Revista Eletrônica
Paulista de Matemática

ISSN 2316-9664
Volume 10, dez. 2017
Edição Ermac

Patrícia Kyo Fukushima

Universidade de São Paulo -
Faculdade de Filosofia, Ciências
e Letras de Ribeirão Preto
patricia.fukushima@usp.br

Vanessa Rolnik

Universidade de São Paulo -
Faculdade de Filosofia, Ciências
e Letras de Ribeirão Preto
vanessarolnik@ffclrp.usp.br

Renato Tinós

Universidade de São Paulo -
Faculdade de Filosofia, Ciências
e Letras de Ribeirão Preto
rtinos@ffclrp.usp.br

Determinação dos saltos em equações diferenciais impulsivas

Determination of the jumps in impulsive differential equations

Resumo

As equações diferenciais impulsivas (EDIs) modelam vários problemas que surgem naturalmente em diversas áreas da ciência, sendo responsáveis por modelar fenômenos com impulsos. Nosso interesse não é encontrar a solução da EDI e sim determinar o salto que a solução sofre em cada momento de impulso. Os parâmetros que definem os saltos não podem ser encontrados diretamente por meio de resolução convencional. Dessa forma, tratamos o problema como inverso e adotamos uma abordagem funcional na qual procuramos minimizar um erro que confronta dois modelos. Um dos modelos é numérico, implementado computacionalmente e que utiliza valores aproximados para o salto, e outro é experimental, que corresponde aos valores das soluções que são medidas ou inferidas no tempo final do experimento. O erro é minimizado por meio de um algoritmo genético. Como aplicação, descrevemos uma situação na qual o salto corresponde à dosagem de um medicamento. O programa desenvolvido encontrou com um alto grau de precisão, a solução do problema proposto, o que nos permite concluir que a abordagem é viável.

Palavras-chave: Problemas inversos. Equações diferenciais impulsivas. Determinação do impulso. Algoritmos genéticos.

Abstract

Impulsive Differential Equations (IDEs) model several problems that arise naturally in several areas of science and are responsible for modelling phenomena with impulses. Our interest is not to find the solution of the IDE but to determine the jump suffered in each impulsive moment. The parameters of the jump cannot be found directly by conventional resolution. In this way, we treat the problem as inverse and we adopt a functional approach to minimize an error that confronts two models. One of the models is numerical, implemented computationally and that uses approximate values for the jump, and the other one is experimental, that corresponds to the values of the solutions that are measured or inferred in the end of the experiment. The error is minimized by genetic algorithm. As an application, we describe a situation in which the jump variation corresponds to the dosage of a drug. The developed program found with a high degree of precision the solution of the proposed problem, which allows us to conclude that the approach is feasible.

Keywords: Inverse problems. Impulsive differential equations. Determination of the impulse. Genetic algorithms.

1 Introdução

As equações diferenciais impulsivas (EDIs) são responsáveis por descrever os processos de evolução que estão sob influência de efeitos impulsivos, ou seja, em certos momentos os processos sofrem uma mudança abrupta de estado (LAKSHMIKANTHAM; BAINOV; SIMEONOV, 1989). Assim, por meio de equações diferenciais envolvendo efeitos impulsivos, podemos analisar os fenômenos que nos cercam. O interesse neste tipo de equações (EDIs) tem crescido muito nos últimos anos e, recentemente, um número considerável de pesquisas tem sido publicado. Podemos citar, entre outras, Wang e Fu (2007), Zhang, Yan e Zhao (2008), Fu e Li (2009), Wang, Yu e Niu (2012), Li, Bohner e Wang (2015).

Em geral, a modelagem de situações mais realistas requer a introdução de informações adicionais, como os impulsos, o que torna difícil ou mesmo impossível a busca por uma solução analítica. Nestes casos, os métodos numéricos desempenham um papel fundamental. Muitos resultados importantes sobre os métodos numéricos para resolver EDIs estão fundamentados na matemática e provaram fornecer as ferramentas necessárias para resolução de tais problemas. Por exemplo, baseado na teoria apresentada pelos autores Lakshmikantham, Bainov e Simeonov (1989) e Samoilenko e Perestyuk (1995), Randelovic, Stefanovic e Dankovic (2000) apresentaram algoritmos para resolver EDIs. Liu, Liang e Yang (2007), investigaram a estabilidade das soluções das EDIs que são obtidas usando o método de Runge-Kutta com passos de tamanho variável. Ran, Liu e Zhu (2008) discutiram a estabilidade para os passos de tamanho constante.

Entretanto, muitas vezes há o interesse em obter algum parâmetro do problema o qual não pode ser encontrado diretamente por meio de resolução convencional. Uma abordagem é tratar esses problemas como inversos. Os problemas inversos em geral, estão associados a problemas diretos. O problema direto busca determinar os efeitos desconhecidos a partir do conhecimento das causas. O problema inverso, por sua vez, busca determinar as causas desconhecidas a partir do conhecimento dos efeitos (ALIFANOV, 1994).

No caso do sistema de EDIs, o problema direto é a determinação da solução do sistema de EDIs a partir do conhecimento da EDO, das condições iniciais, dos momentos de impulso e dos saltos. Um problema inverso que surge é o de determinar os saltos nos momentos de impulso a partir do conhecimento da EDO, das condições iniciais e dos momentos dos impulsos.

Para resolver esse problema inverso adotamos uma abordagem que envolve a minimização de um funcional de erro, o qual necessita de um método robusto de otimização. Testes preliminares mostraram o comportamento de superfícies de erro e as dificuldades para o método de otimização alcançar o mínimo global (FUKUSHIMA; ROLNIK, 2017). Dando continuidade, neste trabalho utilizamos os Algoritmos Genéticos (AGs), uma metaheurística populacional que tem sido utilizada com êxito em diversos problemas (EIBEN; SMITH, 2015). Os AGs utilizam conceitos provenientes do princípio Darwiniano de seleção natural para resolver uma série de problemas (HOLLAND, 1975), em especial de otimização. São ferramentas atraentes para resolver problemas inversos.

Assim, o objetivo deste trabalho é determinar os saltos de equações diferenciais impulsivas abordando o problema como inverso e utilizando AGs para minimizar o funcional de erro.

2 Metodologia

Para resolver os problemas inversos, foram considerados os sistemas com impulsos em tempos pré-fixados, como introduzidos por Lakshmikantham, Bainov e Simeonov (1989). Foi ado-

tada também uma abordagem funcional no qual foram confrontados dois modelos, um numérico, x_{num} , implementado computacionalmente, que utiliza valores aproximados para os saltos, e outro experimental, x_{real} , que corresponde aos valores das soluções que são medidas ou inferidas no tempo final do experimento. Na posse dessas duas medidas, foi criado um funcional de erro que mede a discrepância entre as informações obtidas pelos dois modelos.

De forma simplificada, o esquema mostrado na Figura 1, baseado em (MENIN; MARTINEZ; ROLNIK, 2016), supõe $I_{prospectivo}$ como um conjunto de valores aproximados para os saltos. Com esses valores, resolve-se a EDI, obtendo a solução x_{num} . O funcional de erro compara esse valor obtido com a solução exata da EDI no tempo final, e por meio de um algoritmo de otimização, modifica-se o conjunto de valores aproximados para os saltos e resolve-se as EDIs novamente. O processo para quando o erro $E(I)$ é menor que uma dada tolerância. Assumimos que o resultado encontrado, $I_{procurado}$ é o valor ótimo para o problema em questão.

Figura 1 – Esquema da resolução do problema inverso de EDIs pela abordagem funcional.

Um programa computacional foi implementado no software Matlab usando os métodos de Runge-Kutta adaptado para EDIs e um AG, descritos a seguir.

3 Desenvolvimento

Consideremos a EDI na forma

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x), & t \in [a, b] \text{ e } t \neq t_k, \quad k = 1, 2, \dots \\ x(a) = \alpha \\ \Delta x = I_k(x(t_k)), \end{cases} \quad (1)$$

na qual $f: \mathbb{R}_+ \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e $\mathbb{R}_+$ é o conjunto dos números reais não negativos; $I_k: \Omega \rightarrow \Omega$ e $\Delta x = x(t_k^+) - x(t_k^-)$, $x(t_k^+) = \lim_{h \rightarrow 0^+} x(t_k + h)$ e $x(t_k^-) = \lim_{h \rightarrow 0^+} x(t_k - h)$ indicam os limites laterais à direita e à esquerda, respectivamente.

O desempenho geral da simulação depende fortemente dos métodos numéricos empregados no problema impulsivo. O método aplicado neste trabalho é o Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) adaptado para EDIs. O método segue os seguintes passos: no instante $t = a$, inicia com valor $x = \alpha$ e calcula x em cada passo no tempo até encontrar o primeiro momento de impulso, t_1 , ou seja, executamos o método no intervalo $[t_0, t_1)$. Em $t = t_1$, aplicamos o operador impulso, I_1 , para encontrar o valor do limite à direita, x_1^+ . Então aplicamos novamente o RK4, começando de $x = x_1^+$ até o próximo momento de impulso, t_2 . Em $t = t_2$, aplicamos o operador impulsivo, I_2 , para encontrar o valor do limite à direita, x_2^+ . E assim sucessivamente até b .

Na implementação do algoritmo de otimização, os componentes utilizados no AG seguiram os seguintes passos: inicialmente é gerada uma população formada por um conjunto aleatório de indivíduos uniformemente distribuídos em um intervalo viável. Especificamente, é um conjunto de valores aproximados para os saltos em um intervalo $[I_{min}, I_{max}]$ que seja factível a aplicação estudada. Durante o processo evolutivo, o modo de avaliar a aptidão dos indivíduos como possíveis soluções para o problema é determinado pela função de avaliação (fitness). Para esse problema, definimos o funcional de erro como a função fitness do AG. Com base na função de avaliação, algumas soluções serão selecionadas para se reproduzirem e assim darem origem a uma nova população. Os operadores de seleção que foram utilizados são Elitismo, para preservar o melhor indivíduo da população anterior, e Torneio, para selecionar os demais indivíduos. Os indivíduos mantidos pela seleção passam por modificações em suas características fundamentais através dos operadores de recombinação e mutação, com exceção do indivíduo obtido por Elitismo. A recombinação gera novos indivíduos, a partir da recombinação das características de dois indivíduos (pais). O operador de recombinação utilizado foi a recombinação de um ponto que é estabelecido aleatoriamente. A mutação é aplicada em um indivíduo a fim de alterar alguma característica do mesmo. O operador de mutação utilizado foi a mutação uniforme, onde o gene é alterado por um número aleatório uniforme no intervalo $[I_{min}, I_{max}]$. Ao final desse processo, a nova população é avaliada. Esse processo é repetido até que um número máximo de iterações (gerações) seja obtido. A Figura 2 ilustra o fluxograma do AG.

4 Resultados

Considere o problema

$$\begin{cases} x'(t) = 1 + x^2, & t \neq \frac{k\pi}{4}, & k = 1, 2, \dots \\ x(0) = 0 \\ \Delta x = -1, & t = \frac{k\pi}{4} \end{cases} \quad (2)$$

cujas solução exata é $x(t) = tg(t - \frac{k\pi}{4})$, $t \in [\frac{k\pi}{4}, \frac{(k+1)\pi}{4})$, que é periódica com período $\frac{\pi}{4}$ e que possui o gráfico mostrado na Figura 3.

A solução pode representar de forma bastante simplificada, e sem preocupação com a escala de medição, por exemplo, a elevação da taxa de glicose no organismo. Em tempos pré-definidos, o paciente faz uso de insulina (ação modelada pelo salto), abaixando a taxa de glicose. Em seguida, a taxa volta a subir e o processo se repete.

Figura 2 – Diagrama do algoritmo genético.

Supondo que não conhecemos a função salto $I_k(x)$, o objetivo é determiná-la. Para isso, restringimos o intervalo de tempo para $[0, \frac{\pi}{2}]$ onde existem exatamente dois momentos de impulso, $t_1 = \frac{\pi}{4}$ e $t_2 = \frac{\pi}{2}$ e os saltos correspondentes, os quais chamamos de I_1 e I_2 . Estas são, portanto, as duas incógnitas do problema inverso que são as coordenadas do $I_{prospectivo}$.

Inicialmente exploramos o espaço de busca usando uma amostragem grosseira, variando I_1 e I_2 de -2 a -0.5 com passos 0.1, gerando uma malha 16×16 . Para cada ponto, calculamos diferença entre x_{num} e $x(\frac{\pi}{2})$ obtendo a superfície de erro mostrada na Figura 4. O ponto de mínimo global ocorre no ponto da malha (11,11), que corresponde à solução procurada $I_1 = -1$ e $I_2 = -1$. Já o ponto de mínimo local em (6,13) informa que o primeiro salto igual a -1.5 e o segundo igual a -0.8 levam x_{num} bem próxima à solução desejada $x(\frac{\pi}{2})$.

Como pode ser visto ainda na Figura 4, a superfície apresenta diversos tipos de dificuldades para o método de otimização alcançar o mínimo global, como múltiplos mínimos locais, regiões quase planas, entre outros. Assim, métodos que tendem a convergir para ótimos locais não são indicados, justificando a escolha pelo AG.

Para o AG, depois de alguns experimentos iniciais variando os parâmetros do algoritmo, definimos o tamanho da população como sendo 20, a probabilidade de recombinação sendo 0.8, o número de iterações (gerações) sendo 17000, probabilidade de mutação sendo 0.2, intervalo viável sendo $[-2, -0.5]$.

Na Figura 5, é apresentada a média e os quartis do funcional de erro de cada gerações durante

Figura 3 – Gráfico da solução exata da EDI.

Figura 4 – Gráfico do funcional de erro.

o total de cem execuções. Como pode-se observar no gráfico, conforme o número de gerações aumenta, os saltos, $I_{prospectivo}$, fornecem soluções numéricas, x_{num} , bem próximas à solução exata, x_{real} . A melhor solução encontrada pelo AG foi $I_1 = -1.0304$ e $I_2 = -0.9410$, que teve um valor de $E(I) = 8.9139 \times 10^{-6}$.

Por fim, o histograma apresentado na Figura 6 mostra a distribuição do erro da última geração. Podemos observar que todos os indivíduos da última geração possuem fitness abaixo de 2.413×10^{-5} e que a faixa de valores da última geração foi dividida em 11 grupos igualmente espaçados e o número de valores dos erros que caem em cada grupo é contabilizado. Observando os dois primeiros grupos, o primeiro correspondendo ao intervalo $[0, 0.2246 \times 10^{-5}]$ obteve frequência 41 e o segundo com o intervalo $[0.2246 \times 10^{-5}, 0.4435 \times 10^{-5}]$ obteve frequência 26. Além disso, é possível perceber que a média desses erros é 4.3327×10^{-6} . Experimentos não apresentados aqui indicam que, se diferentes sementes aleatórias são utilizadas, resultados semelhantes são obtidos. Isto indica que o problema de otimização não é difícil para o AG.

Figura 5 – Erro em função da geração.

Figura 6 – Distribuição do erro.

5 Conclusão

O problema de determinar os saltos em EDIs não é tarefa trivial. O programa desenvolvido encontrou com um alto grau de precisão, a solução do problema proposto, o que nos permite concluir que a abordagem em termos de problemas inversos é viável. A metodologia utilizada engloba várias escolhas como o método numérico para solução da EDO, o funcional de erro e o algoritmo de otimização. Portanto, há um campo vasto para pesquisa nesse sentido.

Além disso, aplicações concretas podem ser exploradas, principalmente no que diz respeito a simulações de problemas reais, sem a realização de testes invasivos, como a calibração da dosagem de medicamentos.

6 Agradecimentos

Agradecemos à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

7 Referências bibliográficas

- ALIFANOV, O. M. **Inverse heat transfer problems**. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1994. (International series in heat and mass transfer).
- EIBEN, A. E.; SMITH, J. From evolutionary computation to the evolution of things. **Nature**, v. 521, n. 7553, p. 476-482, 2015.
- FU, X.; LI, X. New results on pulse phenomena for impulsive differential systems with variable moments. **Nonlinear Analysis**, v. 71, n. 7-8, p. 2976-2984, 2009.
- FUKUSHIMA, P. K.; ROLNIK, V. Determinação da intensidade do impulso em equações diferenciais impulsivas. In: ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 4., 2017, Bauru. **Caderno de trabalhos completos e resumos**. Bauru: Unesp, Faculdade de Ciências, 2017. p. 468-470. Disponível em: <<http://www.fc.unesp.br/#!/departamentos/matematica/eventos2341/ermac/cadesnos-detrabalhos-completos-e-resumos/>>. Acesso em: 08 nov. 2017.
- HOLLAND, J. H. **Adaptation in natural and artificial systems**: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence. Ann Arbor, MI: University of Michigan Press, 1975.
- LAKSHMIKANTHAM, V.; BAINOV, D. D.; SIMEONOV, P. S. **Theory of impulsive differential equations**. Singapore: World Scientific, 1989.
- LI, X.; BOHNER, M.; WANG, C. Impulsive differential equations: periodic solutions and applications. **Automatica**, v. 52, p. 173-178, 2015.
- LIU, M. Z.; LIANG, H.; YANG, Z. W.; Stability of Runge-Kutta methods in the numerical solution of linear impulsive differential equations. **Applied Mathematics and Computation**, v. 192, n. 2, p. 346-357, 2007.
- MENIN, O. H.; MARTINEZ, A. S.; ROLNIK, V. **Tomografia de impedância elétrica**: métodos computacionais. São Paulo: Livraria da Física, 2016.
- RAN, X. J.; LIU, M. Z.; ZHU, Q. Y. Numerical methods for impulsive differential equation. **Mathematical and Computer Modelling**, v. 48, n. 1-2, p. 46-55, 2008.
- RANDELOVIC, B. M.; STEFANOVIC, L. V.; DANKOVIC, B. M. Numerical solution of impulsive differential equations. **Facta Univ. Ser Math. Inform**, v. 15, p. 101-111, 2000.
- SAMOILENKO, A. M.; PERESTYUK, N. A. **Impulsive differential equations**. Singapore; River Edge: World Scientific, 1995.
- WANG, L.; FU, X. A new comparison principle for impulsive differential systems with variable impulsive perturbations and stability theory. **Comput. Math. Appl.**, v. 54, n. 5, p. 730-736, 2007.
- WANG, L.; YU, M.; NIU, P. Periodic solution and almost periodic solution of impulsive Lasota-Ważewska model with multiple time-varying delays. **Comput. Math. Appl.**, v. 64, n. 8, p. 2383-2394, 2012.
- ZHANG X.; YAN, J.; ZHAO, A. Existence of positive periodic solutions for an impulsive differential equation. **Nonlinear Analysis**, v. 68, n. 10, p. 3209-3216, 2008.

Artigo recebido em jun. 2017 e aceito em nov. 2017.