CÁLCULO NUMÉRICO E COMPUTACIONAL

AULAS de 03, 10 e 17 FEV 2014
(versão revisada)

1. Ementa e Avaliações
2. Atividades em sala: Laptops e Calculadoras
3. Software: MATLAB ou SciLab

Simulação e rotinas numéricas (mecânica, eletricidade, fluidos, poluição, otimização, etcetcetc)

IMPORTANTE saber o estado da arte: quase ninguém programa, hoje em dia, métodos numéricos de uso geral.

PRIMEIRO ASSUNTO: Representação numérica em máquinas digitais

1. Truncamento e arredondamento
2. Valores máximos e mínimos (MATLAB R2007b 32 bits)

Data Type	Range of Values	Conversion Function
Signed 8-bit integer	-2^7 to 2^7-1	int8
Signed 16-bit integer	-2^{15} to $2^{15}-1$	int16
Signed 32-bit integer	-2^{31} to $2^{31}-1$	int32
Signed 64-bit integer	-2^{63} to $2^{63}-1$	int64
Unsigned 8-bit integer	0 to 2^8-1	uint8
Unsigned 16-bit integer	0 to $2^{16}-1$	uint16
Unsigned 32-bit integer	0 to $2^{32}-1$	uint32
Unsigned 64-bit integer	0 to $2^{64}-1$	uint64

The range for single is:
-3.40282e+038 to -1.17549e-038 and
1.17549e-038 to 3.40282e+038
The range for double is:
-1.79769e+308 to -2.22507e-308 and
2.22507e-308 to 1.79769e+308

*** Encontrando a "precisão" da máquina em tempo real ***

Arquivo "finding_eps_01.m":

```
eps = 1;
while 1 ~= (1+eps)
  eps = eps/2;
end
eps
```

```
>> finding_eps_01
eps =
   1.110223024625157e-016
>>
```

NOTE que isso é aproximadamente 1 parte em 10^{16} !!!
Para comparação, em 1 metro cabem cerca de 10^{10} átomos.
Portanto, em situações normais e com uso adequado, o erro de arredondamento é muito pequeno.

EXERCÍCIO 1: Reescreva o programinha acima para saber quantas vezes o MATLAB dividiu por 2 a quantidade inicial.

CASO CRÍTICO: subtrair quantidades muito próximas (perda de significativos)

Exemplo: 2.34583 – 2.34576 = 0.00007 (os dados tem 6 significativos e a resposta apenas 1)

Exemplo: resolver $x^2 - 3x + 0.1 = 0$

Procedimento comum: usando $\dfrac{-b \pm \sqrt{b^2-4ac}}{2a}$:

$$\sqrt{b^2-4ac} = \sqrt{9-4\times 0.1} = 2.933$$
$$x_1 = \frac{3+2.933}{2} = 2.9665$$
$$x_2 = \frac{3-2.933}{2} = 0.0335$$

Procedimento adequado: Encontre x_1 como acima, mas use o fato de que o produto das raízes é 0.1 :

$$x_2 = \frac{0.1}{2.9665} = 0.03371$$

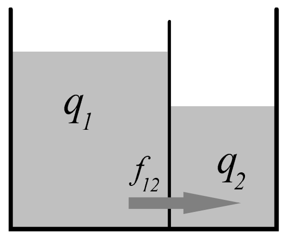
EXERCÍCIO 2: Resolva $x^2 - 2x + 0.02 = 0$ de um modo numericamente aceitável. *(respostas com três significativos)*

SEGUNDO ASSUNTO: ESTABILIDADE NUMÉRICA

Acontece quando o modelo numérico do problema real tem soluções não físicas, ou então quando o esquema numérico causa erros de truncamento e arredondamento que crescem desenfreadamente ao longo de um cálculo repetitivo. É comum estas duas coisas acontecerem ao mesmo tempo.

Exemplo de simulação

Considere dois reservatórios separados por uma parede. Através dessa parede, há um dispositivo que permite o fluxo de líquido entre os reservatórios.



Sejam $\begin{cases} q_1^n \\ q_2^n \end{cases}$ as quantidades de líquido nos reservatórios 1 e 2 no instante n.

Seja f_{12} a quantidade de líquido que atravessa a parede entre os reservatórios, entre os instantes n e $(n+1)$. $\begin{cases} f_{12} > 0 \Rightarrow \text{ o fluxo é no sentido de 1 para 2} \\ f_{12} < 0 \Rightarrow \text{ o fluxo é no sentido de 2 para 1} \end{cases}$

Os reservatórios só trocam líquido entre eles.

A quantidade de líquido em cada reservatório, no próximo instante, será $\begin{cases} q_1^{n+1} = q_1^n - f_{12} \\ q_2^{n+1} = q_2^n + f_{12} \end{cases}$.

f_{12} modela o dispositivo que controla o fluxo de liquido pela parede. Vamos supor um tipo de bomba passiva, onde o fluxo depende apenas da diferença na quantidade de liquido entre os reservatórios:

$$f_{12} = \alpha(q_1 - q_2)$$

Vamos supor $\alpha > 0$, de modo que o liquido passa do reservatório mais abastecido para o mais vazio.

Nossas equações ficam assim: $\begin{cases} q_1^{n+1} = q_1^n - \alpha(q_1 - q_2) \\ q_2^{n+1} = q_2^n + \alpha(q_1 - q_2) \end{cases}$

Agora precisamos decidir em que instante as quantidades q_1 e q_2 se referem, uma vez que estamos construindo um modelo discreto, isto é, considerando os valores das quantidades apenas em certos instantes de tempo. Na nossa definição de f_{12}, computamos a quantidade total de liquido que passa entre os reservatórios durante os instantes n e $(n+1)$. Quanto menor esse intervalo de tempo, menor deve ser o valor de α. O valor de α também deve considerar a facilidade com que o líquido escoa pelo dispositivo na parede.

Antes de prosseguir, vamos escrever explicitamente que a quantidade de liquido total nos dois reservatórios deve permanecer constante, e a quantidade de liquido em cada reservatório não pode ser negativa:

em qualquer etapa n, devemos ter $\begin{cases} q_1^n + q_2^n = Q \\ q_1^n \geq 0 \;\text{ e }\; q_2^n \geq 0 \end{cases}$ (condições de continuidade física)

Opção 1: calcular f_{12} usando os valores de q_1 e q_2 no instante n.

Fazendo isso, obtemos uma relação de recorrência $\begin{cases} q_1^{n+1} = (1-\alpha)q_1^n + \alpha q_2^n \\ q_2^{n+1} = (1-\alpha)q_2^n + \alpha q_1^n \end{cases}$. Sabendo qual o nível inicial de líquido, é fácil usar essas relações para calcular os níveis de líquido no próximo instante.

Essa formulação é chamada de método explícito, e fica elegante quando escrito na forma matricial:

$$Q^{n+1} = A.Q^n$$

onde $Q^n = \begin{pmatrix} q_1^n \\ q_2^n \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \alpha & 1-\alpha \end{pmatrix}$

O problema é que isso só funciona bem para pequenos valores de α. No Apêndice, mostramos que, para $\alpha > 1$, não é possível satisfazer a condição de continuidade física em cada etapa da simulação. Além disso, para $\alpha > 1$ esses cálculos explícitos amplificam possíveis erros ou incertezas nos valores de q.

Esse método explícito é <u>numericamente instável</u> para $\alpha \geq 1$.

Opção 2: calcular f_{12} usando os valores de q_1 e q_2 no instante $(n+1)$.

Fazendo isso, obtemos um sistema linear para os novos valores de q $\begin{cases} (1+\alpha)q_1^{n+1} - \alpha q_2^{n+1} = q_1^n \\ -\alpha q_1^{n+1} + (1+\alpha)q_2^{n+1} = q_2^n \end{cases}$. Sabendo qual o nível inicial de líquido, precisamos resolver esse sistema para obter os níveis de líquido no próximo instante.

Essa formulação é chamada de método implícito, e fica melhor quando escrito na forma matricial:

$$A.Q^{n+1} = Q^n$$

onde $Q^n = \begin{pmatrix} q_1^n \\ q_2^n \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 1+\alpha & -\alpha \\ -\alpha & 1+\alpha \end{pmatrix}$

Uma maneira de resolver esse sistema é invertendo a matriz A:

$$Q^{n+1} = A^{-1}.Q^{n}$$

Essa inversão é feita uma única vez, e a partir daí o trabalho é o mesmo que com o método explícito.

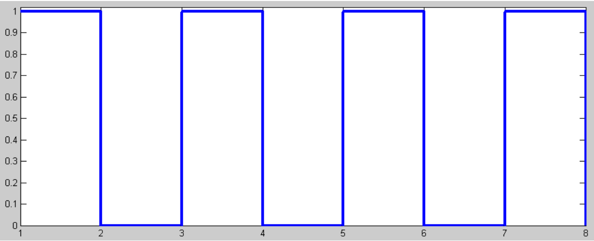
A vantagem desse método é que ele permite satisfazer as condições de continuidade física para qualquer valor de α, e além disso não amplifica possíveis erros ou incertezas nos valores de q.

Esse método implícito é incondicionalmente estável para qualquer valor de α . Infelizmente, isso não significa que a solução correta é obtida sempre. Para isso, é preciso ainda outra condição (chamada de consistência) que estabeleça o significado físico correto das equações numéricas. E é também preciso que se escolha os parâmetros de simulação de modo que o processo numérico seja uma aproximação aceitável do processo físico que se está representando.

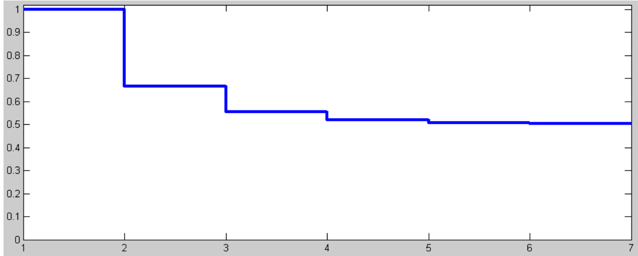
EXERCÍCIO 5: Utilize o MATLAB ou o SCILAB para implementar a simulação acima, para a condição inicial $Q^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e para α = 0, 1, 0.5, 0.2, 1.5 e 2.0. Compare os resultados dos métodos explícito e implícito. Apresente suas respostas na forma de gráficos. Verifique durante a simulação se a quantidade total de líquido nos reservatórios permanece constante (como deve ser!).

```
% CONFERINDO: PARA α = 0,
% OS RESERVATÓRIOS PERMENECEM ISOLADOS
        >> alfa = 0
        >> A = [1-alfa alfa; alfa 1-alfa]
        A =
           1    0
           0    1
        >> B = [1+alfa -alfa; -alfa 1+alfa]
        B =
           1    0
           0    1
        >> Q = [1;0]
        Q =
           1
           0
        >> Q = A*Q
        Q =
           1
           0
        >> Q = B\Q
        Q =
           1
           0
```

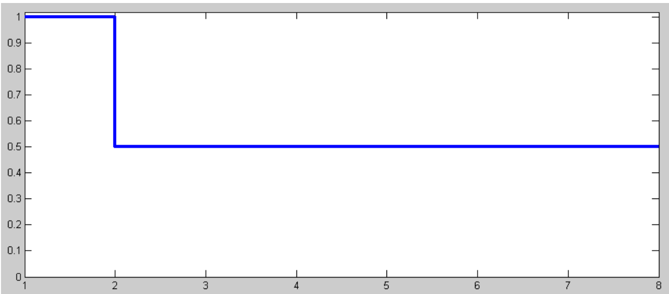
```
>> PARA α = 1
        >> alfa = 1
        >> A = [1-alfa alfa; alfa 1-alfa]
        A =
           0    1
           1    0
        >> Q = [1;0]
        Q =
           1
           0
        >> P = [Q(1)]
        P =
           1
        >> Q = A*Q
        Q =
           0
           1
        >> P = [P Q(1)]
        P =
           1    0
        >> Q = A*Q
        Q =
           1
           0
        >> P = [P Q(1)]
        P =
           1    0    1
        >> Q = A*Q
        Q =
           0
           1
        >> P = [P Q(1)]
        P =
           1    0    1    0
        >> stairs(P)
        >> sum(Q)
        ans =
          1.000000000000000
        >>
```



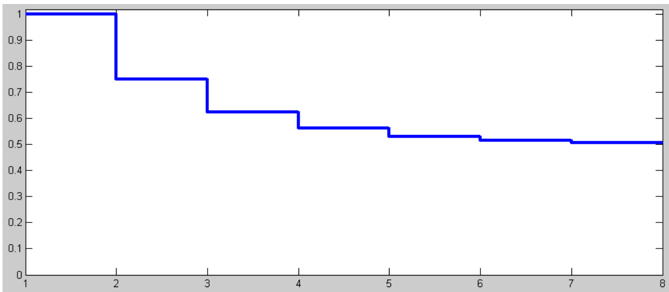
Explícito, α = 1. O resultado mostra a passagem instantânea de todo o líquido de um reservatório para o outro. Um resultado não físico! Isto ocorre porque estamos utilizando um passo de tempo muito grande. Na verdade, essa solução está de acordo com as equações que utilizamos, uma vez que para α = 1 escrevemos que todo fluido de um reservatório passa instantaneamente para o outro.



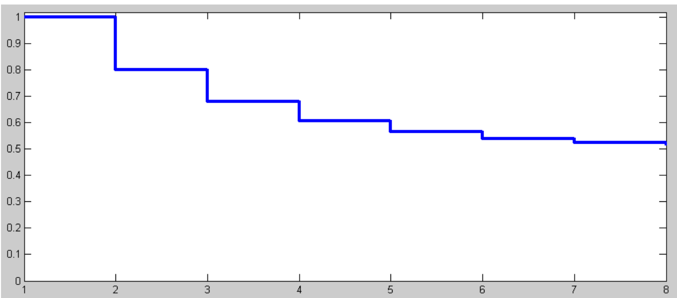
Implícito, α = 1. O resultado mostra a passagem gradativa de líquido do reservatório cheio para o mais vazio. É como se o método implícito compensasse o fato de estarmos usando um passo de tempo muito grande. Isto não prova que o resultado é o que vamos observa na realidade – mas é o que se espera se observássemos os reservatórios em intervalos de tempo bem pequenos.



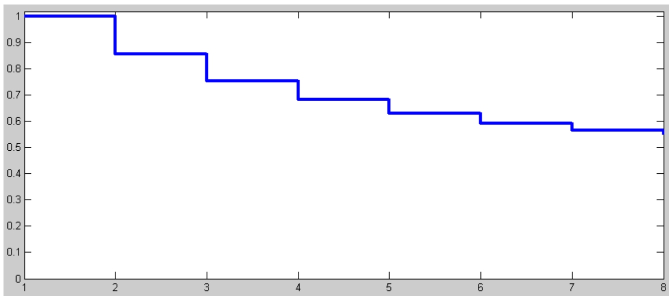
Explícito, α = 0.5. O equilíbrio é atingido logo no primeiro passo (!). Um resultado não físico? Talvez o passo de tempo esteja muito grande. Na verdade, essa solução está de acordo com as equações que utilizamos, uma vez que para α = 0.5 metade do reservatório cheio passa para o vazio.



Implícito, α = 0.5. O resultado mostra a passagem gradativa de líquido do reservatório cheio para o mais vazio, como se espera no caso real. Novamente, isto não prova que o resultado matemático corresponde ao que é observado na realidade – mas é o que se espera se observássemos os reservatórios em intervalos de tempo bem pequenos.

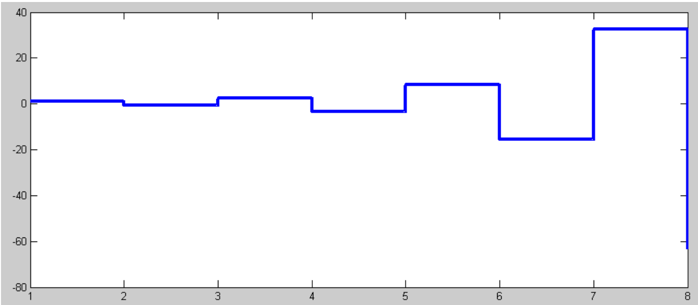


Explícito, α = 0.2. A resposta converge adequadamente para o equilíbrio (quantidades iguais nos dois reservatórios).

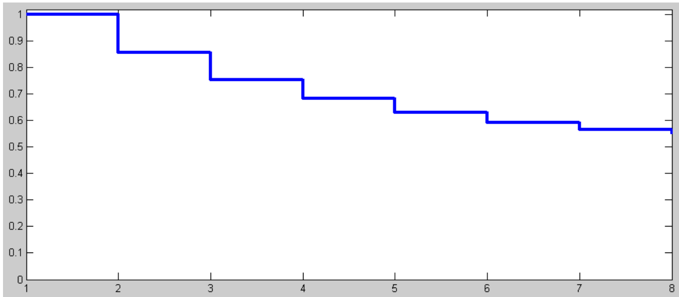


Implícito, α = 0.2. A resposta converge mais demoradamente para o equilíbrio (quantidades iguais nos dois reservatórios).

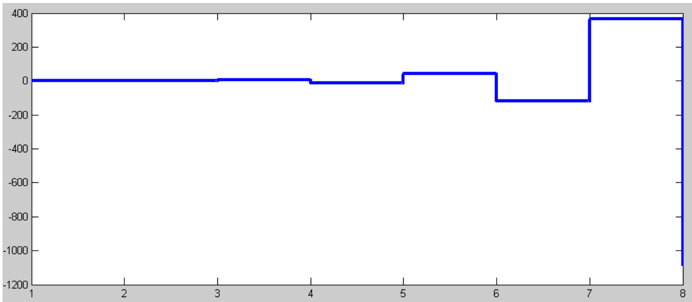
NA PRÁTICA, FAZEMOS AS SIMULAÇÕES COM INTERVALOS DE TEMPO CADA VEZ MENORES, OBSERVADO SE HÁ CONVERGÊNCIA.



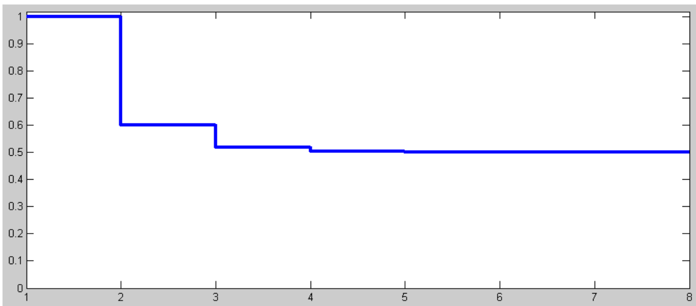
Explícito, α = 1.5. A resposta está completamente “doida”, devido à instabilidade numérica. Obtemos quantidades negativas de líquido! A soma algébrica das quantidades nos dois reservatórios se mantém constante = 1. Matemática perfeita, mas a solução é fisicamente inaceitável.



Implícito, α = 1.5. A resposta converge adequadamente para o equilíbrio. A estabilidade numérica produz uma solução aceitável fisicamente.



Explícito, α = 2. Resposta “maluca”, típica de instabilidade numérica. A quantidade de líquido está aumentando sempre (explosão exponencial!).



Implícito, α = 2.0. A resposta converge adequadamente para o equilíbrio. A quantidade total de líquido se mantém constante durante a simulação.

<u>APÊNDICE</u>

Análise de estabilidade dos esquemas implícito e explicito

No método explícito, trabalhamos com a relação de recorrência $a^{n+1} = (1-\alpha)a^n + \alpha b^n$.

(estamos simplificando a notação - chamamos q_1 de a e q_2 de b)

Sendo $b_n = Q - a_n$, ficamos com:

$$a_{n+1} = (1-2\alpha)a_n + \alpha Q \qquad (1)$$

A solução dessa relação de recorrência é

$$a_n = A.r^n + B \qquad (2)$$

onde A , B e r são três constantes

Fisicamente, esperamos que os valores de a_n estabilizem, isto é, $\lim_{n\to\infty}(a_n) = Q/2$ (quando o equilíbrio for atingido, restará metade do liquido total em cada reservatório). Mas para que isso aconteça, é necessário que $-1 < r < +1$.

O valor de r pode ser encontrado substituindo a fórmula para a_n (2) na relação de recorrência (1).

Encontramos $r = 1 - 2\alpha$, e assim,

$$a_n = A.(1-2\alpha)^n + Q/2$$

Ora, a condição $-1 < r < +1$ exige que $0 < \alpha < 1$. Esta é a condição de estabilidade do método explícito.

A mesma condição é exigida para que eventuais truncamentos, arredondamentos e incertezas não aumentem durante os cálculos. Vamos supor que os valores de q, no instante n, tenham uma incerteza ε, isto é, $\begin{cases} q_1^n = \bar{q}_1^n \pm \varepsilon \\ q_2^n = \bar{q}_2^n \pm \varepsilon \end{cases}$.

EXERCÍCIO 3: Mostre que, usando as equações do método explícito, a incerteza nos valores de q no instante $(n+1)$ será $(1-2\alpha)\varepsilon$.

Ora, após n passos, a incerteza será $(1-2\alpha)^n.\varepsilon$. Essa incerteza vai crescer exponencialmente, a não ser que $0<\alpha<1$. O método explícito será <u>numericamente instável</u> para $\alpha \geq 1$.

Já no método implícito, a relação de recorrência tem a forma:

$$(1+2\alpha)a_{n+1} = a_n + \alpha Q$$

Usando a mesma técnica acima, descobrimos que a solução é

$$a_n = \frac{A}{(1+2\alpha)^n} + Q/2$$

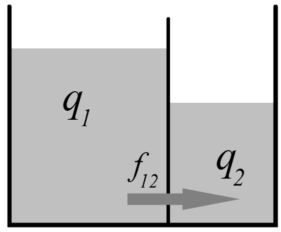
Portanto os valores de a_n estabilizam para qualquer valor de $\alpha > 0$.

O método implícito será <u>incondicionalmente estável</u> para qualquer valor de α .

EXERCÍCIO 4: Mostre que, usando as equações do método implícito, a incerteza nos valores de q no instante $(n+1)$ será igual à incerteza no instante n, ou seja, ε, ou seja, a incerteza nos valores calculados se mantém constante ao longo dos passos.

MODELOS DISCRETOS E MODELOS CONTÍNUOS

Vamos agora tornar nosso modelo dos reservatórios contínuo no tempo. Ao invés de escrevermos o que deve acontecer entre um instante de tempo e outro, vamos estabelecer a evolução temporal do conteúdo dos reservatórios utilizando cálculo diferencial.



Para isso, vamos explicitar a dependência da vazão e das quantidades q1 e q2 com o tempo.

No modelo discreto, tínhamos escrito que $\begin{cases} q_1^{n+1} = (1-\alpha)q_1^n + \alpha q_2^n \\ q_2^{n+1} = (1-\alpha)q_2^n + \alpha q_1^n \end{cases}$.

(não nos interessa agora a diferença entre as formulações explícita e implícita, porque vamos trabalhar com o limite de intervalos de tempo cada vez menores)

Certamente a quantidade de liquido que flui entre os reservatórios é proporcional ao intervalo de tempo decorrido entre uma etapa e outra. Então, ao invés de simplesmente escrever $f_{12} = \alpha(q_1 - q_2)$, estabelecemos que $f_{12} = (\Delta t).K.(q_1 - q_2)$, isto é, definimos $\alpha = (\Delta t).K$. Substituindo isso nas relações de recorrência, temos

$$\begin{cases} \dfrac{\Delta q_1}{\Delta t} = -K(q_1 - q_2) \\ \dfrac{\Delta q_2}{\Delta t} = K(q_1 - q_2) \end{cases} \quad \text{e, fazendo } \Delta t \to 0 \text{ ,} \quad \begin{cases} \dfrac{dq_1}{dt} = -K(q_1 - q_2) \\ \dfrac{dq_2}{dt} = K(q_1 - q_2) \end{cases}$$

Obtemos assim um sistema de equações diferenciais, a ser resolvido com as condições iniciais q_1^0 e q_2^0 (quantidades iniciais nos reservatórios).
Note que q_1 e q_2 são agora funções contínuas do tempo: $q_1 = q_1(t)$ e $q_2 = q_2(t)$.

A vantagem das equações diferenciais é que representam um modelo mais realista do processo físico ao longo do tempo. Muitas vezes, podem ser resolvidas analiticamente, como neste nosso caso. Se necessário ou conveniente, podem também ser resolvidas numericamente.

Nosso sistema pode ser resolvido facilmente se K for uma constante, da seguinte maneira:

1. Como há conservação, temos sempre $q_1 + q_2 = Q$

   Então as funções q1 e q2 são muito parecidas: q1 = Q – q2.
2. Essa equações são lineares, de primeiro grau e a coeficientes constantes, de modo que a teoria fornece de imediato a forma da solução:

   $q_1(t) = Ae^{-at} + B$
3. Quando o equilíbrio for atingido ($t \to \infty$), as quantidades nos reservatórios serão iguais. Portanto, B = Q/2.

   $q_1(t) = Ae^{-at} + Q/2$
4. Substituindo tudo isso na primeira equação diferencial, descobrimos que $a = -2K$.

   $q_1(t) = Ae^{-2Kt} + Q/2$

5. Finalmente, para tornas as equações mais simpáticas e já incluir as condições iniciais, considere o totla e a diferença inicial de líquido nos reservatórios, $\begin{cases} Q = q_1^0 + q_2^0 \\ D = q_1^0 - q_2^0 \end{cases}$. Com isso, escrevemos a solução do problema como

$$\begin{cases} q_1(t) = \dfrac{Q}{2} + \dfrac{D}{2} e^{-2Kt} \\ q_2(t) = \dfrac{Q}{2} - \dfrac{D}{2} e^{-2Kt} \end{cases}$$

Vamos agora comparar as soluções dos modelos discreto e contínuo. Esperamos que as soluções do modelo discreto (aproximado) convirjam para a solução exata (modelo continuo) à medida em que usamos intervalos de tempo cada vez menores.

EXERCÍCIO 5: Suponha que os reservatórios possuam, inicialmente, as quantidades de liquido $q_1^0 = 3$ e $q_2^0 = 1$.

(a) Calibre o modelo, de modo que a vazão f_{12} seja de um litro por minuto quando a diferença entre q_1 e q_2 for de um litro.

Resolução: A vazão por intervalo de tempo é $\dfrac{f_{12}}{\Delta t} = K(q_1 - q_2)$. Escolha o valor de K de modo a atender ao que foi pedido. Teremos $K = \dfrac{1}{60} s^{-1}$, se decidirmos medir os intervalos de tempo em segundos.

(b) Escreva a solução analítica

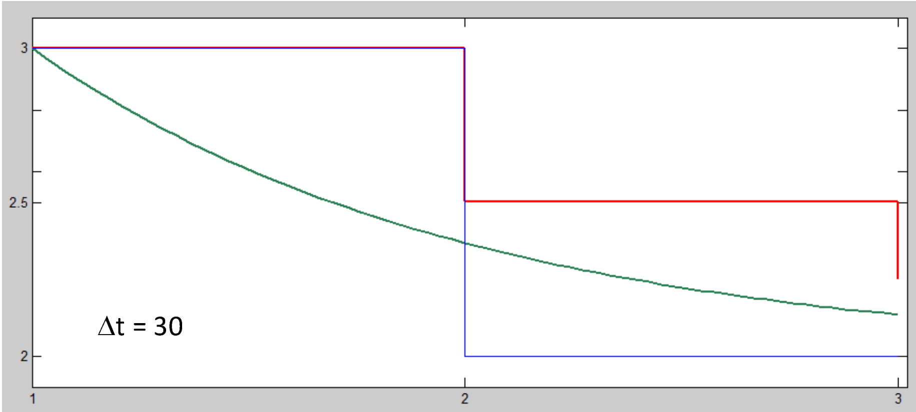
Resposta: $\begin{cases} q_1(t) = 2 + e^{-t/30} \\ q_2(t) = 2 - e^{-t/30} \end{cases}$ *(segundos, litros)*

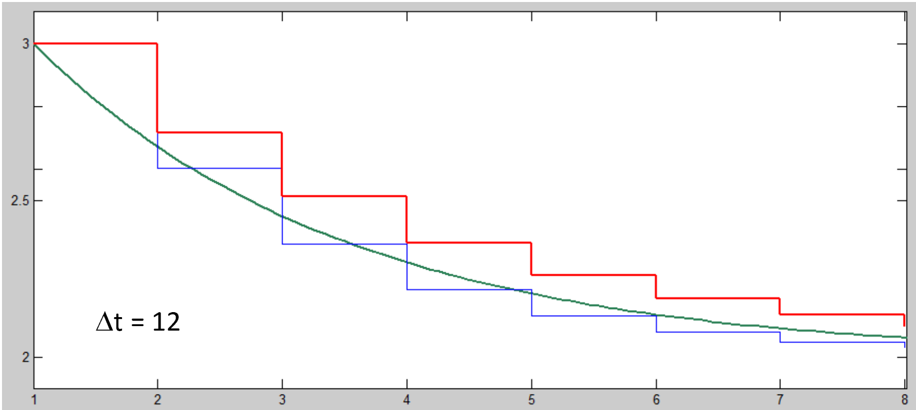
(c) Qual o tempo esperado para que se atinja o equilíbrio? (utilize o critério 3τ)

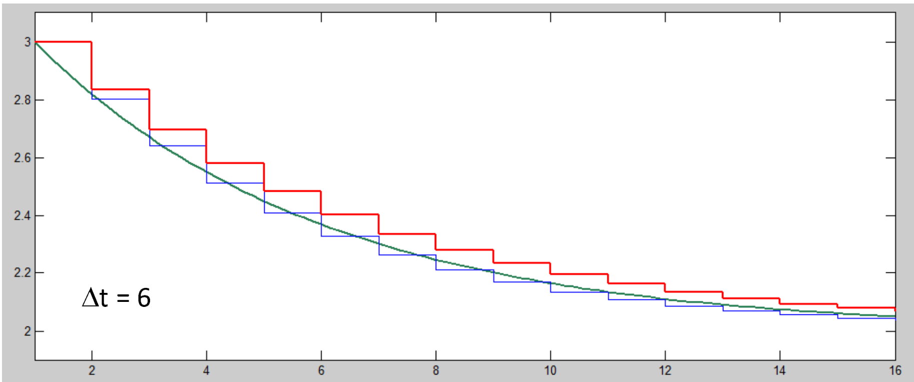
(d) Rode os modelos discretos (explícito e implícito) no MATLAB para valores cada vez menores de Δt, e compare cada solução obtida com a solução analítica. Utilize os parâmetros abaixo nas suas simulações:

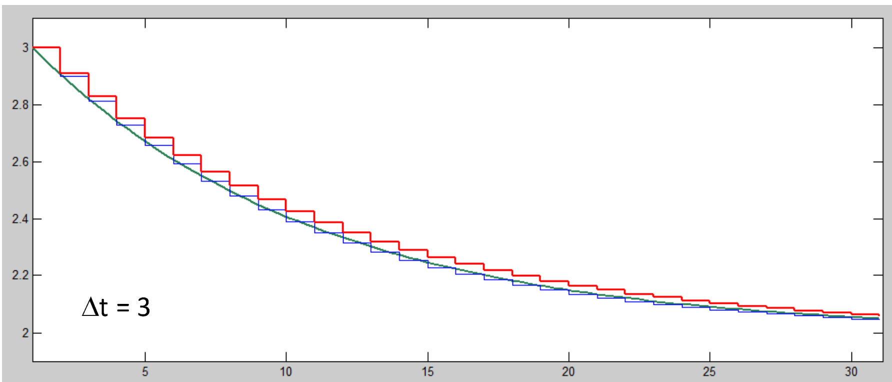
rodada	Δt (s)	α	número de passos até 90s
1	30	0,5	3
2	12	0,2	8
3	6	0,1	15
4	3	0,05	30

```
clear all
x=linspace(0,90,100);
y=2+exp(-1*x/30);
dt=3
t=x/dt + 1;
plot(t,y)
hold
alfa=0.05
A=[1-alfa alfa; alfa 1-alfa]
Q=[3;1]
P=[Q(1)]
Q=A*Q
P=[P Q(1)]
Q=A*Q
P=[P Q(1)]
.
.
.
Q=A*Q
P=[P Q(1)]
stairs(P)
B=[1+alfa -alfa; -alfa 1+alfa]
Q=[3;1]
P=[Q(1)]
Q=B\Q
P=[P Q(1)]
Q=B\Q
P=[P Q(1)]
Q=B\Q
.
.
.
P=[P Q(1)]
Q=B\Q
P=[P Q(1)]
stairs(P)
```









analítico
explícito
implícito