Erro global, métodos implícitos

Apresentação 2 — Aula Teórica 2

Física Computacional

Departamento de Física
Universidade de Aveiro

18 ou 19 de fevereiro de 2019

Erro local

Sabemos que existe um $t' \in [t_0, t_0 + h]$ tal que

$$y(t_0 + h) = y(t_0) + y^{(1)}(t_0)h + \frac{1}{2}y^{(2)}(t')h^2$$

No método de Euler estimamos $y(t_0 + h)$ usando

$$y_1 = y(t_0) + y^{(1)}(t_0)h = y(t_0) + f(y_0, t_0)h$$

Usando a expressão anterior, podemos concluir que o erro cometido no passo 1 é de ordem h^2, ou seja

$$\boxed{y_1} - \boxed{y(t_1)} = \text{const.}\, h^2$$

estimativa valor exato

Ao erro cometido em cada passo dá-se o nome de **erro local**.

Erro global

Suponha que a equação diferencial é resolvida numericamente, desde t_0 a t_f, com um passo h, usando $N = (t_f - t_0)/h + 1$ pontos. O erro

$$y_N - y(t_f)$$

designa-se por **erro global** e deve-se aos erros acumulados ao longo de todos os passos.

Pode provar-se que, desde que satisfeitas algumas condições, o erro global do método de Euler é de ordem h, ou seja,

$$y_N - y(t_f) = \text{const.}\, h$$

Podemos explicar qualitativamente este resultado notando que:

- O erro local é da ordem de h^2.
- O número de pontos aumenta linearmente com h^{-1}.

O erro global aumenta com o número de pontos e com o erro introduzido em cada passo, sendo da ordem de h.

Erro global e número de passos

Dado que h é inversamente proporcional ao número de pontos[1]

$$y_N - y(t_f) = \text{const.}\, N^{-1}$$

chega-se a

$$y_N = \text{const.}\, N^{-1} + y(t_f).$$

Se esta relação se verifica, então um gráfico do valor numérico y_N em função de N^{-1} deve ter como ordenada na origem uma estimativa do valor exato $y(t_f)$.

[1] Na realidade, é inversamente proporcional a $N - 1$...

Instabilidade do método de Euler aplicado ao OHS

Nesta aula não vão ser discutidas formalmente as questões de convergência e estabilidade dos métodos numéricos estudados, mas o exemplo seguinte ajuda a começar a entender o que está em causa.

Método de Euler

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k + f(t_k, y_k, v_k) \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + v_k \cdot h \end{cases}$$

Para o oscilador harmónico simples, fica

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k - \omega^2 y_k \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + v_k \cdot h \end{cases}$$

A energia total no instante t_k é a soma da energia cinética com a energia potencial:

$$E_k = \frac{1}{2} m\omega^2 y_k^2 + \frac{1}{2} m v_k^2$$

Instabilidade do método de Euler aplicado ao OHS

$$
\begin{aligned}
E_{k+1} &= \frac{1}{2}m\omega^2 y_{k+1}^2 + \frac{1}{2}m v_{k+1}^2 \\
&= \frac{1}{2}m\omega^2 \left(y_k + v_k h\right)^2 + \frac{1}{2}m\left(v_k - \omega^2 y_k h\right)^2 \\
&= \frac{1}{2}m\omega^2 \left(y_k^2 + v_k^2 h^2 + 2 y_k v_k h\right) + \frac{1}{2}m\left(v_k^2 + \omega^4 y_k^2 h^2 - 2 v_k \omega^2 y_k h\right) \\
&= \left(\frac{1}{2}m\omega^2 y_k^2 + \frac{1}{2}m v_k^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 h^2 \left(v_k^2 + \omega^2 y_k^2\right) \\
&= E_k + \frac{1}{2}m\omega^2 h^2 \left(v_k^2 + \omega^2 y_k^2\right)
\end{aligned}
$$

$$E_{k+1} > E_k$$

A energia total, que se devia conservar, aumenta em todos os passos.

Método de Euler–Cromer

Uma modificação do método de Euler, usada especialmente para conseguir estabilidade em problemas de movimento oscilatório, é o método de **Euler–Cromer**, também conhecido como **Euler semi-implícito** ou **Euler semi-explícito**, que se descreve em seguida.

Método de Euler–Cromer

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k + f(t_k, y_k, v_k) \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + v_{k+1} \cdot h \end{cases}$$

No caso do OHS, fica

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k - \omega^2 y_k \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + v_{k+1} \cdot h \end{cases}$$

Note-se que estas equações podem ser usadas diretamente no programa, desde que se use a ordem certa. No método de Euler–Cromer, a energia varia durante cada ciclo de oscilação, mas conserva-se de ciclo para ciclo (não vamos fazer a demonstração formal).

Métodos implícitos

Note que o método de Euler–Cromer é aplicável apenas a casos particulares: num problema de valor inicial descrito por uma ODE de primeira ordem, o método não pode sequer ser aplicado. Uma abordagem mais geral para tentar conseguir a estabilidade é usar o método de **Euler implícito**,

$$y_{k+1} = y_k + f(y_{k+1}, t_{k+1})h$$

ou o método dos trapézios (também conhecido por **Crank–Nicolson**)

$$y_{k+1} = y_k + [f(y_{k+1}, t_{k+1}) + f(y_k, t_k)]\,\frac{h}{2}$$

Nestes casos, y_{k+1} aparece nos dois membros da equação, logo temos que resolver em cada passo uma equação que pode ser não linear se f for não linear. Estamos perante métodos **implícitos** que ganham em estabilidade mas perdem pelo aumento da complexidade de cada passo.

Ordem dos métodos implícitos

Pode provar-se que o erro global de:

- o método de Euler implícito é de ordem h;
- o método de Crank–Nicolson é de ordem h^2.

Aplicação do método de Euler implícito ao OHS

Aplicando o método de Euler implícito ao oscilador harmónico, vem

$$\begin{cases} y_{k+1} = y_k + v_{k+1} \cdot h \\ v_{k+1} = v_k - \omega^2 y_{k+1} \cdot h \end{cases}$$

ou

$$\begin{cases} y_{k+1} = \dfrac{y_k + v_k \cdot h}{1 + \omega^2 h^2} \\ v_{k+1} = v_k - \omega^2 y_{k+1} \cdot h \end{cases}$$

Para obter a primeira equação do segundo sistema, v_{k+1} foi substituído usando a sua expressão da segunda equação e a equação resultante foi resolvida em ordem a y_{k+1}.

Note que o segundo sistema já nos permite programar diretamente o método.

Aplicação do método de Euler implícito ao OHS

Em alternativa, podemos deixar a resolução do sistema para o Matlab. Começamos por reescrever o sistema isolando à direita os termos com índice k,

$$\begin{cases} y_{k+1} + (-h)v_{k+1} = y_k \\ \omega^2 h\, y_{k+1} + v_{k+1} = v_k \end{cases}$$

Este sistema pode ser escrito em notação matricial

$$A\mathbf{Z} = \mathbf{b}$$

onde A é uma matriz constante

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ \omega^2 h & 1 \end{pmatrix}$$

Aplicação do método de Euler implícito ao OHS

$$A\mathbf{Z} = \mathbf{b}$$

$\mathbf{Z}$ é o vetor que queremos calcular e $\mathbf{b}$ um vetor de termos independentes que varia de passo para passo.

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} y_{k+1} \\ v_{k+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} y_k \\ v_k \end{pmatrix}$$

O sistema $A\mathbf{Z} = \mathbf{b}$ pode ser resolvido com a rotina `linsolve` do Matlab.

Aplicação do método de Crank–Nicolson ao OHS

Aplicando o método de Crank–Nicolson ao oscilador harmónico, vem

$$\begin{cases} y_{k+1} = y_k + (v_{k+1} + v_k) \cdot \dfrac{h}{2} \\ v_{k+1} = v_k - \omega^2 (y_{k+1} + y_k) \cdot \dfrac{h}{2} \end{cases}$$

Para escrever este sistema em notação matricial,

$$A\mathbf{Z} = \mathbf{b}$$

organizamos as variáveis da maneira descrita anteriormente, isolando à direita os termos com índice k:

$$\begin{cases} y_{k+1} + \left(-\dfrac{h}{2}\right) v_{k+1} = y_k + \dfrac{h}{2} v_k \\ \omega^2 \dfrac{h}{2}\, y_{k+1} + v_{k+1} = v_k - \omega^2 \dfrac{h}{2}\, y_k \end{cases}$$

Aplicação do método de Crank–Nicolson ao OHS

Assim, a matriz constante A é dada por

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -\dfrac{h}{2} \\ \omega^2\dfrac{h}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

enquanto que o vetor $\mathbf{Z}$ que queremos calcular e o vetor $\mathbf{b}$ de termos independentes (que varia de passo para passo) são dados por

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} y_{k+1} \\ v_{k+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} y_k + \dfrac{h}{2}\, v_k \\ v_k - \omega^2\dfrac{h}{2}\, y_k \end{pmatrix}$$

O sistema $A\mathbf{Z} = \mathbf{b}$ pode ser resolvido com a rotina `linsolve` do Matlab.

Métodos implícitos em casos não lineares

Os procedimentos que usámos para aplicar estes dois métodos ao OHS deixam, em geral, de ser exequíveis quando a equação diferencial não é linear. Uma abordagem diferente será necessária nesses casos.