Matemática Computacional

MEEC (2º ano) – 1º Semestre 2019/20

Trabalho computacional

Departamento de Matemática
Instituto Superior Técnico – Lisboa

Introdução

Pretende-se determinar o período de um pêndulo simples, dados o seu comprimento $l\,(m)$ bem como a amplitude de oscilação inicial α, com $0 \leq \alpha < \pi$ (rad). Admita que o pêndulo é largado com velocidade inicial nula. Sendo $g = 9.80665\ m/s^2$ a aceleração gravítica, o período T é dado por

$$T = 4\sqrt{l/(2\,g)}\ \int_0^{\alpha} \frac{1}{\sqrt{\cos(\theta) - \cos(\alpha)}}\, d\theta\ . \qquad (1)$$

Note-se que para $\alpha = \pi$ a função integranda em (1) não está definida e que o valor dessa função é tanto maior quanto mais próximo de π estiver o valor de α . Assim, o período de um pêndulo de comprimento l aumenta em função da oscilação inicial considerada.

Mostra-se[1] que o deslocamento angular $\theta(t)$ do pêndulo, em função do tempo t, obedece à seguinte equação diferencial não linear

$$\theta''(t) = c\,\sin(\theta(t)), \qquad t_0 \leq t \leq t_{max}, \quad \text{onde} \quad c = -\,g/l, \qquad (2)$$

considerando as condições iniciais $\theta(t_0) = \alpha \quad \text{e} \quad \theta'(t_0) = 0$.

A simulação do movimento de um pêndulo será efectuada mediante cálculo de aproximações discretas de $\theta(t)$ e de $\theta'(t)$, conforme se descreve a seguir.

Dados $t_0 = 0$ e $t_{max} > 0$, considere-se o intervalo $[t_0, t_{max}]$. Fixado um valor $h > 0$, o movimento do pêndulo será simulado para $N + 1$ 'tempos' $t_0 = 0,\ t_1 = t_0 + h,\ t_2 = t_0 + 2\,h,\ \ldots,\ t_N = t_0 + N\,h$. A partir dos

[1] Ver, por exemplo, [1] G. B. Arfken, H. J. Weber, F. E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, 7th ed., Academic Press, 2012 .

valores iniciais $z_{1,0} = \theta(t_0) = \alpha$ e $z_{2,0} = \theta'(t_0) = 0$, o deslocamento $\theta(t_j)$ e a velocidade angular $\theta'(t_j)$, no instante t_j, para $j = 1, 2, \ldots, N$, serão aproximados por pontos $Z_j = (z_{1,j}, z_{2,j})$, tais que $z_{1,j} \simeq \theta(t_j)$ e $z_{2,j} \simeq \theta'(t_j)$, mediante aplicação das fórmulas de recorrência

$$\begin{cases} z_{1,i+1} = z_{1,i} + h\, z_{2,i} + \dfrac{h^2}{2}\, c \sin(z_{1,i}) \\ z_{2,i+1} = z_{2,i} + h\, c \sin(z_{1,i}) + \dfrac{h^2}{2}\, c\; z_{2,i} \cos(z_{1,i}), \quad i = 0, 1, \ldots, \end{cases} \tag{3}$$

adiante deduzidas (ver página 5).

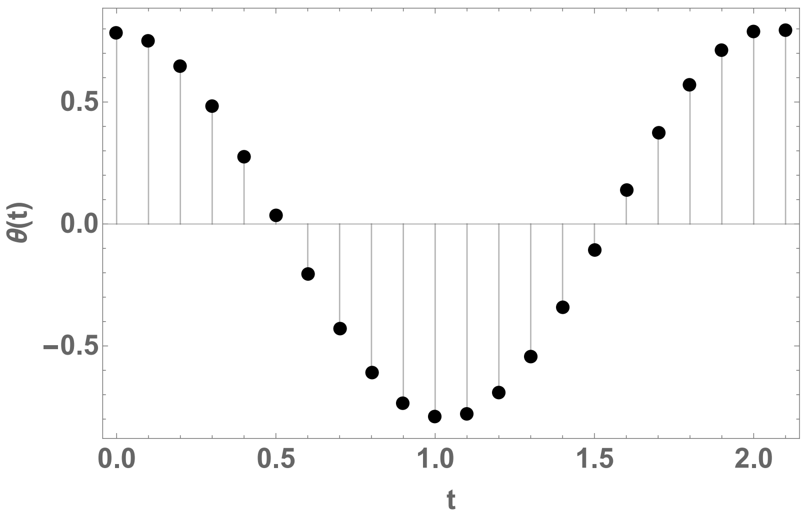

Figura 1: Pêndulo de comprimento $l = 1$ (m), amplitude inicial $\alpha = \pi/4$, passo $h = 0.1$, no intervalo $[t_0, t_{max}] = [0, 2.1]$. Aproximações do deslocamento $z_{1,j} \simeq \theta(t_j)$, para $j = 0, \ldots, 21$.

Levando em conta os valores calculados para o pêndulo do exemplo da Figura 1, concluímos que o período de tal pêndulo é aproximadamente $T \simeq 2.0$.

De forma mais sugestiva, a periodicidade de um certo pêndulo simples (ver Figura 2) manifesta-se experimentalmente através do modelo numérico (3). Para $h > 0$ suficientemente pequeno, deverá ocorrer um primeiro índice, seja k, tal que o ponto $Z_k = (z_{1,k}, z_{2,k})$, aproxima o ponto P figurado, de coordenadas $(\theta(t_0), \theta'(t_0)) = (\alpha, 0)$ – ponto este caracterizado pelas condições iniciais do problema (2)) – onde a amplitude inicial $\theta(t_0) = \alpha$ *se repete pela primeira vez.*

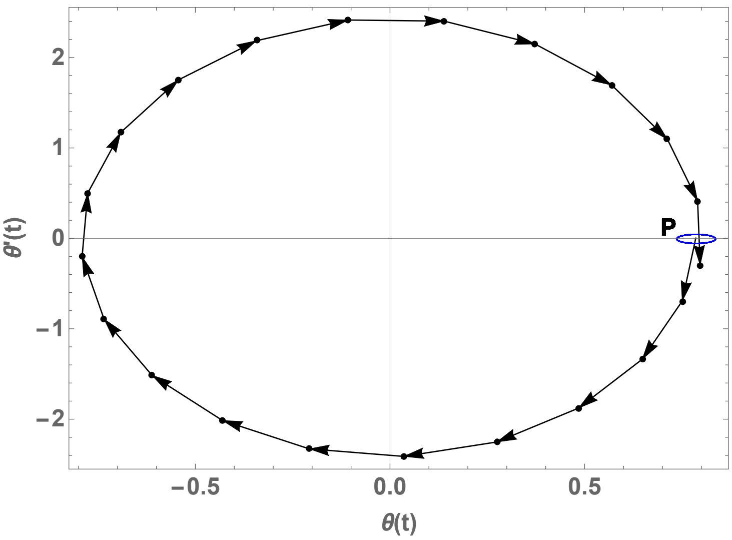

Figura 2: Para $l = 1$, $\alpha = \pi/4$ e passo $h = 0.1$, pontos $Z_0 = (\alpha, 0)$, $Z_1 = (z_{1,1}, z_{2,1}), \ldots Z_{21} = (z_{1,21}, z_{2,21})$. Os pontos mais próximos de $P = (\alpha, 0)$ são Z_{20} (1º quadrante) e Z_{21} (4º quadrante) . Note-se que a escala do eixo designado por $\theta'(t)$ está deformada relativamente ao eixo designado por $\theta(t)$, de modo a conter a figura dentro de limites facilmente observáveis.

Por conseguinte, a partir dos resultados numéricos obtidos através das fórmulas (3) poderemos escolher um certo conjunto de pontos tal que uma parte desses pontos está localizada imediatamente antes do referido ponto P (no primeiro quadrante), e outra parte depois de P (no quarto quadrante).
Tendo em conta o passo h previamente fixado, e levando em consideração os instantes, sejam t_j e t_{j+1}, onde ocorre *mudança de sinal* dos valores $z_{2,k}$ considerados, poderemos desde logo inferir um intervalo de tempo, de comprimento $h = t_{j+1} - t_j$, ao qual pertence o período exacto T.

Posteriormente será usada interpolação polinomial envolvendo um certo número de pontos do tipo anteriormente descrito para obter uma estimativa mais precisa do período T do pêndulo em causa.
Em particular, a Figura 2 sugere-nos que para o passo adoptado $h = 0.1$, se tem $T > 2.0$ e $T < (2.0+h) = 2.1$. Com efeito, o tempo $t_{20} = 2.0$, decorrido desde a posição inicial do pêndulo, é manifestamente insuficiente para fechar a linha poligonal descrita pelos pontos Z_i (pontos esses unidos dois a dois por segmentos de recta munidos de setas, a fim de ilustrar a progressão do método numérico), pois o ponto Z_{20} não coincide com o ponto $P = (\alpha, 0)$,

circulado a cor azul na figura. Por sua vez o ponto Z_{21} está localizado no quarto quadrante e, consequentemente, $T < 2.1$ (ver tabela de valores de $z_{1,j}$ e $z_{2,j}$ que constam da Figura 3). Tal significa que o período T pretendido satisfaz a condição $T \in (2.0, 2.1)$, com erro absoluto inferior a $h = 0.1$ segundos.

t_i	$z_{1,i}$	$z_{2,i}$
0.	0.785398163397	0.
0.1	0.750726419819	-0.693434871572
0.2	0.647933915928	-1.33755362818
0.3	0.484585008774	-1.87713178299
*	*	*
*	*	*
*	*	*
1.8	0.569659507564	1.6947608797
1.9	0.712689739829	1.09586683808
2.	0.790214993286	0.413982837259
2.1	0.796774928412	-0.297068336875

Figura 3: Para $l = 1$, $\alpha = \pi/4$ e $h = 0.1$, estimativas de $\theta(t_i) = z_{1,i}$ e $\theta'(t_i) = z_{2,i}$, para 21 passos do algoritmo (6)–(3) .

Note-se que para $t = T$, atendendo à continuidade da função $\theta'(t)$, necessariamente existe um intervalo $[T - \delta, T + \delta]$, com $\delta > 0$ e $T - \delta > 0$, no qual a função $\theta'(t)$ *muda de sinal* (passando de positiva a negativa). Além disso, no referido intervalo a função $\theta(t)$ é positiva.

Analogamente, usando uma sucessão decrescente para h (ou, equivalentemente, uma sucessão crescente de número de passos N), poder-se-á obter experimentalmente aproximações cada vez mais precisas do período T de um dado pêndulo simples, dada a configuração inicial $\theta_0 = \alpha$ e $\theta'_0 = 0$.

Como já foi referido, posteriormente irá recorrer a polinómios interpoladores p de uma tabela de valores $\{(z_{2,j}, t_j)\}$, para pontos convenientemente escolhidos, aproximando o período mediante interpolação em $p(0)$. Através de certas funções aproximantes (ver adiante (10)) irá também calcular a *melhor aproximação de mínimos quadrados* de valores tabelados. Finalmente, para aproximar o período segundo o modelo (1), irá aplicar uma determinada *regra de quadratura* – ver adiante (11).

O período $\hat{T}$ de um pêndulo simples pode ser facilmente calculado, com grande precisão, através do processo iterativo da média aritmética-geométrica[2], conforme detalhado a seguir. Para efeitos computacionais, irá consi-

[2] [2] C. G. Carvalhais, P. Suppes, Approximations for the period of the simple pendulum

derar o valor que obtiver para $\hat{T}$ (ver adiante fórmula (8)) como sendo o valor exacto do período de cada um dos pêndulos cujo movimento irá simular.

Um algoritmo de Taylor

O processo que aqui propomos para aproximar a solução $\theta(t)$ do problema de valores iniciais (2) (bem como $\theta'(t)$), baseia-se no desenvolvimento de Taylor, de segunda ordem, da função $\theta(t)$. Com efeito, fixado o passo $h > 0$, atendendo a que $\theta''(t) = c\,\sin(\theta(t))$, com $c = -g/l$, tem-se

$$\theta(t+h) = \theta(t) + h\,\theta'(t) + \frac{h^2}{2}\,c\,\sin(\theta(t)) + \mathcal{O}(h^3), \tag{4}$$

donde

$$\theta'(t+h) = \theta'(t) + h\,c\sin(\theta(t)) + \frac{h^2}{2}\,c\,\theta'(t)\,\cos(\theta(t)) + \mathcal{O}(h^3)\ . \tag{5}$$

Desprezando os termos $\mathcal{O}(h^3)$, as relações (4) e (5), levam-nos a considerar o seguinte algoritmo:

Dado $h > 0$, para

$$\begin{aligned} &N = \text{Round}\left(\frac{t_{max} - t_0}{h}\right),\\ &\text{e valores iniciais}\\ &z_{1,0} = \alpha, \qquad z_{2,0} = 0, \end{aligned} \tag{6}$$

calcular os $N+1$ pontos $Z_j = (z_{1,j}, z_{2,j})$, para $j = 0, 1, \ldots, N$, através das equações às diferenças (3) (ver página 2), onde $t_j = t_0 + j\,h$, para $j = 0, 1, \ldots, N$.

Para um ‘passo’ $h > 0$ suficientemente pequeno, atendendo às expressões em (4) e (5), note-se que se tem, respectivamente, $z_{1,i+1} \simeq \theta(t_{i+1})$ e $z_{2,i+1} \simeq \theta'(t_{i+1})$, onde $t_{i+1} = t_i + h$.

Estimativas precisas do período T

Dado um par de números reais positivos (a, b), com $0 < b \leq a$, sabe-se que o processo iterativo

$$\begin{cases} a_{k+1} = \dfrac{a_k + b_k}{2} & \text{(média aritmética)} \\[2ex] b_{k+1} = \sqrt{a_k\,b_k} & \text{(média geométrica)} \qquad k = 0, 1, \ldots \end{cases} \tag{7}$$

based on the arithmetic-geometric mean, Am. J. Phys. 76, 1150-1154 (2008).

converge quadraticamente para um ponto $(x, x) \in \mathcal{R}_+^2$. Mostra-se que, ver obra citada [2], para amplitudes iniciais $0 < \alpha < \pi$, o período (1) pode ser aproximado através do processo (7) iniciado com $a_0 = 1$ e $b_0 = \cos(\alpha/2)$. Designando por v a média aritmética dos valores (a_7, b_7) que se obtém após 7 iterações do método da média aritmética-geométrica (7), prova-se que o período T é (muito bem) aproximado por

$$\hat{T} = 2\,\pi\sqrt{l/g}\;\frac{1}{v}\;. \tag{8}$$

Nos problemas propostos a seguir irá aplicar métodos numéricos que conhece para, nomeadamente, obter aproximações do período T de certos pêndulos simples. Sempre que necessite do valor exacto do período T de um determinado pêndulo, deverá tomar para T o valor que obtiver aplicando a fórmula (8), usando o processo (7) com $(a_0, b_0) = (1, \cos(\alpha/2))$.

Para todos os métodos numéricos que utilizar espera-se que desenvolva programas (devidamente comentados) tendo em vista dar resposta aos problemas propostos. Sempre que recorra a rotinas do seu sistema computacional deverá justificar a razão da sua escolha. Caso utilize fontes bibliográficas ou outras, deverá indicá-las.
O relatório que apresentar não deverá ultrapassar 15 páginas, incluindo os programas desenvolvidos. O prazo de entrega é o dia 6 de Janeiro de 2020.

Problemas

1) Suponha que o período T de um pêndulo simples, de comprimento l, é dado pela fórmula $T = 2\,\pi\,\sqrt{l/g}$.

(a) Obtenha fórmulas aproximadas do erro absoluto e relativo propagado, caso calcule g em função de l e T. Justifique.

(b) Efectuou-se uma experiência com um pêndulo simples, tendo-se registado $l = 115.2\,cm$, e o período $T = 2.1536$ seg. Sabe-se que os erros absolutos respectivos são não superiores a 0.3 cm e 2×10^{-4} segundos.
Quantos algarismos significativos pode garantir para o valor de g que obteve? Justifique.

2) Considere um pêndulo de comprimento $l = 0.5\,(m)$.

Sabe-se que para certas amplitudes de oscilação α, o período T é aproximado por

$$\tilde{T} = \frac{2\,\pi}{p}\left(1 + \frac{1}{4}\,k^2\right), \quad \text{onde} \quad k = \sin(\alpha/2) \text{ e } p = \sqrt{g/l}\;. \tag{9}$$

(a) A partir da expressão de $\tilde{T}$ dada em (9), obtenha uma aproximação da amplitude inicial α do pêndulo (expressa em graus), tal que $\tilde{T} = 1.5$.

Para o efeito comece por estabelecer uma equação da forma $f(\alpha) = 0$ e aplique o método de Newton, escolhendo um intervalo de modo que a sucessão de iteradas do método convirja para a solução pretendida, independentemente do valor inicial que considerar nesse intervalo. Justifique.

(b) Mostre que o método que aplicou converge supralinearmente. Obtenha uma estimativa do erro do valor que calculou na alínea anterior, levando em conta a convergência supralinear do método.

(c) Apresente uma tabela contendo os quocientes $q_k = |x_{k+2} - x_{k+1}|/|x_{k+1} - x_k|^2$, para $k = 0, 1, \ldots, k_{max}$. Diga, justificando, qual o valor de k_{max} que adoptou. Compare q_{kmax} com o valor teórico do coeficiente assimptótico de convergência.[3]

3) Dados l, g, t_0, t_{max} e h, use o algoritmo de Taylor descrito na página 5 para elaborar programa(s) cujo resultado seja:

(i) A lista de pontos $(t_i, z_{1,i})$, para i desde 0 a N;

(ii) A lista de pontos $(z_{1,i}, z_{2,i})$, para i desde 0 a N.

(a) Aplique o programa que desenvolveu para obter uma tabela como a da Figura 3.

(b) Seja m o número natural que resulta da adição dos números de aluno do seu grupo de trabalho, suprimindo nessa soma todos os dígitos nulos que eventualmente ocorram, obtendo-se a representação decimal $m = (d_1\, d_2, \ldots, d_m)$, com $d_i \neq 0$, para $i = 1, \ldots, m$.
Tome para comprimento l (em metros) de um pêndulo simples o valor da *média geométrica* dos dígitos d_1 a d_m, arredondando simetricamente o resultado para 10 casas decimais.[4]

Para dados do problema (2), além de l como descrito anteriormente, escolha $\theta(0) = \alpha = 4/5\,\pi$ e $\theta'(0) = 0$. Usando o passo $h = 0.2$, aplique o programa que desenvolveu obtendo uma ilustração como a da Figura 1. Tome um valor $tmax$ que considere favorável à detecção do período do pêndulo em causa. (Sugestão: para escolher o valor de $tmax$ pode basear-se em (8)).

[3]Também conhecido pela designação de constante assimptótica de convergência k_∞.

[4]Por exemplo, sejam $262, 407, 634$ os números de um grupo de 3 alunos. Tem-se $m = 133$ e $l = 2.0800838231$.

(c) Obtenha uma tabela comparando os valores de T estimados do pêndulo em causa, em função do passo h adoptado, para $h = 10^{-j}$, para $j = 2, 3, 4$, bem como os respectivos erros absolutos.

d) Para o passo $h = 10^{-3}$ e a partir de cálculos efectuados na alínea anterior, escolha uma tabela de 4 pontos $\{(z_{2,j}, t_j)\}_{j=0}^{j=3}$, onde os valores de $z_{2,j}$ mudem de sinal. Calcule o polinómio interpolador da tabela, seja p, e obtenha uma aproximação do período T dada por $p(0)$. Estime o respectivo erro de interpolação.[5] Poderá dizer que este erro é desprezável face ao erro do método de Taylor (6)-(3)? Justifique.

4) Considere um pêndulo simples tal que $l = 3.5$, $\alpha = \theta(0) = \pi/4$ e $\theta'(0) = 0$. Designe por T o período do pêndulo calculado por (8).

(a) Tome para dados deste problema os pontos $Y_0 = (0, \alpha)$ a $Y_{600} = (t_{600}, z_{1,600})$ que resultam do algoritmo recursivo (3), sendo $z_{1,0} = \alpha$, $z_{2,0} = 0$, passo $h = 0.01$, no intervalo $[t_0, t_{max}]$, onde $t_0 = 0$ e $tmax = \lceil T \rceil$.[6] Apresente numa tabela apenas os últimos 10 pontos que calcular.

(b) Escreva a expressão da função a minimizar, a partir da qual poderá determinar a *melhor aproximação de mínimos quadrados* dos dados Y_0 a Y_{600}, mediante funções aproximantes do tipo

$$\begin{aligned}\phi(t) = \gamma + a_0\, \sin(t) + b_0\, \cos(t) + a_1\, \sin(2\,t) + b_1\, \cos(2\,t) +& \\ +a_2\, \sin(3\,t) + b_2\, \cos(3\,t), \quad \text{com} \quad \gamma, a_0, b_0, a_1, b_1, a_2, b_2 \in \mathbb{R}\ .&\end{aligned} \tag{10}$$

(c) Obtenha o correspondente sistema linear dito de *equações normais*, de modo que as respectivas entradas tenham sido simetricamente arredondadas para 6 casas decimais. Mostre que a matriz do sistema em causa é simétrica, definida positiva.

(d) Recorrendo a comando ou comandos do seu sistema computacional, a partir do sistema de equações normais anterior calcule a melhor aproximação de mínimos quadrados dos dados, seja $\tilde{\phi}(t)$.

(i) Apresente num mesmo gráfico os pontos calculados em **4(a)** e a aproximação obtida. Calcule a soma dos quadrados dos desvios.
(ii) É verdade que no intervalo $[t_0, t_{max}]$, o desvio absoluto máximo é inferior a 10^{-5} ?

[5] Admita que na fórmula teórica que conhece do erro de interpolação, o factor $f^{(4)}(\xi)/4!$, onde $\xi \in int(x_0, x_1, x_2, x_3)$, pode ser aproximado por uma diferença dividida com 5 nós.

[6] $\lceil x \rceil$ designa a função parte inteira superior do número real x (Ceiling).

5) O valor teórico do período T (ver expressão (1)) de um pêndulo de comprimento l e amplitude inicial α, pode ser estimado recorrendo a regras de quadratura.

Para um integral $I = \int_a^b \Psi(x)\, dx$, considere a regra de quadratura

$$Q(\Psi) = \frac{b-a}{18}\left[5\,\Psi\left(m - \sqrt{3/5}\,\mu\right) + 8\,\Psi(m) + 5\,\Psi\left(m + \sqrt{3/5}\,\mu\right)\right], \quad (11)$$

onde $m = (a+b)/2$ e $\mu = (b-a)/2$.

(a) Diga se poderá aplicar as regras dos trapézios ou de Simpson para aproximar o integral da expressão (1). Justifique.

(b) Obtenha a aproximação de T que resulta da aplicação da regra de quadratura (11) ao integral que consta da expressão (1), para $l = 3.5$ e $\alpha = 4/5\,\pi$.

(c) Subdivida o intervalo $[a, b]$ em $n = 10$ subintervalos e a cada uma deles aplique a regra de quadradura Q anteriormente considerada. Designe por Q_i, para $i = 1, \ldots, n$, o resultado que obteve em cada subintervalo. Use a soma $S_n = \sum_{i=1}^{i=n} Q_i$ (regra composta) para obter uma estimativa do período T .

(d) Sendo $n \geq 1$ o número de subdivisões do intervalo $[a, b]$, use a soma S_n (analogamente ao que fez na alínea anterior) a fim de obter uma tabela contendo, em cada linha, o número natural n, o valor estimado do período, e o respectivo erro. Considere $l = 3.5$, $\alpha = 4/5\,\pi$ e $n = 10^k$ para $k = 1, 2 \ldots, 5$. (Para efeitos de cálculo de erro aplique a fórmula (8)).