

Aula 2

- **Erros:**

- de Arredondamento e de Truncatura

- Global e Local

- **Problemas de valor inicial (PVI)**

- Método de Euler-Cromer*

- Métodos Implícitos:*

- Euler Implícito*

- Crank-Nicolson*

- Exemplo de Aplicação:* o oscilador hamónico simples (OHS)



Erros de Arredondamento e de Truncatura

Erros de arredondamento (round-off error)

Erros devido ao número limite de dígitos que podem ser retidos pelo computador. Em geral os cálculos computacionais envolvem números com *dupla precisão*, i.e., os números são representados com 16 dígitos. Esta limitação pode ter um impacto significativo nos cálculos numéricos e em particular para métodos iterativos.

Erros de truncatura ou discretização (truncation error)

Erros de truncatura, ou discretização, são erros causados pela natureza das técnicas empregues para a estimativa de uma dada solução da ODE. Por exemplo no método de Euler, o declive à curva no intervalo h é aproximado pelo declive à curva no 1º ponto do intervalo, sendo assim uma fonte de erro.

Estes erros são constituídos por duas partes:

o erro local de truncatura, que resulta da aplicação do método em questão numa única iteração;

o erro global de truncatura, que resulta das aproximações feitas em iterações prévias. A soma dá-nos o erro global de truncatura



Erro Local

É o erro cometido em cada iteração. Para se estimar o erro local considera-se a expansão da solução em série de Taylor, e compara-se com aproximação da mesma obtida pelo método de Euler. A diferença entre as duas dá-nos uma estimativa do erro local, que é cometido em cada iteração.

Consider-se a expansão da solução em série de Taylor da solução y , supondo que a função possui derivadas contínuas:

$$y(t + h) = y(t) + \frac{dy}{dt}(t) * h + \frac{d^2y}{dt^2}(c) * \frac{h^2}{2!}$$

Em que $c \in [t, t + h]$. Como $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$, a equação anterior reduz-se ao esquema iterativo de Euler,

$$y_{n+1} = y_n + h * f(t_n, y_n) + O(h^2)$$



Então, o erro de truncatura é $O(h^2)$, sendo dado por $\frac{d^2y}{dt^2}(c_n) * \frac{h^2}{2!}$. Ou seja, o erro cometido na iteração $k+1$, designa-se por **erro local**, e é dado por:

$$\epsilon_{k+1} = \text{const} * h^2$$

Erro Global

O erro global é o erro acumulado durante todo o processo de cálculo. Considere que a equação diferencial é resolvida numericamente, deste o instante inicial t_0 a um instante final t_f , em que o número total de pontos N é dado por

$$\frac{(t_f - t_0)}{h} + 1.$$

Se for conhecida a solução exata da equação y , num dado instante t_k o **erro global** será dado pela diferença entre a solução exata $y(t_k)$ e a solução numérica y_k :

$$E_k = y(t_k) - y_k$$



OBS: no final de todas as iterações o erro global será dado por $y(t_f) - y_N$.

E se a solução exata não for conhecida?

→ Para uma iteração, o erro de truncatura é $O(h^2)$, sendo dado por $\frac{d^2y}{dt^2}(c) * \frac{h^2}{2!}$. Após k iterações uma estimativa do erro global poderá ser $\sum_{j=1}^k \frac{d^2y}{dt^2}(c_j) * \frac{h^2}{2!}$.

Pode mostrar-se que o erro global do método de Euler é da ordem de h , ou seja,

$$E_k = \text{const} * h$$

Pode explicar-se 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 iteração, sendo da ordem de h .

Erro Global e número de iterações

Dado que h é inversamente proporcional ao número de pontos, (com rigor a $N-1$), então,

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

Pelo que se pode escrever:

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

Se a equação anterior se verificar, um gráfico da solução numérica y_k em função de N^{-1} deve ter como ordenada na origem uma estimativa do valor exato $y(t_f)$.



LEITURA 1

Método de Euler –Exemplo de Aplicação (Chapra)

Considere o exemplo da Leitura_1 da Aula_1:

$$\frac{dy}{dt} = -2t^3 + 12t^2 - 20t + 8.5$$

No exemplo anterior a equação foi integrada numericamente pelo método de Euler de $t=0$ a $t=3$, com passo temporal de 0.5. A condição inicial em $t=0$ é $y=1$. A solução analítica é dada por: $y = -0.5 t^4 + 4t^3 - 10t^2 + 8.5t + 1$.

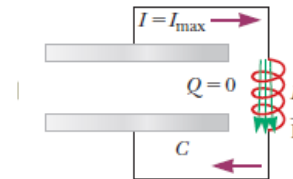
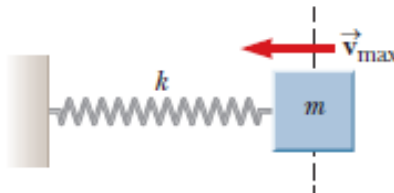
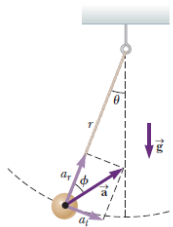
Com o auxílio de uma calculadora obtenha os erros local e global, absolutos e relativos, para $h=0.5$.



Instabilidade do método de Euler aplicado ao OHS

Na presente aula não vão ser discutidas formalmente as questões de convergência e estabilidade dos métodos numéricos estudados, mas o exemplo seguinte ajuda a entender o que está em causa. Até ao presente já estudou alguns sistemas físicos, que em determinadas condições podem ser considerados osciladores harmónicos simples.

Recorde por exemplo, o pêndulo simples, o sistema massa-mola, e o circuito LC .



No caso do pêndulo, a posição angular do massa, solução da equação do movimento, pode ser descrita por $\theta(t) = \theta_{max} \cos(\omega t + \varphi)$, sendo $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$, a frequência da oscilação e φ a fase inicial. De modo semelhante, no circuito LC, a evolução da carga aos terminais do condensador é dada por $C(t) = C_{max} \cos(\omega t + \varphi)$, com $\omega = 1/\sqrt{LC}$ e φ a fase inicial.



Considere-se o sistema massa-mola, de massa m e cuja constante da mola é K . Pela 2ª lei de Newton sabe-se que $m \frac{d^2 y}{dt^2} = -Ky$. Para oscilações de pequena amplitude o movimento é hamónico simples, i.e, $y(t) = A \cos(\omega t + \varphi)$, com $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$ e φ a fase inicial. (Confirme que esta expressão verifica a equação do movimento).

Atendendo a que a ODE é de 2ª ordem, e como já foi anteriormente apresentado, o método de Euler permite escrever:

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

Então, para o sistema massa-mola (OHS), estas equações podem escrever-se como:

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



Recorde também que a energia total do sistema massa mola, no instante t_k , se pode escrever como:

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

Então, num instante posterior t_{k+1} a energia pode escrever-se como:

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

$E_{k+1}^{total} > E_k^{total}$ A energia total, que se devia conservar, aumenta em todas as iterações!



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

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

No caso do OHS, fica,

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

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 geral para tentar conseguir a estabilidade é usar o método de Euler Implícito:

MÉTODO de EULER - IMPLÍCITO

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

Ou o método dos trapézios, conhecido como método de Crank-Nicolson:

MÉTODO de CRANK-NICOLSON

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



Métodos IMPLÍCITOS

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 iteração.

Ordem dos Métodos Implícitos

Pode provar-se que o **erro global** do método:

- de **Euler-Implícito** é de ordem h ;
- de **Crank-Nicolson** é de ordem h^2 .



Aplicação do método de Euler Implícito ao OHS

Atendendo a que a ODE é de 2ª ordem, vamos obter um sistema de duas ODEs de 1ª ordem. (*Note que: a 1ª integração dá-nos a velocidade, e a 2ª integração dá-nos a posição*). Aplicando método de Euler Implícito ao sistema de equações, obtém-se,

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

Ou seja,

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

Este sistema pode ser resolvido numericamente nesta forma? Porquê?



Aplicação do método de Euler Implícito ao OHS

Se substituirmos a 1ª expressão na 2ª, e resolvermos em ordem a y_{k+1} , obtém-se o seguinte sistema:

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

Este sistema de equações já pode ser programado!

(Exercício: resolva o mesmo problema em ordem a v_{k+1})

O sistema pode ser resolvido usando-se uma função intrínseca do MATLAB, a rotina **LINSOLVE**. Para tal há que escrever o sistema de forma adequada (Escreva *help linsolve* na linha de comando do MATLAB).



Aplicação do método de Euler Implícito ao OHS

Reescrevemos o sistema isolando à *esquerda* os termos com índice $k+1$ e à *direita* os termos com índice k bem como os termos independentes (se for o caso):

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

Este sistema pode ser escrito em notação matricial,

$$AZ = b$$

Onde A é a matriz do sistema, e é uma matriz constante no exemplo presente,

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

Z é o vetor que queremos calcular (a solução do sistema), e b um vetor de termos independentes que varia de iteração para iteração,

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



Aplicação do método de Crank-Nicolson ao OHS

Relembrando que no exemplo considerado, o OHS, a ODE é de 2ª ordem, pelo vamos obter um sistema de duas ODEs de 1ª ordem, vamos aplicar o método de Crank-Nicolson ao OHS.

Obtém-se neste caso,

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k + [f(t_k, y_k) + f(t_{k+1}, y_{k+1})] * \frac{h}{2} \\ y_{k+1} = y_k + (v_k + v_{k+1}) * \frac{h}{2} \end{cases}$$

Substituindo a função f e trocando a ordem das equações, obtém-se,

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



Aplicação do método de Crank-Nicolson ao OHS

Tal com se referiu, o sistema pode ser resolvido em MATLAB, com a função **LINSOLVE**. Há que escrever o sistema de forma adequada!

Na forma matricial, tem-se:

$$AZ = b$$

Isolando à esquerda os termos de índice $k+1$ e à direita os termos de índice k , obtém-se:

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



Assim, a matriz constante A é dada por

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

Enquanto que o vetor \mathbf{Z} , a solução do sistema que queremos calcular, e o vetor \mathbf{b} , de termos independentes que varia de iteração para iteração, são dados por,

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

OBS1: \mathbf{b} depende da solução da iteração anterior, já conhecida na presente iteração.

OBS2: Os procedimentos que foram usados na aplicação destes dois métodos implícitos ao OHS, deixam, em geral de ser exequíveis quando a equação diferencial **não é linear**. Uma abordagem diferente será necessária nesses casos.

