

Métodos Numéricos e Simulação

João Miranda Lemos
jlm1@inesc-id.pt

Instituto Superior Técnico

2021

Bibliografia

- [H2015] I. H. Hutchinson. *A Student's Guide to Numerical Methods*. Cambridge University Press, 2015.
- [B1978] M. Braun. *Differential Equations and Their Applications*. 2^a ed., Springer-Verlag, 1978.

Integração numérica de equações diferenciais ordinárias

O método de Euler (1)

Aproximar a equação diferencial ordinária (ODE)

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

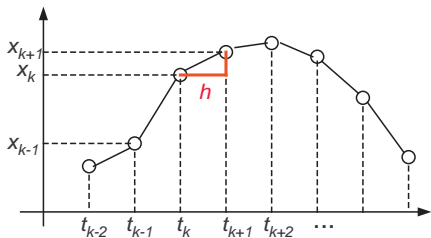
por uma equação de diferenças que possa ser iterada.

Aproximação da derivada

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{x_{k+1} - x_k}{h}$$

Resulta

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{h} \approx f(x, t)$$



Escolhemos $x = x_k$ e $t = t_k$

$$x_{k+1} = x_k + f(x_k, t_k)h$$

O método de Euler (2)

$$x_{k+1} = x_k + f(x_k, t_k)h$$

Diz-se um método **explícito** dado que permite calcular explicitamente x_{k+1} a partir dos valores conhecidos no instante k .

Tem problemas de **precisão** (dispersão do erro elevada) e de **estabilidade** (o erro pode não convergir para zero).

Pseudocódigo

```
x(0)=valor dado
for k=1:kfinal
    x(k+1)=x(k)+f(x(k),t(k))*h
    t(k+1)=t(k)+h
end
```

Precisão do método de Euler (1)

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

Expansão em série de Taylor do campo de vetores F em torno de x_k, t_k .

Seja $\delta t = t - t_k$ e $\delta x = x - x_k$.

O campo f é uma função de t e de x . Mas como $x = x(t)$, a função $f(x(t), t)$ é apenas uma função de t , e podemos considerar a sua derivada total $\frac{df}{dt}$.

Expansão em série de Taylor de $f(x(t), t)$

$$f(x(t), t) = f(x_k, t_k) + \frac{df_k}{dt} \delta t + \frac{d^2 f_k}{dt^2} \frac{\delta t^2}{2!} + O(\delta t^3)$$

Precisão do método de Euler (2)

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

$$f(x(t), t) = f_k + \frac{df_k}{dt} \delta t + \frac{d^2 f_k}{dt^2} \frac{\delta t^2}{2!} + O(\delta t^3)$$

Integrando a equação diferencial entre t_k e t

$$\int_{t_k}^t \frac{dx}{d\tau} d\tau = \int_{t_k}^t f(x, \tau) d\tau \quad \text{mas} \quad \int_{t_k}^t \frac{dx}{d\tau} d\tau = x(t) - x(t_k) = \delta x$$

$$\int_{t_k}^t f(x, \tau) d\tau = \int_{t_k}^t \left[f_k + \frac{df_k}{d\tau} \delta \tau + \frac{d^2 f_k}{d\tau^2} \frac{\delta \tau^2}{2!} + O(\delta \tau^3) \right] d\tau$$

Precisão do método de Euler (3)

$$\delta x = \int_{t_k}^t \left[f_k + \frac{df_k}{d\tau} \delta\tau + \frac{d^2 f_k}{d\tau^2} \frac{\delta\tau^2}{2!} + O(\delta\tau^3) \right] d\tau$$

$$\delta x = f_k \delta t + \frac{df_k}{dt} \frac{(\delta t)^2}{2!} + \frac{d^2 f_k}{dt^2} \frac{(\delta t)^3}{3!} + O((\delta t)^4)$$

De acordo com o método de Euler

$$\delta x^{(1)} = f_k \delta t$$

$$\delta x - f_k \delta t = \frac{df_k}{dt} \frac{(\delta t)^2}{2!} + \frac{d^2 f_k}{dt^2} \frac{(\delta t)^3}{3!} + O((\delta t)^4)$$

Conclusão: o método de Euler só aproxima os termos de 1ª ordem em δt .

Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta podem ser interpretados como usando um valor médio da derivada ao longo do intervalo de integração. O método seguinte dá um erro dá origem a um erro que é inferior a uma constante vezes h^4 . É definido pelas equações

$$x_{k+1} = x_k + \frac{h}{6} [L_{k,1} + 2L_{k,2} + 2L_{k,3} + L_{k,4}]$$

em que

$$L_{k,1} = f(x_k, t_k) \quad L_{k,2} = f\left(x_k + \frac{1}{2}hL_{k,1}, t_k + \frac{1}{2}h\right)$$

$$L_{k,3} = f\left(x_k + \frac{1}{2}hL_{k,2}, t_k + \frac{1}{2}h\right) \quad L_{k,4} = f\left(x_k + \frac{1}{2}hL_{k,3}, t_k + \frac{1}{2}h\right)$$

Estabilidade - método explícito

Um importante ponto fraco dos métodos explícitos é a estabilidade.

Considere-se a equação diferencial linear

$$\frac{dx}{dt} = -ax, \quad a > 0 \quad \text{tem por solução} \quad x(t) = x_0 e^{-at}$$

Esquema explícito de integração

$$x_{k+1} = x_k - hax_k = (1 - ah)x_k$$

Esta equação de diferenças tem por solução

$$x_k = x_0(1 - ah)^k$$

Para h pequeno, o esquema produz resultados aproximadamente certos. Mas, para $h > \frac{2}{a}$, a solução da equação de diferenças fica instável e tende para infinito (a solução exata tende para 0).

Estabilidade - método explícito

$$x_k = x_0(1 - ah)^k$$

Condição de estabilidade $|1 - ah| < 1$

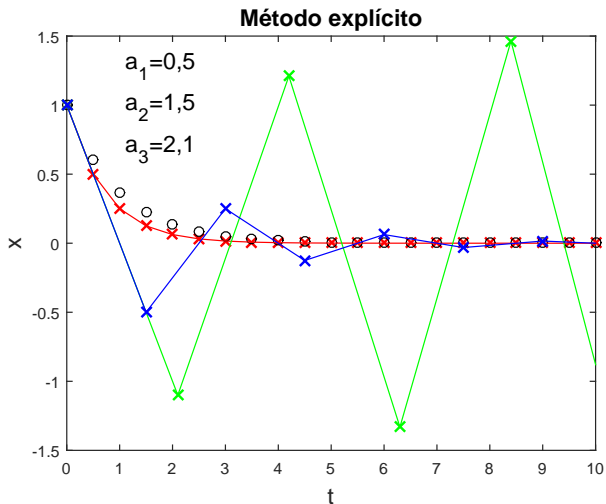
$$1 - ah < 1 \quad \text{e} \quad ah - 1 < 1$$

$$-ah < 0 \quad \text{e} \quad ah < 2$$

$$h > 0 \quad \text{e} \quad h < \frac{2}{a}$$

O intervalo de discretização tem de ser suficientemente pequeno em comparação com a constante de tempo $\frac{1}{a}$

Estabilidade - método explícito



Estabilidade - métodos implícitos

No método **implícito**, a derivada é calculada no **final** do intervalo de discretização.

$$x_{k+1} = x_k + f(x_{k+1}, t_{k+1})h$$

No exemplo simples $\frac{dx}{dt} = -ax$ é

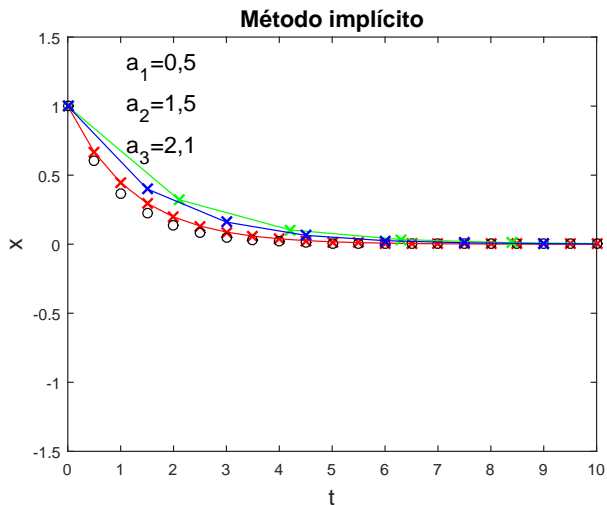
$$x_{k+1} = x_k - ax_{k+1}h \quad \text{ou seja } x_{k+1}(1 + ah) = x_k$$

Esta equação pode ser facilmente resolvida neste caso para obter

$$x_k = x_0(1 + ah)^{-k} \quad \text{ou} \quad x_k = x_0 \left(\frac{1}{1 + ah} \right)^k$$

Esta equação é sempre estável para $h > 0$ dado que $\frac{1}{1+ah} < 1$.

Estabilidade - métodos implícitos



Métodos explícitos versus implícitos

- Métodos explícitos

- ▶ Complexidade computacional reduzida
- ▶ Dão o estado em $k + 1$ em função do estado em k , o que os torna adequados a aproximar sistemas contínuos
- ▶ Tendem a ficar instáveis com intervalos de integração grandes

- Métodos implícitos

- ▶ Maior complexidade computacional (implicam a solução em cada passo de um sistema algébrico)
- ▶ Tendem a permanecer estáveis quando o intervalo de integração aumenta

Sistemas de equações *stiff*

Os sistemas de ODEs lineares *stiff* são sistemas em que os valores próprios máximo e mínimo (em valor absoluto) são **muito diferentes**.

Pode também ter-se um conceito de sistema *stiff* para sistemas não lineares utilizando a linearização em torno do estado corrente.

Exemplo de um sistema *stiff*

$$\frac{dx}{dt} = Ax \quad \text{com} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 100 & -101 \end{bmatrix}$$

Os valores próprios são $\lambda_1 = -100$ (mais rápido) e $\lambda_2 = -1$ (muito mais lento).

Sistema *stiff* – estabilidade do método implícito

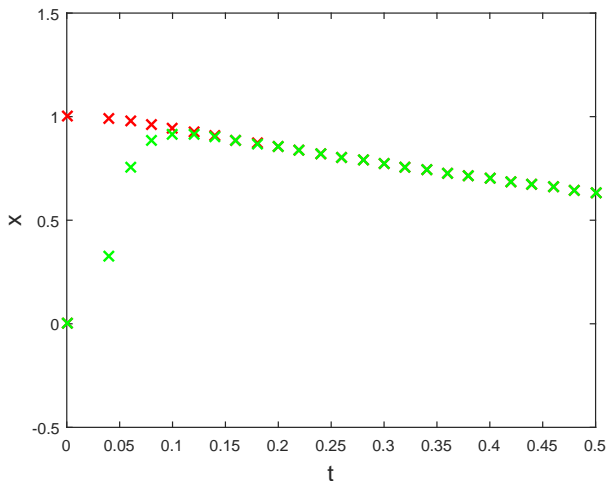
Se for usado um esquema explícito, as condições de estabilidade são

$$h < \frac{2}{|\lambda_1|} = 0.02 \quad \text{e} \quad h < \frac{2}{|\lambda_2|} = 2$$

Se usarmos um esquema explícito, há pelo menos $< \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_2|} = 100$ passos durante o decaimento do termo associado a λ_2 , o que implica uma carga computacional elevada.

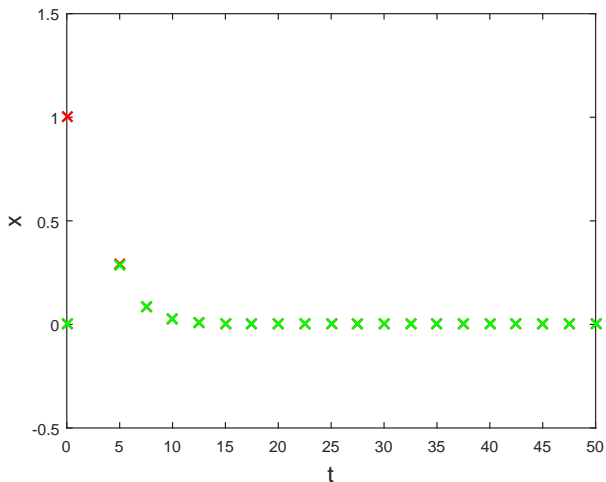
O método implícito implica a inversão de uma matriz, mas isso é largamente compensado com a possibilidade de usar passos de integração mais elevados.

Sistema *stiff* – duas escalas de tempo



Sistema *stiff* – estabilidade do método implícito

Aumentando o passo para um valor em que a escala mais rápida é instável com o método de Euler, o método implícito continua estável.



Solução por diferenças finitas de uma equação às derivadas parciais

Aproximação da derivada por diferenças centrais

Função $g(x)$

Primeira derivada

$$\frac{\partial g}{\partial x} \approx \frac{g(x+h) - g(x-h)}{2h}$$

Segunda derivada

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} \approx \frac{g(x+2h) + g(x-2h) - 2g(x)}{4h^2}$$

Problema de Cauchy

Considere-se um fio com comprimento 10, alinhado com o eixo dos x entre $x = 0$ e $x = 10$.

Seja $u(x, t)$ a temperatura no ponto x , no instante t .

Condição inicial

$$u(x, 0) = 10 \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{10}\right), \quad 0 \leq x \leq 10$$

Calcular a evolução da temperatura em cada ponto do fio ao longo do tempo.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(x, 0) = 10 \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{10}\right) \\ 0 \leq x \leq 10 \end{array} \right.$$

Aproximação por diferenças finitas

Incremento no tempo: dt ; incremento no espaço: dx

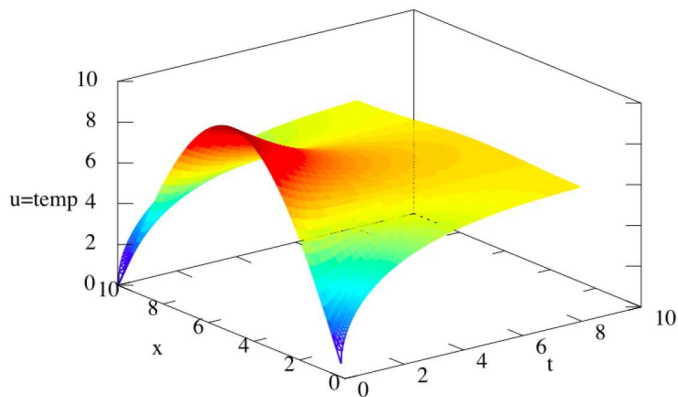
$$u(x, t + dt) = u(x, t) + \alpha \cdot dt \cdot \frac{u(x + dx, t) + u(x - dx, t) - 2u(x, t)}{dx^2}$$

Nas fronteiras $x = 0$ e $x = 10$ usam-se as aproximações

$$u(0, t + dt) = \alpha \cdot dt \cdot \frac{2u(dx, t) - 2u(0, t)}{(dx)^2}$$

$$u(10, t + dt) = u(10, t) + \alpha \cdot dt \cdot \frac{2u(10 - dx, t) - 2u(10, t)}{(dx)^2}$$

Resultado



Como funciona o SIMULINK?

Blocos com transferência direta

Alguns blocos SIMULINK têm portos de entrada com transferência direta (*direct feedthrough*). Isto significa que a sua saída é calculada de modo instantâneo a partir da entrada.

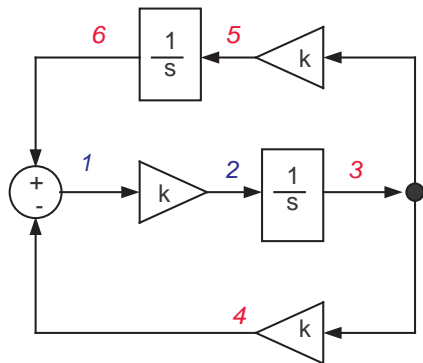
Exemplos de blocos com transferência direta:

- Função definida pelo utilizador
- Ganho
- Condição inicial do integrador
- Produto
- Modelo de estado linear com matriz $D \neq 0$
- Soma
- Função de transferência, quando o denominador e o numerador têm a mesma ordem
- Pólos/zeros, quando o denominador e o numerador têm a mesma ordem

Atualização dos valores dos blocos do SIMULINK

Atualização da saída de um bloco, de um instante de discretização para outro, feita com uma equação de diferenças associada ao método numérico escolhido (*solver*).

- Atualiza a saída dos blocos dinâmicos com a condição inicial
- Atualiza sucessivamente os blocos estáticos cujas entradas estão já definidas



Exemplo para esta figura

- Atualiza sucessivamente 3, 4, 5, 6
- Atualiza sucessivamente 1, 2

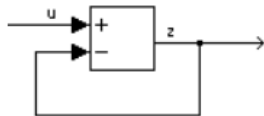
Loops algébricos

Ocorre um *loop* algébrico quando a entrada de um bloco com transferência direta é calculado a partir da saída, diretamente, ou através de uma cadeia de blocos com transferência direta.

Esta relação entre sinais significa que eles não são independentes, existindo uma relação algébrica entre eles que pode ser resolvida.

Por vezes é difícil detetar e resolver um *loop* algébrico.

Não entanto, estes **devem ser evitados** dado que retardam muito, ou impedem mesmo, a simulação.



Por exemplo, nesta situação é $z = u - z$, ou seja, $z = u/2$.

Há blocos que podem ser inseridos para quebrar um *loop* algébrico, por exemplo o bloco IC para definir condições iniciais.