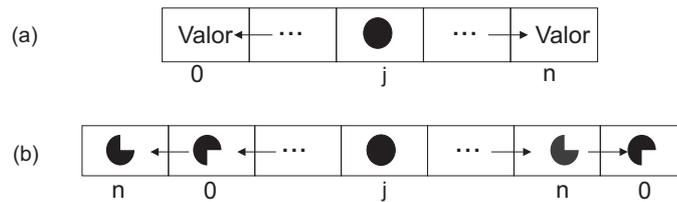


Figura 5.4: Condições de contorno. (a)Dirichlet (b)Periódica.

Na fig.5.5 são mostrados dois resultados obtidos usando-se as duas condições de contorno, Dirichlet e periódicas, e os parâmetros dados na tabela 5.1. Os indivíduos foram distribuídos nos sítios centrais da malha. Na parte (a) e (b) estão os resultados para a condição do tipo Dirichlet e na parte (c) e (d) os resultados para a condição do tipo periódica. Pode-se observar que ocorre uma pequena mudança no ponto de equilíbrio do sistema, mas o comportamento no estado estacionário é o mesmo. Novamente o que se pode concluir é que para essa região dos parâmetros o sistema é pouco sensível as condições de contorno utilizadas.

Sendo o sistema, para essa região de parâmetros, pouco sensível as condições iniciais e de fronteira, pode-se escolher, sem perda de generalidade para os resultados, trabalhar com as condições de fronteira do tipo periódica e condições iniciais em que os indivíduos são distribuídos nos sítios centrais da malha.

5.3.3 Análise da influência dos parâmetros no comportamento do sistema

Tendo como base os parâmetros dados na tabela 5.1, foi feito um estudo com o objetivo de se entender a influência de cada parâmetro sobre o comportamento final do sistema. Para isso, o parâmetro escolhido era variado enquanto todos os demais eram mantidos fixos e os resultados obtidos eram comparados entre si.

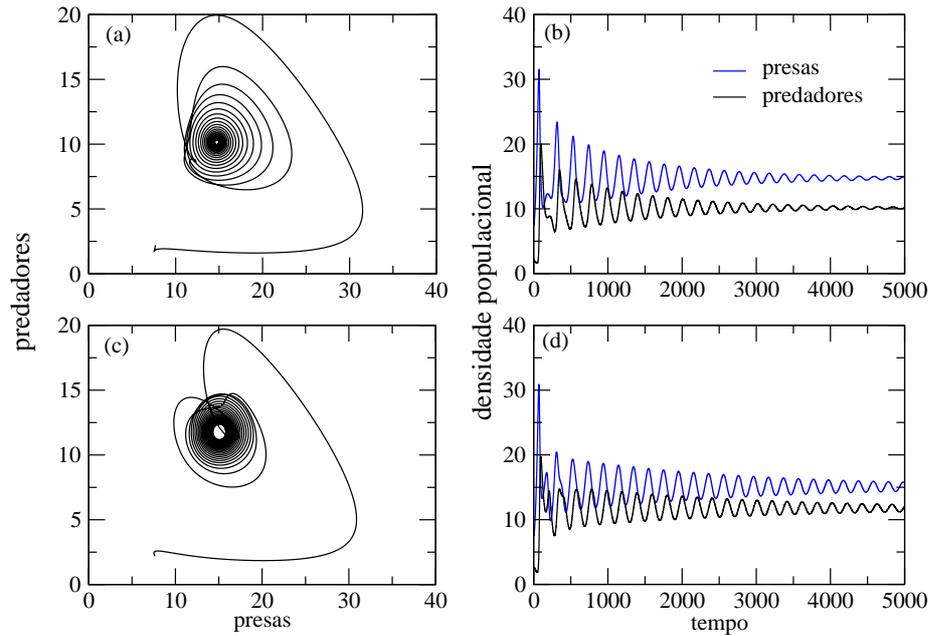


Figura 5.5: Diagrama de fases para e séries temporais com diferentes condições de contorno, utilizando o conjunto de parâmetros da tabela 5.1 (a) e (b) Dirichlet; (c) e (d) Periódica

Taxa de mortalidade de predadores

A taxa de morte dos predadores, δ é um parâmetro muito importante para o sistema, pois regula o tempo médio de vida de um predador.

A fig. 5.6 mostra os diagramas de fase para o sistema variando a taxa de mortalidade dos predadores. Pode ser observado que, com o aumento da taxa de morte dos predadores, a população de presas tem uma tendência natural de crescimento, pois com um número menor de predadores, há maior chance de vida para elas. Entretanto, apesar da variação da taxa de morte δ , a população de predadores não tem uma mudança significativa em seu comportamento, apenas em seu valor. Morrem mais predadores, porém, a relação presa/predador aumenta, isso faz com que haja mais alimento para cada predador, mantendo sua população estável.

Taxa de nascimento de presas

A variação na taxa de natalidade das presas, afeta diretamente a população de predadores. Com o nascimento de poucas presas, os predadores terão pouco alimento, conseqüentemente pouca energia será convertida em novos indivíduos predadores. Este comportamento pode ser observado na fig. 5.8.

Observe nas Figuras 5.8b, 5.8d e 5.8f, que aumentando a taxa de nascimento de presas, a população de predadores aumentou, pois com o nascimento de mais presas, os predadores tiveram mais alimento, o que favoreceu o crescimento da população de predadores.

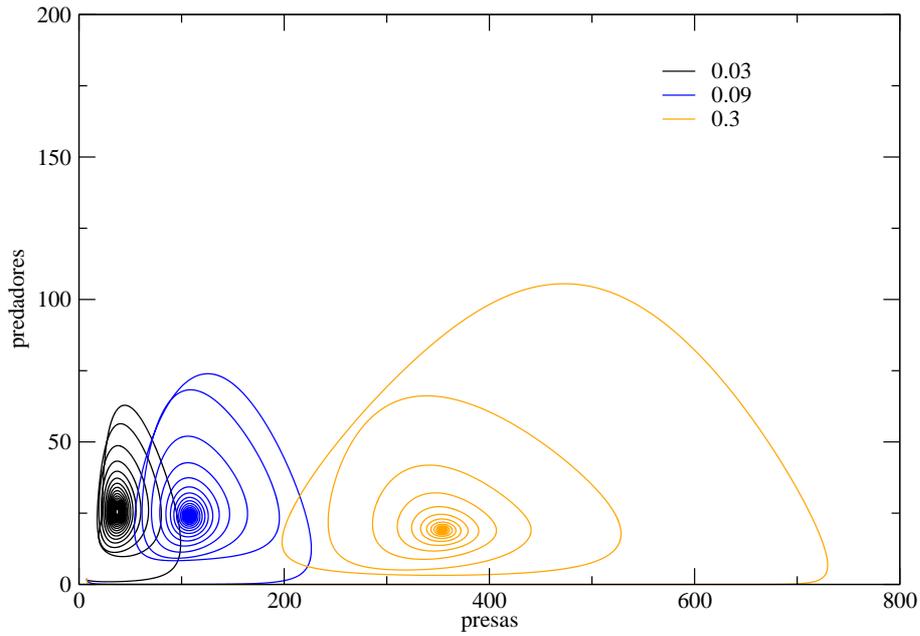


Figura 5.6: Diagrama de fases para diferentes valores da taxa de morte δ dos predadores, mantendo-se todos os demais parâmetros fixos.

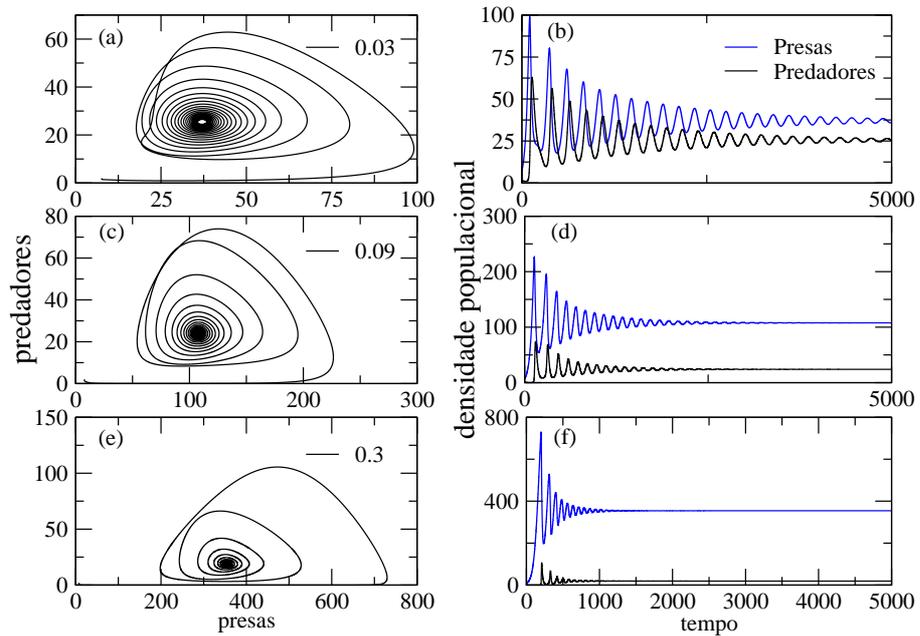


Figura 5.7: Diagrama de fases e evolução temporal das populações de presas e predadores para diferentes valores da taxa de morte δ dos predadores, mantendo-se todos os demais parâmetros fixos.

Taxa de predação

A variação da taxa de predação β , é o parâmetro que mais afetou o comportamento do sistema, Note na fig. 5.9 que tanto a população de presas quanto a população de predadores foram influenciadas pela

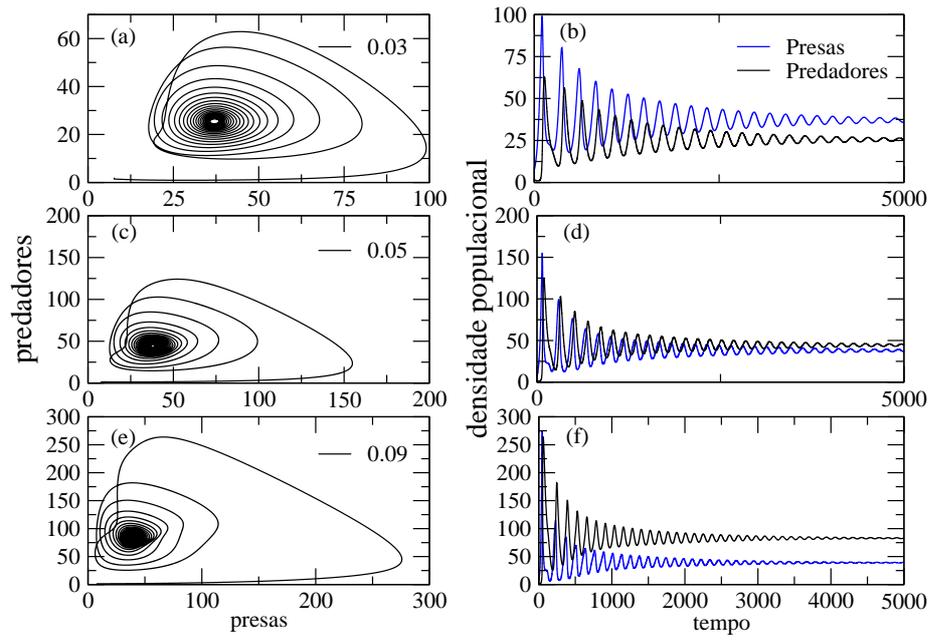


Figura 5.8: Diagrama de fases e evolução temporal das populações de presas e predadores para diferentes valores da taxa de nascimento α das presas.

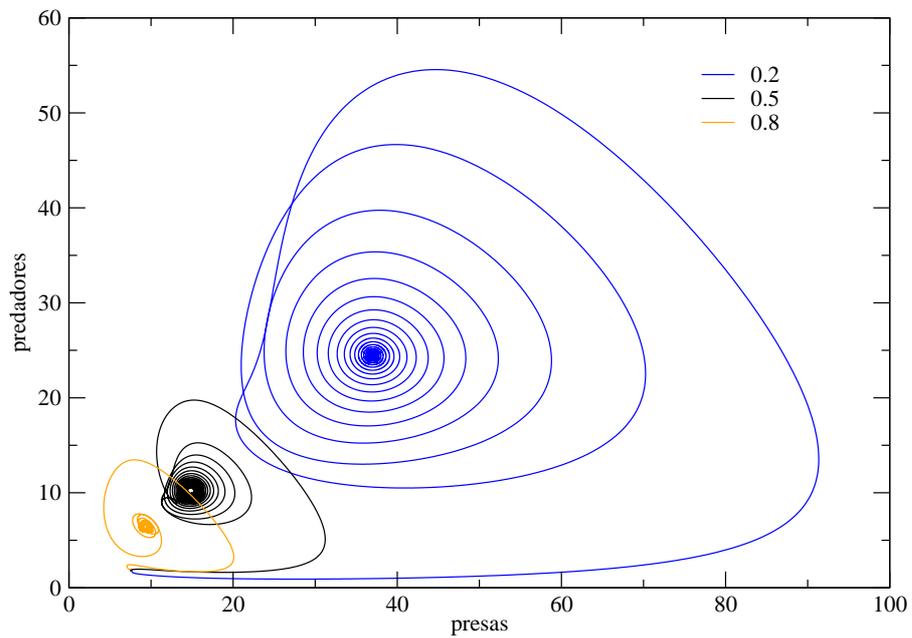


Figura 5.9: Diagrama de fases para diferentes valores da taxa de predação β .

variação da taxa de predação β .

5.4 Notas de implementação

Os programas numéricos foram implementados na linguagem de programação C++ e executados no sistema operacional Linux, utilizando a distribuição Ubuntu [18]. O programa utilizado durante a análise de dados foi o Grace [19], um programa científico livre (licença geral pública GNU) excelente para gerar gráficos, aplicar transformações e fazer análise exploratória de dados, entre outras funcionalidades.

Capítulo 6

CONCLUSÕES

No início deste trabalho, foi apresentado um breve estudo da teoria de equações diferenciais, que são ferramentas úteis na modelagem de fenômenos naturais. Sistemas dinâmicos, podem ser analisados quanto aos pontos críticos, trajetórias e estabilidade utilizando-se essa ferramenta. É possível ainda classificar o modelo matemático e, dessa forma, detectar as possíveis dificuldades de resolvê-los. Foi visto também que equações diferenciais não-lineares, principalmente equações diferenciais parciais, são difíceis de serem solucionadas e, na maioria das vezes, não há métodos analíticos de solução. Uma alternativa de estudo desse tipo equações que, não possuem solução analítica, é aplicar técnicas de análise numérica.

Para solucionar numericamente um problema modelado por uma equação diferencial ordinária, ou por um sistema de equações diferenciais ordinárias, em geral, utilizam-se os métodos numéricos de Euler e de Runge-Kutta. O método de Euler é um método que acumula linearmente os erros a cada iteração. Um dos processos numéricos mais precisos para obter soluções aproximadas de equações diferenciais ordinárias é o método de Runge-Kutta de quarta ordem, que possui um erro local de truncamento de alta ordem. Como foi visto, essa propriedade tem um impacto direto no custo computacional do problema, pois os valores de Δt estão diretamente relacionados ao número de iterações necessárias para a convergência da solução.

No caso de equações diferenciais parciais, dois tipos básicos de fenômenos são modelados por elas. Os fenômenos transientes são descritos por equações que descrevem a variação de uma grandeza física no tempo e no espaço (equações parabólicas e hiperbólicas); já os fenômenos estacionários, por possuírem uma grandeza que não se altera com o tempo, são descritos por equações que relacionam somente a distribuição espacial da grandeza (equações elípticas). Estes dois tipos de fenômenos dão origem a problemas matemáticos distintos e devem ser resolvidos analiticamente e numericamente por técnicas apropriadas. No caso das equações parabólicas, a técnica de discretização explícita e o método semi-implícito Crank-Nicholson são os mais adequados.

Quando resolvemos numericamente uma equação diferencial, principalmente equações diferenciais parciais, o custo computacional para se obter a solução numérica não deve ser desprezado. Em relação aos métodos implícitos e semi-implícitos, os métodos explícitos tem baixo custo de implementação, uma vez que são métodos de implementação direta. Entretanto, possui custo computacional mais alto do que métodos implícitos e semi-implícitos, dependendo do valor do passo no tempo. Os métodos explícitos exigem tempos de computação mais longos do que métodos semi-implícitos e até mesmo implícitos com o passos no tempo maiores.

Os métodos numéricos EPP e RK4 foram aplicados ao sistema dinâmico Presa-Predador. O resultado obtido pelo método de RK4 com o passo $h = 0.02$ foi equivalente ao resultado obtido pelo método de Euler com o passo $h = 0.002$, ou seja, 10 vezes menor que $h = 0.02$. A medida que o passo h foi aumentado no método de Euler, a solução se afastava cada vez mais do resultado esperado. O método de RK4 mostrou-se mais adequado, pois com o menor custo computacional foi obtido resultados próximos a solução do sistema.

As equações diferenciais parciais foram resolvidas pelos métodos de Euler explícito e Crank-Nicholson. Foi visto que a discretização explícita é de implementação direta, mas sua restrição de estabilidade, $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$, faz com que o passo no tempo seja muito pequeno, exigindo muitas iterações e, conseqüentemente, um longo tempo de computação. Para um intervalo no tempo de $[0, 5000]$ e passo no tempo discreto igual a $h_t = 0.02$ foram necessárias 250.000 iterações para varrer todo intervalo no tempo, além das iterações necessárias para varrer toda a malha espacial. Com o aumento do passo para 0.2, foi gasto 10 vezes menos iterações no tempo. À medida que foi aumentado h_t no método de Euler explícito, foi preciso diminuir o passo h_x para satisfazer o critério de estabilidade, e mesmo assim a solução estava se afastando do resultado obtido com o passo menor. Apesar de ser resolvido um sistema tridiagonal a cada iteração o método de Crank-Nicholson se mostrou bem mais eficiente para solução numérica de equações diferenciais parciais do que o método de Euler explícito.

Referências Bibliográficas

- [1] MONTEIRO, L.H.A.; *Sistemas Dinâmicos*. 1.ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2002. 527p.
- [2] MURRAY, R.S.; *Applied Differential Equations*, 3.ed. New Jersey: Prentice-Hall, 1981. 654p.
- [3] MACHADO, K. D.; *Equações Diferenciais Aplicadas à Física*. 2.ed. Ponta Grossa: Editora UEPG, 1999. 600p.
- [4] BOYCE, W.E.; DIPRIMA, R.C.; *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, LTC editora, 7^a edição, 2002.
- [5] ZILL, D.G.; CULLEN, M.R.; *Equações Diferenciais - Volume 2*. 3.ed. São Paulo: Makron Books, 2001. 434p.
- [6] FORTUNA, A. de O.; *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [7] ANTON, H.; *Cálculo - um novo horizonte Volume 1*. 6.ed. Porto Alegre: Bookman, 2000.
- [8] CLÁUDIO, D.M.; MARINS, J.M.; *Cálculo Numérico Computacional: teoria e prática*. São Paulo: Atlas, 1989. 464p.
- [9] BURDEN, R.L.; FAIRES, J.D.; *Análise Numérica*. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003. 736p.
- [10] TREFETHEN, L.N.; *The definition of Numerical Analysis*. SIAM News, November, 1992.
- [11] CORMEN, T.H.; LEISERSON, C.E.; RIVEST, R.L.; STEIN, C. *Algoritmos-Teoria e Prática*. 2.ed. Editora Campus.
- [12] CAMPOS FILHO, F.F.; *Algoritmos Numéricos*. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos, 2001. 383p.

- [13] CUMINATO, J.A.; *Discretização de Equações Diferenciais Parciais: Técnicas de Diferenças Finitas*. Disponível em <<http://www.lcad.icmc.usp.br/jacumina/livro.ps>>. Acesso em 05 abr. 2007.
- [14] FERNANDES, E.M. da G.P.; *Computação Numérica*. 2.ed. Braga: Serviços de Reprografia e Publicações da Universidade do Minho. 1997.
- [15] CARNEIRO, M. V.; *Simulação Computacional de Sistemas Dinâmicos*, Monografia de conclusão de curso, Universidade Federal de Lavras, Departamento de Ciência da Computação, Lavras - Minas Gerais, 2006. 86p.
- [16] BARROSO, L.C.; BARROSO, M.M. de A.; CAMPOS FILHO, F.F.; CARVALHO, M.L.B. de; MAIA, M.L.; *Cálculo Numérico com aplicações*, 2.ed. São Paulo: Editora HARBRA Ltda. 1987. 367p.
- [17] CUNHA, C.; *Métodos Numéricos para as Engenharias e Ciências Aplicadas*, Editora da UNICAMP, 1993.
- [18] Ubuntu, Sistema Operacional Livre disponível em <<http://www.ubuntu.com>>. Acesso em 08 ago. 2007.
- [19] Software livre Grace, versão 5.1.20. Grace Development Team. Software disponível em <<http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>>. Acesso em 05 abr. 2007.
- [20] PEACEMAN, D.W.; RACHFORD JR, H.H.; *The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations*. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, Vol. 3, No. 1 (Mar., 1955), pp. 28-41.
- [21] KREBS, C.J.; *Ecology: The experimental analysis of distribution and abundance*, Harper e Row, Publishers, 1972.
- [22] DEITEL, H.M., DEITEL, P.J.; *C++ Como Programar*, 3.ed., Editora Bookman, 2001.