Aula 08 - Estabilidade de Métodos Numéricos para EDO's e Equações Rígidas

Éliton Fontana

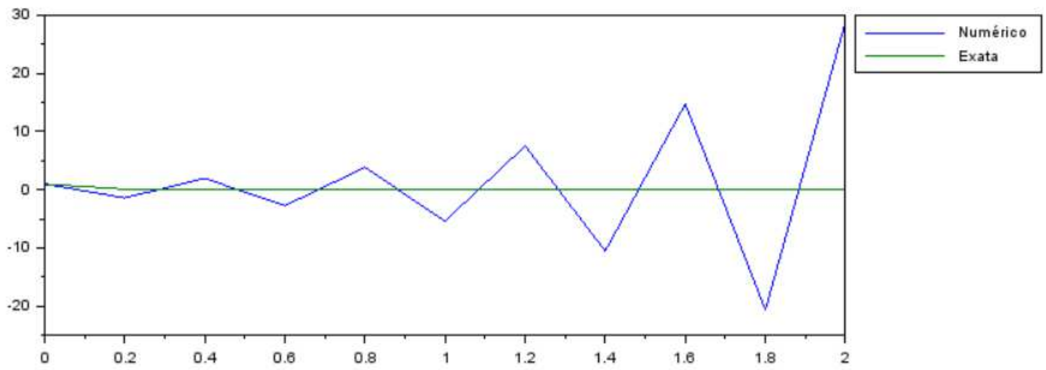
1 Estabilidade dos Métodos de Resolução de EDO's

Na passagem do método de Euler explícito para métodos mais complexos, o principal objetivo foi obter métodos com melhor precisão (reduzir os erros de truncamento). No entanto, em muitos casos os resultados obtidos não só possuem uma baixa precisão como também são catastroficamente distintos da solução exata.

Por exemplo, considere o seguinte PVI:

$$\frac{dy}{dt} = -12y \qquad\qquad y(0) = 1$$

A utilização do método de Euler explícito com $\Delta t = 0.2$ gera o resultado ilustrado a seguir.



Neste caso, o erro aumenta rapidamente conforme se avança na solução. Este problema está associado com a falta de ***estabilidade*** do método empregado.

Antes de avaliar a estabilidade dos métodos, é necessário definir dois conceitos relacionados a análise de estabilidade:

Consistência: Um método de passo único (como os da família de Runge-Kutta) é dito consistência se o erro de truncamento local e_i tende a zero conforme $\Delta t \to 0$ para todos os passos de tempo, ou seja:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \max_{1 \leq i \leq N} |e_i| = 0$$

onde N representa o número total de iterações.

Convergência: Um método de passo único é dito convergente com respeito ao problema de valor inicial

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \qquad\qquad y(t_0) = y_0$$

se a diferença entre a solução obtida através do método numérico y_i e a solução exata no mesmo ponto ϕ_i tender a zero conforme $\Delta t \to 0$:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \max_{1 \leq i \leq N} |y_i - \phi_i| = 0$$

Dessa forma, um método consistente possui a propriedade de que as equações obtidas para cada passo se aproximada da própria equação diferencial conforme o passo de tempo tende a zero, de modo que o erro de truncamento local também tende a zero.

Porém, além do erro de truncamento, deve-se considerar a influência do erro de arredondamento, associado ao fato de que os valores numéricos não são representados de forma exata. Na prática, os parâmetros do sistema, as condições inicias e todo o processo aritmético subsequente possuem erros associados com a precisão numérica finita dos valores empregados.

Para garantir que um determinado método seja *convergente*, deve-se então garantir que além de ser *consistente*, o erro de arredondamento deve ficar limitado a um valor aceitável. O controle do erro de arredondamento está associado com a *estabilidade* do método. Este conceito é muito similar ao conceito de condicionamento de um sistema linear, no sentido de que um método é dito estável quando pequenas variações nos parâmetros ou condições iniciais levam a igualmente pequenas variações na solução obtida. A seguir será apresentada uma análise da estabilidade para os métodos de passo único. Para os métodos de passos-múltiplos, como existem diversas etapas de aproximação envolvidas em cada passo, a análise é mais complexa.

2 Análise de Estabilidade de Métodos de Passo Único

Para avaliar a estabilidade de um dado método, considere o seguinte PVI:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \qquad\qquad y(t_0) = y_0$$

Considere que a solução exata deste PVI em um ponto t_n é dada por $\phi(t_n)$ e que a solução obtida com o uso de método numérico neste ponto é y_n. Como comentado anteriormente, na resolução computacional do problema, existem associados erros de arredondamento devido à precisão limitada da representação numérica. Considere que y_n^* é o valor arredondado obtido em uma máquina real e y_n é o valor com precisão infinita obtido em uma máquina ideal.

O erro total associado será a diferença entre a solução exata e o valor fornecido pelo computador:

$$\text{Erro total} = \phi(t_n) - y_n^* = (\phi(t_n) - y_n) + (y_n - y_n^*)$$

O primeiro termo representa o erro de truncamento e o segundo o erro de arredondamento associado ao ponto t_n.

Para que um dado método numérico seja adequado, são necessárias duas condições:

- O erro de truncamento acumulado (global) deve tender a zero conforme $\Delta t \to 0$ (consistência);

- O erro de arredondamento acumulado (que não pode ser eliminado) deve ser pequeno em comparação com a solução exata (estabilidade).

2.1 Equação Modelo: Decaimento de Primeira Ordem

Para ilustrar as características de estabilidade de um método, considere a equação:

$$\frac{dy}{dt} = -\lambda y \qquad\qquad y(0) = 1$$

onde $\lambda > 0$. Esta equação representa uma taxa de decaimento de primeira ordem, que surge, por exemplo, na análise da variação na fração de um dado reagente em uma reação de primeira ordem.

Considerando novamente que $\phi(t)$ é a solução exata da equação, o valor calculado numericamente pode ser expresso como:

$$y(t) = \phi(t) + \varepsilon(t)$$

Substituindo na equação diferencial:

$$\frac{d(\phi + \varepsilon)}{dt} = -\lambda(\phi + \varepsilon)$$

Como as solução exata deve satisfazer a equação diferencial, temos que:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\lambda\varepsilon$$

Esta equação serve como uma relação para determinar como o erro varia ao longo do tempo, ou seja, ao longo dos passos avaliados. Se o erro diminuir com o tempo, o método é ***estável***, caso contrário será ***instável***.

Por exemplo, considere que o método de Euler explícito seja utilizado para avaliar $\varepsilon(t)$:

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \Delta t(-\lambda\varepsilon_n) = \varepsilon_n(1 - \Delta t\lambda) \qquad \rightarrow \qquad \frac{\varepsilon_{n+1}}{\varepsilon_n} = 1 - \Delta t\lambda$$

Para garantir a estabilidade, é preciso que o erro em t_{n+1} seja menor que o erro em t_n, assim:

$$\left|\frac{\varepsilon_{n+1}}{\varepsilon_n}\right| \leq 1$$

Considerando a relação anterior:

$$|1 - \Delta t\lambda| \leq 1$$

Desse modo, o passo de tempo para garantir a estabilidade deve ser maior que zero e menor que $2/\lambda$.

A região contendo os valores de $\lambda\Delta t$ que levam a uma solução estável é chamado de domínio de estabilidade linear. O parâmetro λ pode ser um número complexo, de modo que o domínio de estabilidade costuma ser representado no plano complexo. Definindo $z = -\lambda\Delta t$, temos que para o método de Euler explícito ser estável a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$|1 + z| \leq 1$$

Fazendo $z = a + bi$:

$$|1 + (a + bi)| \leq 1 \qquad \rightarrow \qquad |(a + 1) + bi| \leq 1$$

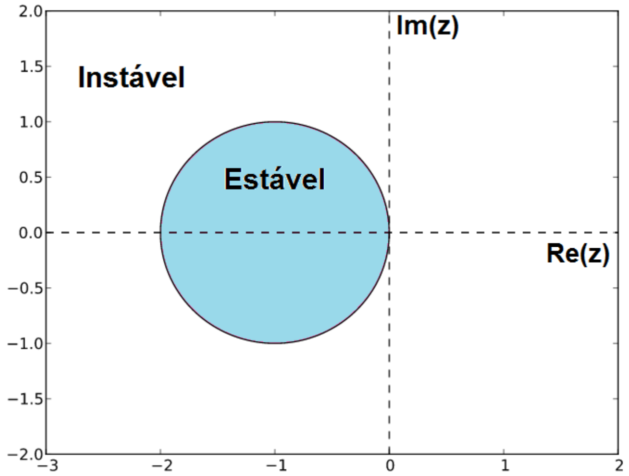
Para um número complexo qualquer $\alpha + \beta i$, o módulo é definido como:

$$|\alpha + \beta i| = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$$

Assim, para o caso anterior, temos que:

$$|(a+1)+bi| = \sqrt{(a+1)^2+b^2} \leq 1 \qquad \rightarrow \qquad (a+1)^2+b^2 \leq 1$$

Esta relação representa um círculo de raio menor ou igual a 1, deslocado em uma unidade para a esquerda no eixo equivalente a a. Como a é a parte real de z e b a parte imaginária de z, o domínio de estabilidade do método de Euler explícito representa a região indicada na figura a seguir.



Considere agora que seja empregado o método de Euler implícito:

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \Delta t(-\lambda\varepsilon_{n+1}) \qquad \rightarrow \qquad \varepsilon_{n+1}(1+\Delta t\lambda) = \varepsilon_n$$

Com isso:

$$\frac{\varepsilon_{n+1}}{\varepsilon_n} = \frac{1}{1+\Delta t\lambda}$$

Como $\lambda > 0$ e $\Delta t > 0$, esta relação mostra que o método de Euler implícito é estável para qualquer valor de Δt, o que é uma característica comum dos métodos implícitos.

Considere agora a modificação de segunda ordem baseada na regra do ponto médio:

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \frac{\Delta t}{2}(-\lambda\varepsilon_n - \lambda\varepsilon_{n+1})$$

De modo que:

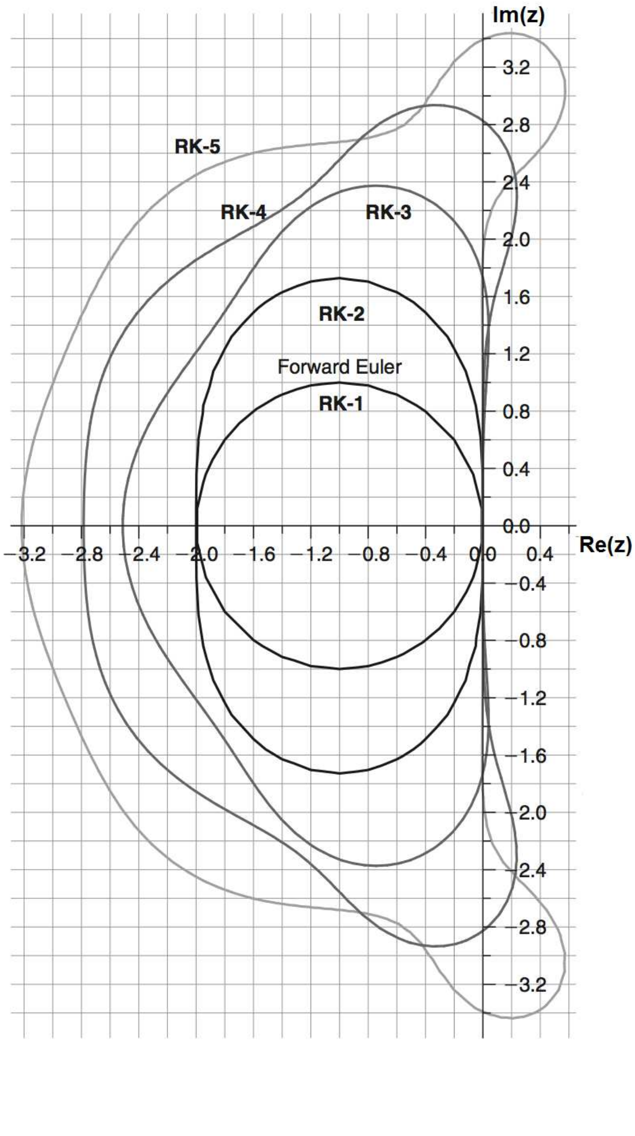
$$\varepsilon_{n+1}(1+\Delta t\lambda/2) = \varepsilon_n(1-\Delta t\lambda/2) \qquad \rightarrow \qquad \frac{\varepsilon_{n+1}}{\varepsilon_n} = \frac{1-\Delta t\lambda/2}{1+\Delta t\lambda/2}$$

Considerando a condição para estabilidade:

$$\left|\frac{1-\Delta t\lambda/2}{1+\Delta t\lambda/2}\right| \leq 1$$

Neste caso, a solução também será estável para qualquer $\Delta t > 0$.

Para os demais métodos explícitos, a estabilidade também está condicionada a um domínio específico. Em particular para o caso dos métodos de RK de ordem maior que 1, pode-se mostrar que o domínio de estabilidade linear engloba o domínio associado ao método de Euler explícito (RK de primeira ordem). Assim, se a condição $\Delta t < 2/\lambda$ for respeitada, os métodos de RK de ordem superior serão estáveis. O domínio de estabilidade de métodos de Runge-Kutta de ordem 1 até 5 é representado na figura a seguir:



3 Problemas Rígidos (Stiff)

Algumas equações ou sistemas de equações diferenciais são classificados como rígidos (stiff). Não existe uma definição precisa para classificar uma EDO como rígida, mas estes tipos de problema compartilham características em comum:

- Normalmente existem termos que levam à uma rápida variação na solução;

- Problemas rígidos possuem uma variedade de escalas de tempo associadas, ou seja, em determinados pontos a solução varia muito mais rapidamente que em outras;

- Métodos explícitos só são estáveis para a resolução de EDO's rígidas se o passo de tempo utilizado for muito pequeno;

- Usualmente, o passo de tempo utilizado para garantir a *estabilidade* é menor que o necessário para garantir a *convergência* desejada.

A equação teste utilizada anteriormente:

$$\frac{dy}{dt} = -\lambda y \qquad\qquad y(t_0) = y_0$$

é um exemplo de equação rígida, especialmente para altos valores de λ. Esta equação possui solução da forma:

$$y = y_0 e^{-\lambda t}$$

Como visto anteriormente, se um método explícito for empregado, deve-se usar um valor de Δt suficientemente pequeno para garantir a estabilidade da solução. Por exemplo, para o método de Euler explícito:

$$\Delta t < \frac{2}{\lambda}$$

Caso for necessário avaliar a solução até um tempo final t_1, o número de passos necessários (n) será:

$$n = \frac{t_1}{\Delta t} \qquad \rightarrow \qquad n > \frac{\lambda t_1}{2}$$

Assim, o número de passos mínimo necessários é diretamente proporcional ao valor de λ.

3.1 Sistemas de Equações Diferenciais Rígidas Lineares

Considere o seguinte PVI:

$$\frac{dy_1}{dt} = -500.5 y_1 + 499.5 y_2 \qquad\qquad y_1(0) = 2$$

$$\frac{dy_2}{dt} = 499.5 y_1 - 500.5 y_2 \qquad\qquad y_2(0) = 1$$

A solução deste problema é a seguinte:

$$y_1(t) = 1.5 e^{-t} + 0.5 e^{-1000t}$$

$$y_2(t) = 1.5e^{-t} - 0.5e^{-1000t}$$

Assim, a solução possui dois termos: um termo e^{-t} que varia lentamente com o tempo e outro e^{-1000t} que varia rapidamente. Para garantir a estabilidade, é preciso que a solução se mantenha estável durante toda a resolução, por isso, a estabilidade deve ser assegurada para o termo e^{-1000t}.

De modo geral, os valores de Δt empregados devem ser determinados sem o conhecimento da solução. O PVI anterior pode ser reescrito como:

$$\frac{dY}{dt} = \begin{pmatrix} -500.5 & 499.5 \\ 499.5 & -500.5 \end{pmatrix} Y = AY$$

O valor de Δt necessário é definido com base nos autovalores da matriz A. Lembrando que os autovalores λ são definidos como os valores onde:

$$|A - \lambda I| = 0$$

Assim, para este caso:

$$\begin{vmatrix} -500.5 - \lambda & 499.5 \\ 499.5 & -500.5 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad \rightarrow \qquad (-500.5 - \lambda)^2 - 499.5^2 = 0$$

Resolvendo a equação de segundo grau, obtém-se as seguintes raízes:

$$\lambda_1 = -1 \qquad\qquad \lambda_2 = -1000$$

Para garantir a estabilidade em um método explícito, pode-se considerar a função teste usada anteriormente $dy/dt = -\lambda y$, com λ sendo o maior dos autovalores (em módulo) associados com o problema. Por exemplo, caso o método de Euler explícito seja empregado, deve-se garantir que:

$$\Delta t \leq \frac{2}{|\lambda_{max}|}$$

Considerando que no exemplo $|\lambda_{max}| = 1000$, então temos que o passo de tempo máximo é de 0.002. Caso o menor autovalor fosse empregado, seria obtido um valor de $\Delta t_{max} = 2$. Após os instantes iniciais, o problema passa a ser controlado pelo menor autovalor.

Para medir a importância da rigidez na resolução do problema, pode-se determinar o *grau de rigidez (stiffness ratio)* do problema, definido com:

$$SR = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|}$$

Normalmente, para $SR > 20$ o problema já é classificado como rígido, sendo necessário avaliar com cuidado os passos de tempo empregados.

3.2 Sistemas Não-Lineares

Para problemas não-lineares, a análise é mais complexa. Para problemas autônomos, da forma:

$$\frac{dY}{dt} = f(Y)$$

pode-se linearizar a equação através de uma expansão em série de Taylor em torno do ponto t_n. Desconsiderando os termos de alta ordem:

$$\frac{dY}{dt} = f(Y_n) + J(t_n)(Y - Y_n)$$

onde $J(t_n)$ é a matriz Jacobiana avaliada em $t = t_n$, definida como:

$$J(t_n) = a_{ij} = \left[\frac{\partial f_i(y)}{\partial y_j}\right]_{t_n}$$

Por exemplo, em um sistema 2×2 da forma:

$$\frac{dy}{dt} = f(x, y) \qquad\qquad \frac{dx}{dt} = g(x, y)$$

O Jacobiano em um ponto t_n é determinado da forma:

$$J(t_n) = \begin{pmatrix} \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{t_n} & \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{t_n} \\ \left.\frac{\partial g}{\partial x}\right|_{t_n} & \left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{t_n} \end{pmatrix}$$

Neste caso, a razão de rigidez é definida com base nos autovalores da matriz Jacobiana. Como $J(t_n)$ pode depender do tempo, a razão de rigidez pode variar ao longo da solução.

Os valores de Δt necessários para garantir a estabilidade também podem ser definidos com base nos autovalores da matriz Jacobiana.

Obs.: Caso t_n for um ponto fixo, os autovalores do Jacobiano também servem para definir se o ponto é estável ou não, sendo instável caso algum autovalor tenha parte real positiva.

Exemplo: Considere o seguinte PVI:

$$\frac{dy}{dt} = y^2 x \qquad\qquad y(0) = 2$$

$$\frac{dx}{dt} = -400yx^2 \qquad\qquad x(0) = 1$$

Determine a razão de rigidez em $t = 0$. Caso o método de Euler explícito for empregado, qual o valor máximo de Δt?