EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS
(EDO)

FÍSICA COMPUTACIONAL

A maioria das leis da Física são convenientemente formuladas em termos de equações diferenciais

A solução de equações diferenciais é uma das tarefas mais comuns para modelar sistemas físicos.

EDOs de ordem superior sempre podem ser escritas na forma de EDOs de primeira ordem introduzindo funções auxiliares:

Ex: movimento unidimensional de uma partícula de massa m sob uma força F

$$m\frac{d^2z}{dt^2} = F(z)$$ Definindo: $$p(t) = m\frac{dz}{dt}$$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{p}{m}$$ e $$\frac{dp}{dt} = F(z)$$

Conjunto de 2 EDOs de primeira ordem acopladas

FÍSICA COMPUTACIONAL

Estudaremos métodos para resolver equações diferenciais de primeira ordem

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$ Para uma única variável dependente y(x)

Serão discutidos vários métodos de resolução de EDOs baseados no problema do valor inicial, ou seja, encontrar y(x) dado o valor de y em algum ponto inicial, $y(x_0)=y_0$

Exemplo: Os valores iniciais da posição e momentum de uma partícula são conhecidos e se quer predizer seu movimento posterior utilizando as equações de movimento.

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS SIMPLES

Problema básico: Dada a EDO $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$ e conhecendo a condição inicial $y(x=0) = y_0$

Encontrar o valor de y para algum x particular (x_1)

Estratégia Geral: Dividir o intervalo [0, x_1] em um número grande N de subintervalos igualmente espaçados de comprimento $h = \frac{x_1}{N}$ e aplicar uma fórmula de recursão que relacione y_n com {y_{n-1}, y_{n-2},....}, sendo y_n a aproximação de $y(x_n = nh)$.

Permite integrar passo a passo a EDO de 0 até x_1.

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS SIMPLES – Método de Euler

Considerando $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ em x_n $\qquad y(x=0) = y_0$

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_n} = \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + o(h) = f(x_n, y_n)$$

Fórmula de 2 pontos

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + o(h^2)}$$

O erro global cometido para encontrar $y(x_1)$ será N x $o(h^2) \approx o(h)$

FÍSICA COMPUTACIONAL

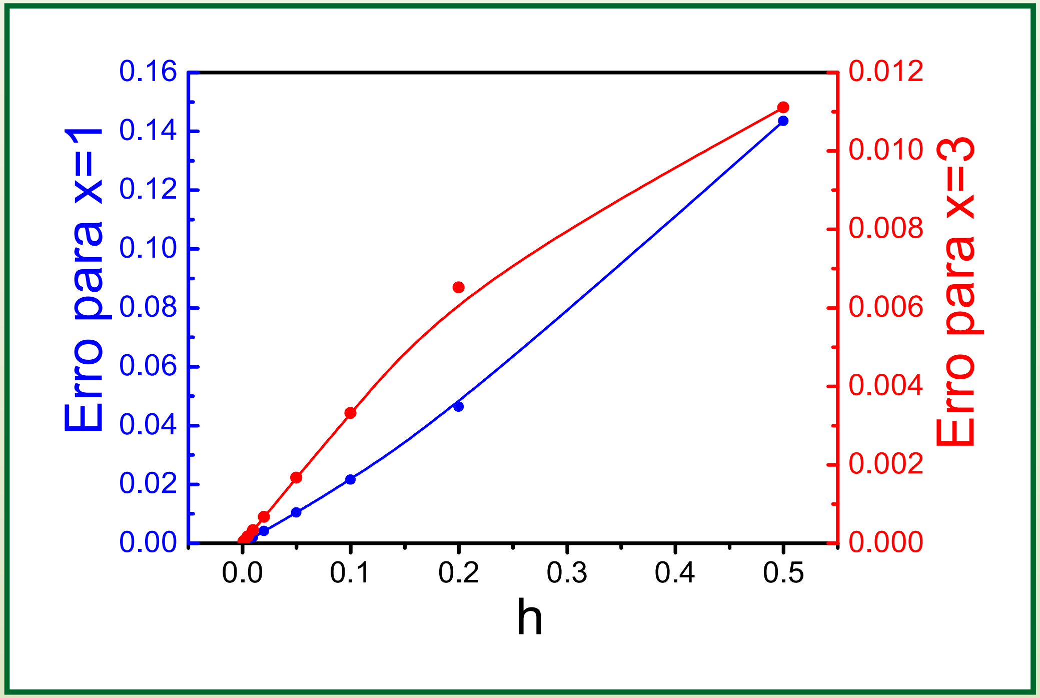
Ver pasta

MÉTODOS SIMPLES – Método de Euler

Ex: $$\frac{dy}{dx} = -xy \qquad y(0) = 1$$

Solução analítica

$$y = e^{-\frac{1}{2}x^2}$$



h	Erro y(1)	Erro y(3)
0.5	0.14347	0.011109
0.2	0.046331	0.0065193
0.1	0.021626	0.0033179
0.05	0.010453	0.0016647
0.02	0.0040979	0.00066644
0.01	0.0020353	0.00033326
0.005	0.0010143	0.00016663
0.002	0.00040489	6.6654e-005
0.001	0.00020231	3.3327e-005

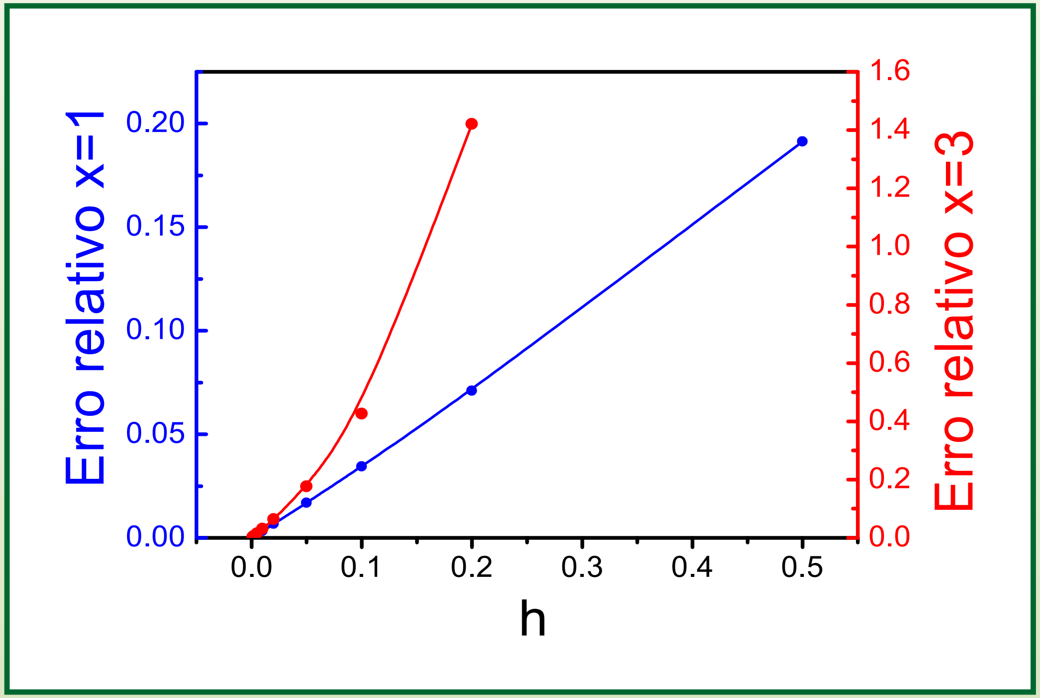
FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS SIMPLES – Método de Euler

Ex: $$\frac{dy}{dx} = -xy \qquad y(0) = 1$$

Solução analítica

$$y = e^{-\frac{1}{2}x^2}$$



h	Er. Rel y(1)	Er. Rel y(3)
0.5	0.19129	--
0.2	0.07097	1.42042
0.1	0.03443	0.42586
0.05	0.01694	0.17627
0.02	0.00671	0.06382
0.01	0.00334	0.03093
0.005	0.00167	0.01523
0.002	6.67101E-4	0.00604
0.001	3.33443E-4	0.00301

MÉTODOS SIMPLES – Método de Euler

No exemplo anterior fica evidente que assim que x for maior, o passo h deve ser cada vez mais pequeno para poder obter resultados corretos

Método de Euler- Precisão de baixa ordem

↓

Trabalho numérico totalmente ineficiente

Métodos de integração com precisão de ordem superior são usualmente preferidos no lugar do método de Euler.

↓

Maior precisão com menos passos

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS SIMPLES – Série de Taylor

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

Expandindo f em uma vizinhança de x_0 e calculando seu valor em $x = x_0 + h$

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2} y''(x_0) + o\left(h^3\right)$$

$$y(x_0) = y_n$$

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2} y''_n + o\left(h^3\right)$$

mas $y'_n = \frac{dy}{dx} = f(x, y)$ $\quad y''_n = \frac{df}{dx}(x_n, y_n) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f$

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + hf + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) + o(h^3)}$$

f e suas derivadas em (x_n, y_n)

Ver pasta

MÉTODOS SIMPLES – Série de Taylor

O erro global utilizando essa relação de recursão é de $o(h^2)$

Útil quando f é conhecida analiticamente e simples o suficiente para aplicar as derivadas.

Aplicando no exemplo anterior

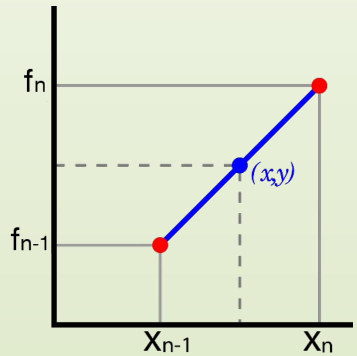
	Método de Euler		Série de Taylor	
h	**y(1)**	**y(3)**	**y(1)**	**y(3)**
0.5	0.14347	0.011109	0.032312	0.0066601
0.2	0.046331	0.0065193	0.0051253	0.00071161
0.1	0.021626	0.0033179	0.0012731	0.000149
0.05	0.010453	0.0016647	0.00031713	3.4096e-005
0.02	0.0040979	0.00066644	5.0624e-005	5.176e-006
0.01	0.0020353	0.00033326	1.2646e-005	1.2717e-006
0.005	0.0010143	0.00016663	3.1603e-006	3.1516e-007
0.002	0.00040489	6.6654e-005	5.0552e-007	5.0164e-008
0.001	0.00020231	3.3327e-005	1.2637e-007	1.2519e-008

MÉTODOS MULTI-PASSOS

Outra via → altas precisões → relações de recursão que relacionam y_{n+1} com y_n, e com pontos anteriores y_{n-1}, y_{n-2}...

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y)$$ Integrando entre x_n e x_{n+1} $$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)\,dx \qquad 1$$

extrapolação linear em x de *f*



$$a = \frac{f - f_{n-1}}{x - x_{n-1}} = \frac{f_n - f_{n-1}}{\underbrace{x_n - x_{n-1}}_{h}}$$

$$f = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_n - \frac{x - \overbrace{(x_{n-1} + h)}^{x_n}}{h} f_{n-1}$$

$$f = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_n - \frac{x - x_n}{h} f_{n-1} + o\left(h^2\right)$$ Substituindo em 1 e integrando

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS MULTI-PASSOS

$$f = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_n - \frac{x - x_n}{h} f_{n-1} + o\left(h^2\right)$$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f\left(x, y\right) dx = \frac{1}{h}\left[f_n \int_{x_n}^{x_{n+1}} x dx + f_n x_{n-1} \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx - f_{n-1} \int_{x_n}^{x_{n+1}} x dx + f_{n-1} x_n \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx \right]$$

$$= \frac{1}{h}\left[\underbrace{\frac{f_n}{2}\left(x_{n+1}^2 - x_n^2\right) - f_n x_{n-1} \overset{h}{\left(x_{n+1} - x_n\right)}}_{A} \underbrace{- \frac{f_{n-1}}{2}\left(x_{n+1}^2 - x_n^2\right) + f_{n-1} x_n \overset{h}{\left(x_{n+1} - x_n\right)}}_{B} \right]$$

$$A = \frac{f_n}{2}\left[\left(x_n + h\right)^2 - x_n^2\right] - f_n\left(x_n - h\right) h = f_n\left(x_n h + \frac{h^2}{2} - x_n h + h^2\right) = \frac{3}{2} h^2 f_n$$

$$B = -\frac{f_{n-1}}{2}\left[\left(x_n + h\right)^2 - x_n^2\right] + f_{n-1} x_n h = -f_{n-1}\left(x_n h + \frac{h^2}{2} - x_n h\right) = -\frac{1}{2} h^2 f_{n-1}$$

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + h\left(\tfrac{3}{2} f_n - \tfrac{1}{2} f_{n-1}\right) + o(h^3)}$$

Adams-Bashforth dois passos

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS MULTI-PASSOS

Métodos de ordem superior podem ser derivados extrapolando com polinômios de grau superior

Ex: Se *f* for extrapolada por um polinômio cúbico (3ª ordem) que passe pelos pontos f_n, f_{n-1}, f_{n-2} e f_{n-3} resulta no método de Adams-Bashforth de quatro passos

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}) + o(h^4)}$$

Note que as relações de recursão envolvem vários passos prévios, ou seja, o valor de y_0 não é suficiente para iniciar o cálculo.

Os valores de y nos primeiros pontos da rede devem ser obtidos por algum outro método.

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS IMPLÍCITOS

Métodos explícitos estudados até agora ➡ *y_{n+1} (y_n, y_{n-1}, ...valores já conhecidos)*

Métodos implícitos $\rightarrow$ Altas precisões (resolver equação para determinar y_{n+1})

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$ em $x_{n+½}$ $$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_{n+\frac{1}{2}}} = f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right)$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_{x_n} = \frac{y(x_n+h) - y(x_n-h)}{2h} + o\left(h^2\right)$$ Fórmula de 3 pontos

h → ½h $\Rightarrow$ $$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_{x_{n+\frac{1}{2}}} = \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + o\left(h^2\right)$$

Aproxima-se $f_{n+½}$ pela média dos 2 pontos adjacentes

$$f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right) = \frac{1}{2}\left(f_n + f_{n+1}\right) + o\left(h^2\right)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS IMPLÍCITOS

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} + o\left(h^2\right) = \frac{1}{2}\left(f_n + f_{n+1}\right) + o\left(h^2\right)$$

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \tfrac{1}{2} h\left[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})\right] + o(h^3)}$$

A presença de y_{n+1} em ambos lados da equação implica que se deve resolver uma equação não trivial em cada passo de integração

Se *f* for linear em y → *f(x,y) = g(x)y*

$$\boxed{y_{n+1} = \left[\frac{1 + \frac{1}{2} g(x_n) h}{1 - \frac{1}{2} g(x_{n+1}) h}\right] y_n}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS ADAMS-MOULTON – Multi-passos e implícitos

No caso anterior, aproximamos f pela média dos 2 pontos adjacentes (linear)

$f \cong \frac{1}{2}(f_n + f_{n+1})$ (1 passo)

Utilizando um polinômio de ordem 2 passando por f_{n-1}, f_n, f_{n+1} (2 passos)

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) + o(h^4)}$$

Utilizando um polinômio de ordem 3 passando por f_{n-2}, f_{n-1}, f_n, f_{n+1} *(3 passos)*

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) + o(h^5)}$$

ALGORITMOS PREDICTOR – CORRECTOR

Os métodos implícitos raramente são utilizados na prática, porém servem como base para a aplicação de algoritmos predictor-corrector

Método explícito $\Rightarrow$ Calcular o valor de y_{n+1} (predição)

Método implícito usando a predição $\Rightarrow$ correção (que se converte em nova predição)

$\Downarrow$

Se |correção-predição| < tolerância $\Rightarrow$ Terminar

Por exemplo: Um algoritmo predictor-corrector com erro local de $o(h^5)$

predição $\rightarrow$ Adams-Bashforth de quatro passos

correção $\rightarrow$ Adams-Moulton de três passos

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

Ampla variedade de algoritmos para integrar EDO

↓

Alguns estudados anteriormente

↓

Cada um com suas peculiaridades (vantagens e desvantagens)

Métodos de Runge-Kutta

- Muito convenientes
- Amplamente utilizados
- Podem ser utilizadas várias ordens de precisão

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

Método de Runge-Kutta de 2ª ordem

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \Rightarrow \quad y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y)\, dx$$

Série de Taylor ao redor do ponto médio do intervalo de integração

$$f(x, y) = \underbrace{\boxed{f\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right)}}_{f_0} + \left(x - x_{n+\frac{1}{2}}\right) \underbrace{\boxed{f'\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right)}}_{f'_0} + \frac{\left(x - x_{n+\frac{1}{2}}\right)^2}{2} \underbrace{\boxed{f''\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right)}}_{f''_0} + \ldots$$

$$\int_{x_{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}h}^{x_{n+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}h} f(x, y)\, dx = f_0 x \Big|_{x_{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}h}^{x_{n+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}h} + f'_0 \frac{\left(x - x_{n+\frac{1}{2}}\right)^2}{2} \Big|_{x_{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}h}^{x_{n+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}h} + f''_0 \frac{\left(x - x_{n+\frac{1}{2}}\right)^3}{6} \Big|_{x_{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}h}^{x_{n+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}h}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

$$=\boxed{f_0\left[\left(\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}+\frac{1}{2}h\right)-\left(\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}-\frac{1}{2}h\right)\right]+}\; f_0 h$$

$$\boxed{+f_0'\left[\frac{\left(\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}+\frac{1}{2}h-\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}\right)^2}{2}-\frac{\left(\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}-\frac{1}{2}h-\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}\right)^2}{2}\right]+}\quad = 0$$

$$\boxed{+f_0''\left[\frac{\left(\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}+\frac{1}{2}h-\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}\right)^3}{6}-\frac{\left(\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}-\frac{1}{2}h-\cancel{x_{n+\frac{1}{2}}}\right)^3}{6}\right]}\quad o(h^3)$$

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)\,dx = hf\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right)+o\left(h^3\right)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

????

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)\,dx \Rightarrow y_{n+1} = y_n + hf\left(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}\right) + o\left(h^3\right)$$

Considerando que o erro global ~ h^3 $\rightarrow$ h^2 é uma boa aproximação para $y_{n+1/2}$ (lado direito), já que temos o termo h multiplicando.

Método de Euler

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n, y_n\right) + o\left(h^2\right) \xrightarrow{\frac{h}{2}} y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{h}{2} f\left(x_n, y_n\right)$$

Definamos $k_1 = hf\left(x_n, y_n\right) \Rightarrow y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{1}{2}k_1$

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

Algoritmo de Runge-Kutta de 2ª ordem

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right) + o\left(h^3\right)}$$

$$k_1 = hf\left(x_n, y_n\right)$$

Os métodos de Runge-Kutta englobam a idéia de substituir aproximações para os valores de y do lado direito de expressões implícitas que envolvem *f*

Podem ser tão precisos como os métodos utilizando a Série de Taylor, ou métodos implícitos ou multipontos mas não apresentam as limitantes:

- *f* ser facilmente diferenciável
- Linearidade de *y*
- Conhecer o valor de *y* em vários pontos

⟺ Avaliação de *f* 2 vezes por passo

FÍSICA COMPUTACIONAL

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\left(k_1 + 4k_2 + k_3\right) + o\left(h^4\right)$$

$$k_1 = hf\left(x_n, y_n\right)$$
$$k_2 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right)$$
$$k_3 = hf\left(x_n + h, y_n - k_1 + 2k_2\right)$$

Algoritmo de Runge-Kutta de 3ª ordem

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) + o\left(h^5\right)$$

Algoritmo de Runge-Kutta de 4ª ordem

$$k_1 = hf\left(x_n, y_n\right)$$
$$k_2 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right)$$
$$k_3 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2\right)$$
$$k_4 = hf\left(x_n + h, y_n + k_3\right)$$

Melhor equilíbrio entre precisão e esforço computacional

EDOs ACOPLADAS (exemplos)

Consideremos o caso de um corpo de massa unitária que apresenta um movimento unidimensional sob a ação de uma força F, que é função do tempo e da posição do corpo $\rightarrow$ *F(t,x)*

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f\left(t, x\right)$$

Condições iniciais

$$x\left(t = 0\right) = x_0$$

$$v\left(t = 0\right) = v_0$$

$$\Rightarrow$$

$$\frac{dx}{dt} = v$$

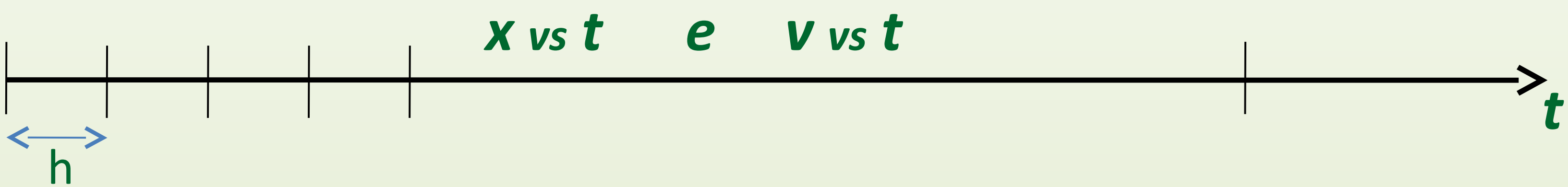
$$\frac{dv}{dt} = f\left(t, x\right)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

EDOs ACOPLADAS (exemplos)

$$x\left(t=0\right)=x_0 \qquad x\left(t_f=5s\right)=?$$

$$v\left(t=0\right)=v_0 \qquad v\left(t_f=5s\right)=?$$



Dividir o intervalo de tempo $t_f - t_0$ em n subintervalos de largura h

$$\frac{dx}{dt}=v$$ Utilizar o valor de x_0 e v_0 para calcular $x_1 = x_0+ \ldots h \ldots v_0$

$$\frac{dv}{dt}=f\left(t,x\right)$$ Utilizar o valor de x_0,v_0 e t_0 para calcular $v_1 = v_0+ \ldots h \ldots f(t_0, x_0)$

$t_1 = t_0 + h \rightarrow$ Utilizar t_1, x_1 e v_1 para calcular t_2, x_2 e v_2 e assim sucessivamente

FÍSICA COMPUTACIONAL

EDOs ACOPLADAS (exemplo – Método de Euler)

$$\frac{d^2x}{dt^2} = t + \frac{x}{2}$$

Condições iniciais 1

$$x\,(t = 0s) = 0m$$

$$v\,(t = 0s) = 0\tfrac{m}{s}$$

Condições iniciais 2

$$x\,(t = 0s) = 0m$$

$$v\,(t = 0s) = 2\tfrac{m}{s}$$

$$\frac{dx}{dt} = v$$

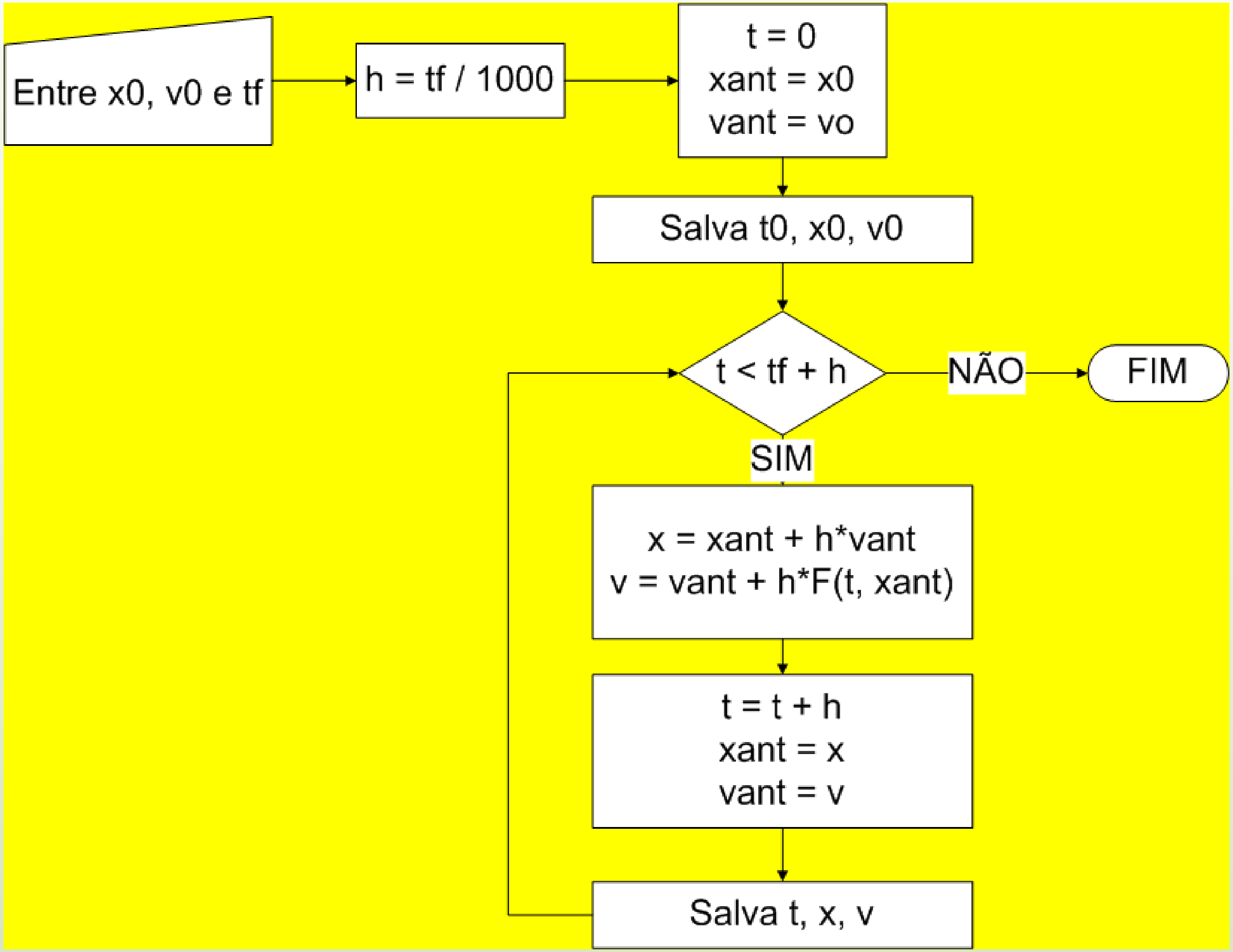
$$\frac{dv}{dt} = t + \frac{x}{2}$$

Dependência x vs t e v vs t

por exemplo, entre 0 e 5s

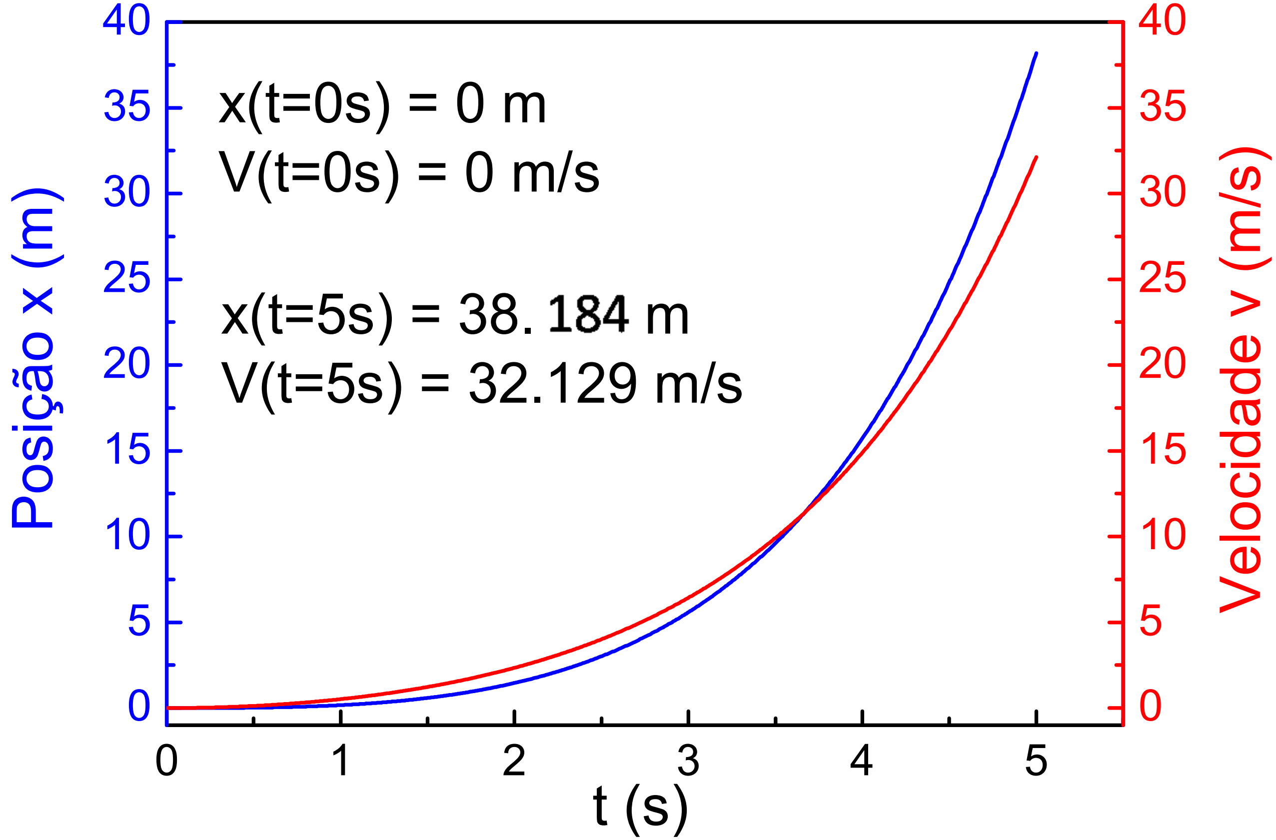
Ver Pasta

EDOs ACOPLADAS (exemplo – Método de Euler)



FÍSICA COMPUTACIONAL

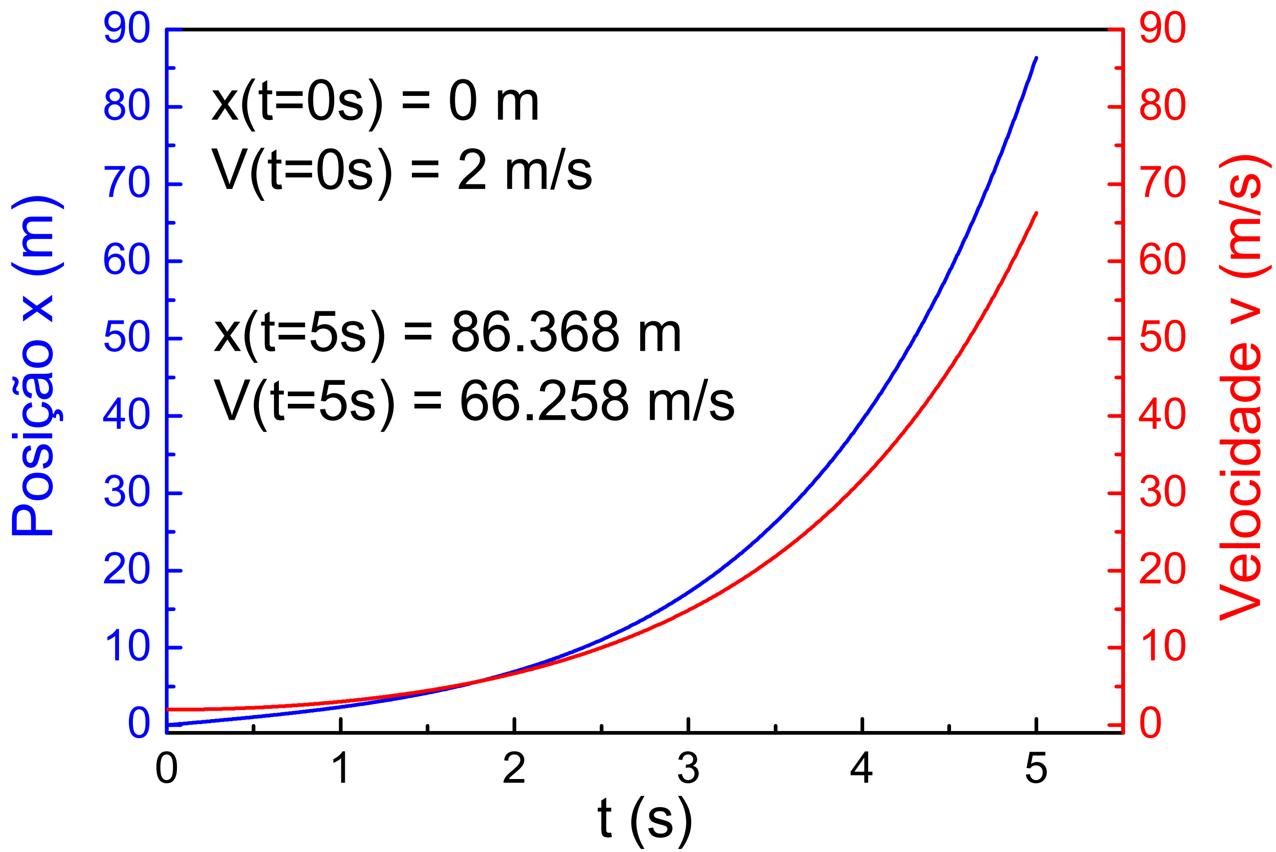
EDOs ACOPLADAS (exemplo – Método de Euler)



Voltar RK

FÍSICA COMPUTACIONAL

EDOs ACOPLADAS (exemplo – Método de Euler)



EDOs ACOPLADAS (exemplo – Runge-Kutta 4ª ordem)

Lembrando

$$y_{n+1} = y_n + \tfrac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) + o\left(h^5\right)$$

$$k_1 = hf\left(x_n, y_n\right)$$
$$k_2 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right)$$
$$k_3 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2\right)$$
$$k_4 = hf\left(x_n + h, y_n + k_3\right)$$

Temos 2 equações diferenciais ordinárias para resolver

$$\frac{dx}{dt} = v \qquad \rightarrow$$ k_1, k_2, k_3, k_4 (são aproximações de x)

$$\frac{dv}{dt} = t + \frac{x}{2} \qquad \rightarrow$$ m_1, m_2, m_3, m_4 (são aproximações de v)

EDOs ACOPLADAS (exemplo – Runge-Kutta 4ª ordem)

$$y_{n+1} = y_n + \tfrac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$

$$k_1 = hf\left(x_n, y_n\right)$$
$$k_2 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right)$$
$$k_3 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2\right)$$
$$k_4 = hf\left(x_n + h, y_n + k_3\right)$$

$$\frac{dx}{dt} = v \qquad \frac{dv}{dt} = t + \frac{x}{2}$$

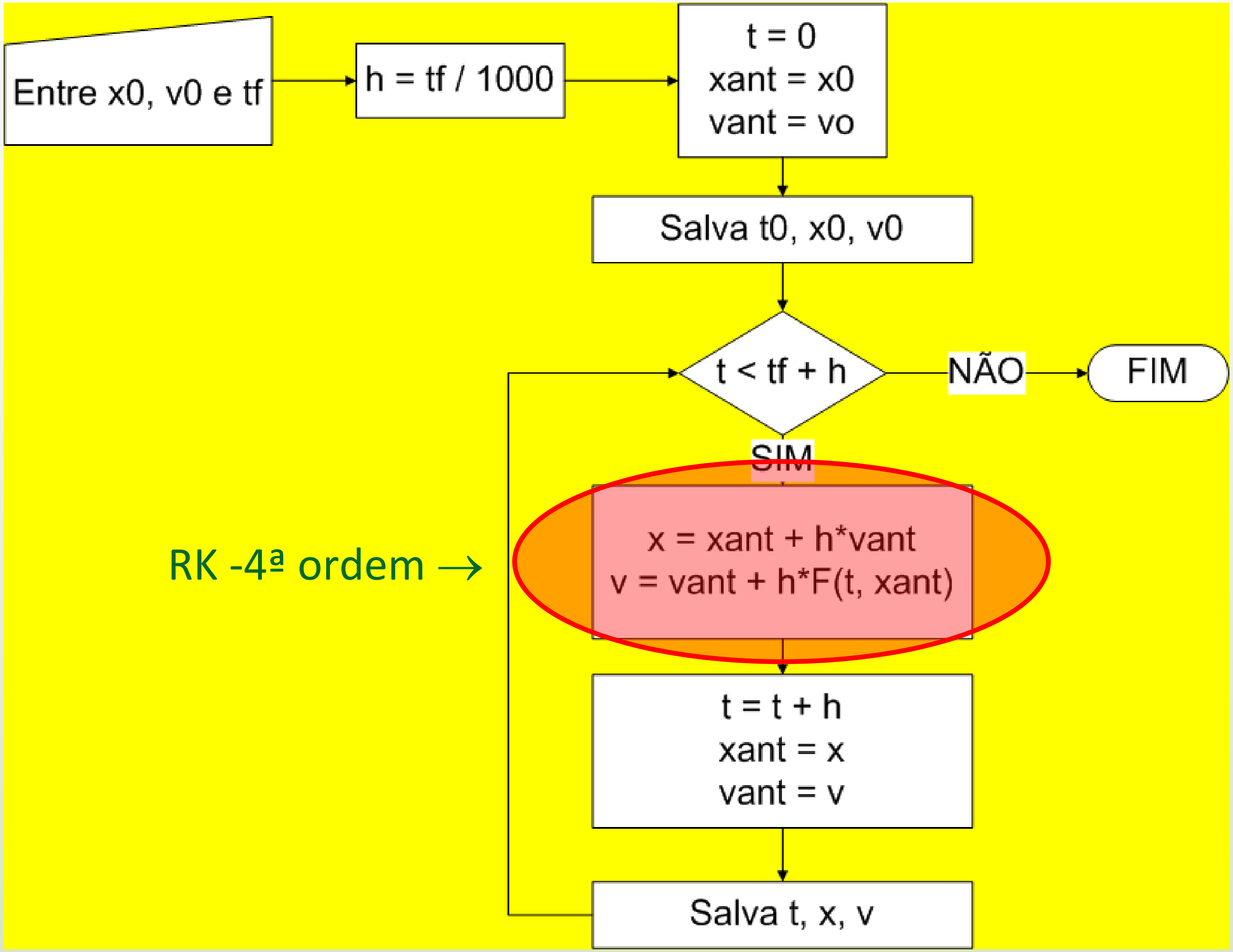
$k_1 = hv$ $m_1 = hf\left(t, x\right)$	$k_2 = h\left(v + \tfrac{1}{2}m_1\right)$ $m_2 = hf\left(t + \tfrac{1}{2}h, x + \tfrac{1}{2}k_1\right)$
$k_3 = h\left(v + \tfrac{1}{2}m_2\right)$ $m_3 = hf\left(t + \tfrac{1}{2}h, x + \tfrac{1}{2}k_2\right)$	$k_4 = h\left(v + m_3\right)$ $m_4 = hf\left(t + h, x + k_3\right)$

$$x_{n+1} = x_n + \tfrac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$

$$v_{n+1} = v_n + \tfrac{1}{6}\left(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4\right)$$

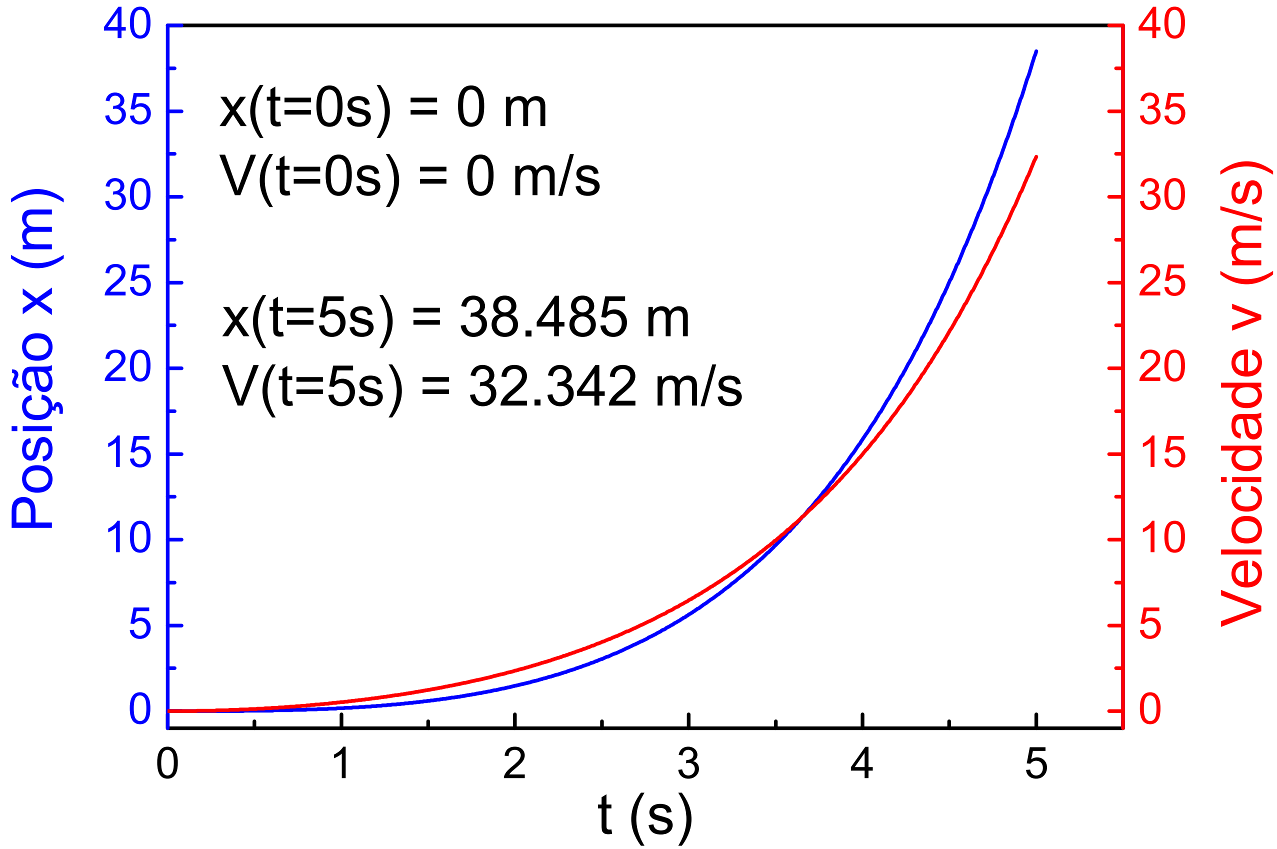
Ver Pasta

EDOs ACOPLADAS (exemplo – Runge-Kutta 4ª ordem)



RK -4ª ordem →

EDOs ACOPLADAS (exemplo – Runge-Kutta 4ª ordem)



Comparar Euler

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

Consideremos o movimento de uma partícula de massa unitária com energia baixa o suficiente para permanecer confinada em um potencial V.

$$H = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + V(x, y)$$

A trajetória da partícula será governada pelas equações de Hamilton e dependerá dos valores iniciais das coordenadas e momentos

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = p_x \qquad \frac{dy}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_y} = p_y$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y} = -\frac{\partial V}{\partial y}$$

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

Consideremos o movimento em um potencial central: $H = \frac{p_r^2}{2} + V(r) + \frac{p_\theta^2}{2r^2}$

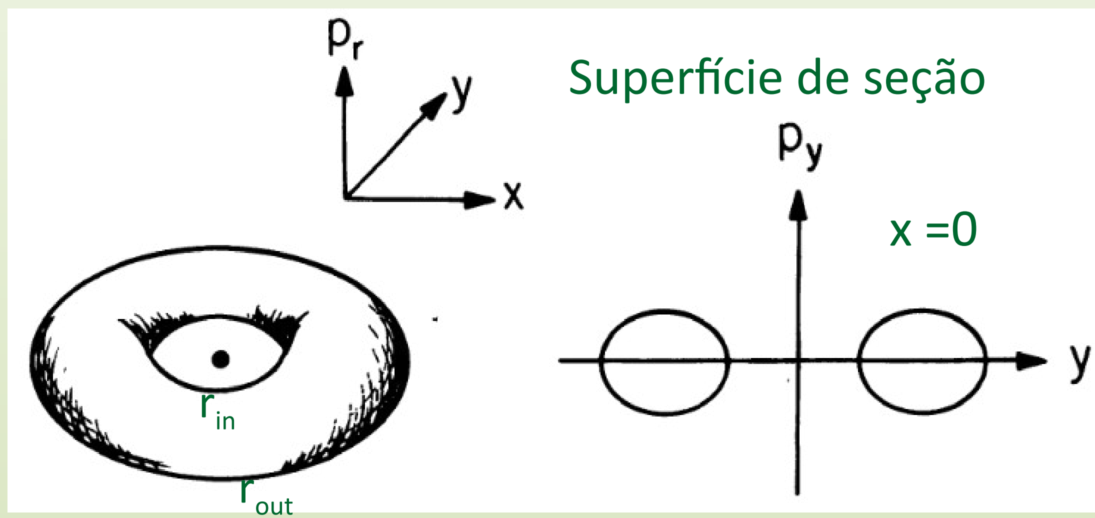
Para valores fixos da energia e momento angular, o movimento radial é limitado entre 2 pontos r_{in} e r_{out} que são as soluções da equação:

$$E - V(r) - \frac{p_\theta^2}{2r^2} = 0 \qquad p_r=0$$

Para r fixo, o momento radial assume 2 valores

$$p_r = \pm\left(2E - 2V(r) - \frac{p_\theta^2}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

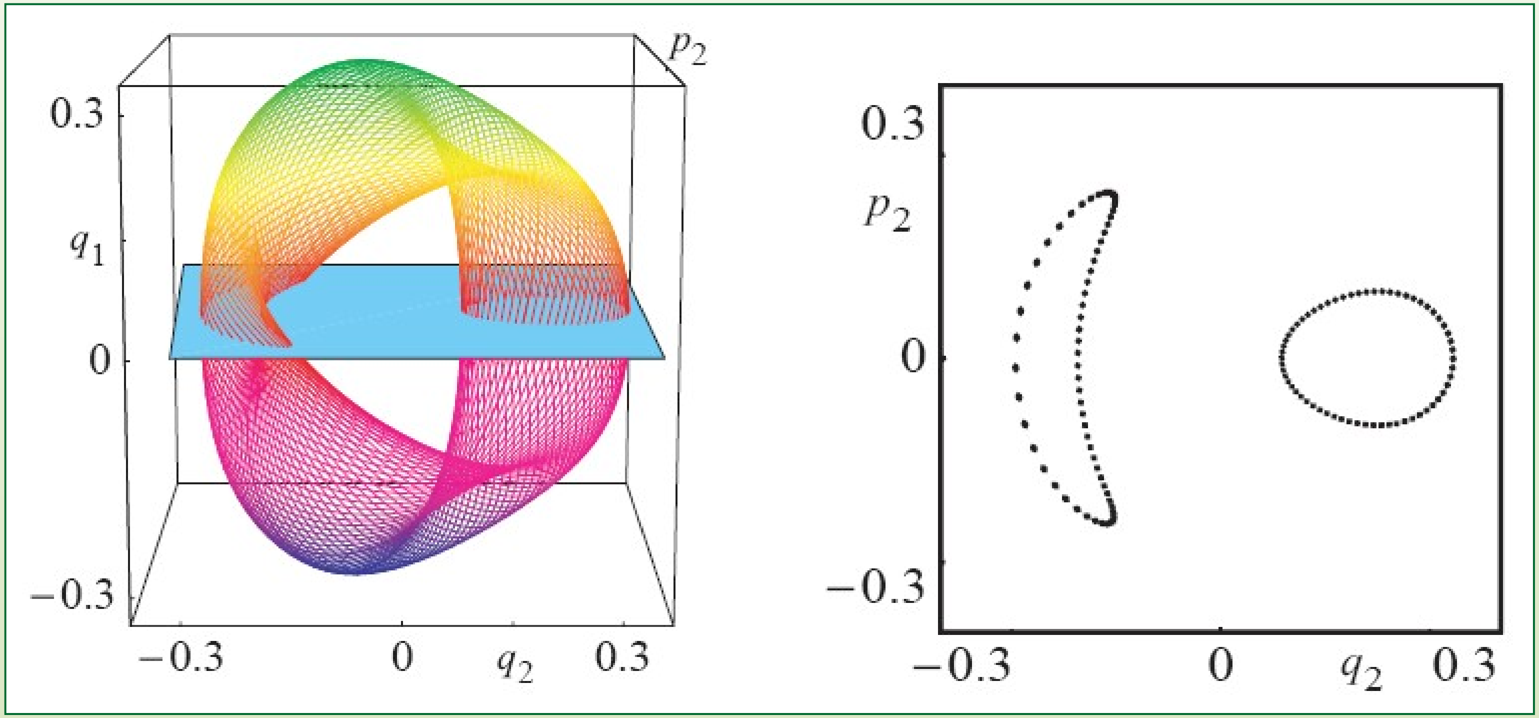
Toroide no espaço de fases



FÍSICA COMPUTACIONAL

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

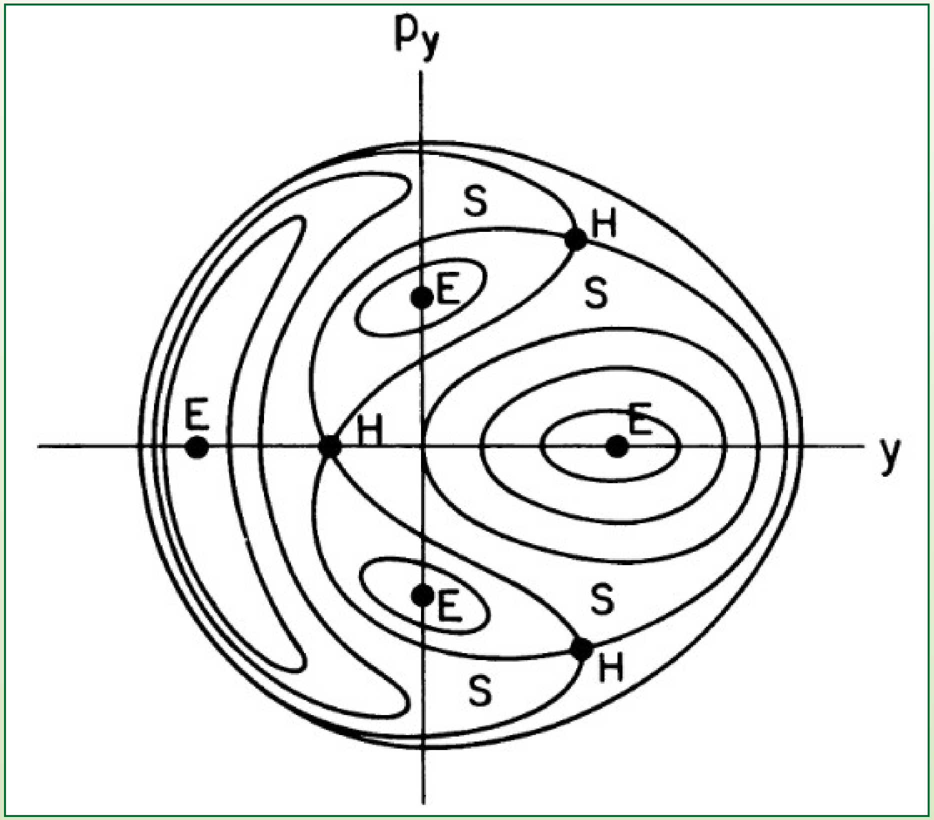
O volume ocupado pelo toroide varia de acordo com o potencial e às condições iniciais, ou seja, podem existir muitos toroides de formas diferentes para uma mesma energia.



FÍSICA COMPUTACIONAL

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

De forma geral, para um conjunto de condições iniciais diferentes, a superfície de seção desses toroides podem parecer das seguintes formas.



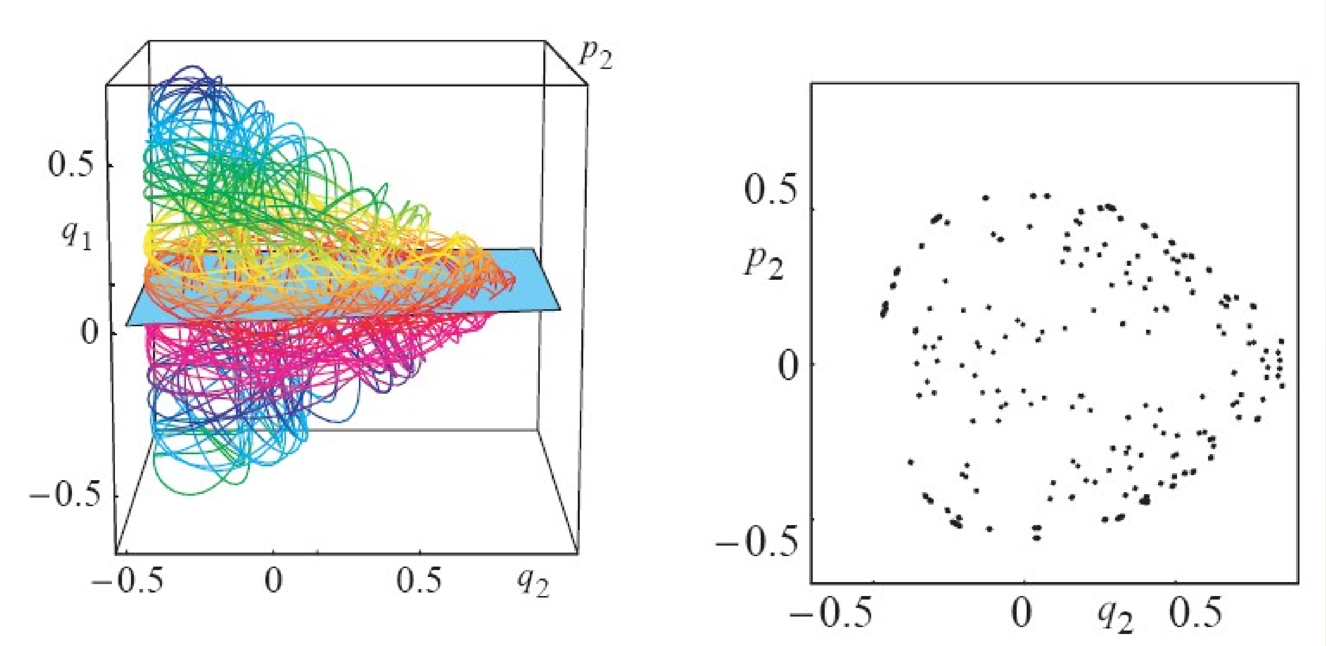
Pontos fixos associados com trajetórias que se repetem exatamente depois de alguns periodos.

Elípticos – Trajetórias confinadas e estáveis sob pequenas perturbações.

hiperbólicos: Trajetórias instáveis. Pontos de escape

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

Para pequenas perturbações, a maioria dos toroides ao redor de um ponto fixo elíptico se deformam levemente, mantendo a topologia. Porém, pode acontecer que a trajetória fique caótica, mostrando superfícies de seção com pontos distribuídos aleatoriamente.



FÍSICA COMPUTACIONAL

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

Um caso de potencial conveniente para estudar esse tipo de comportamento é o potencial introduzido por Henon e Heiles no estudo de órbitas estelares.

$$V(x, y) = \frac{1}{2}\left(x^2 + y^2\right) \boxed{+ x^2 y - \frac{1}{3}y^3}$$

Potencial de um oscilador harmônico perturbado

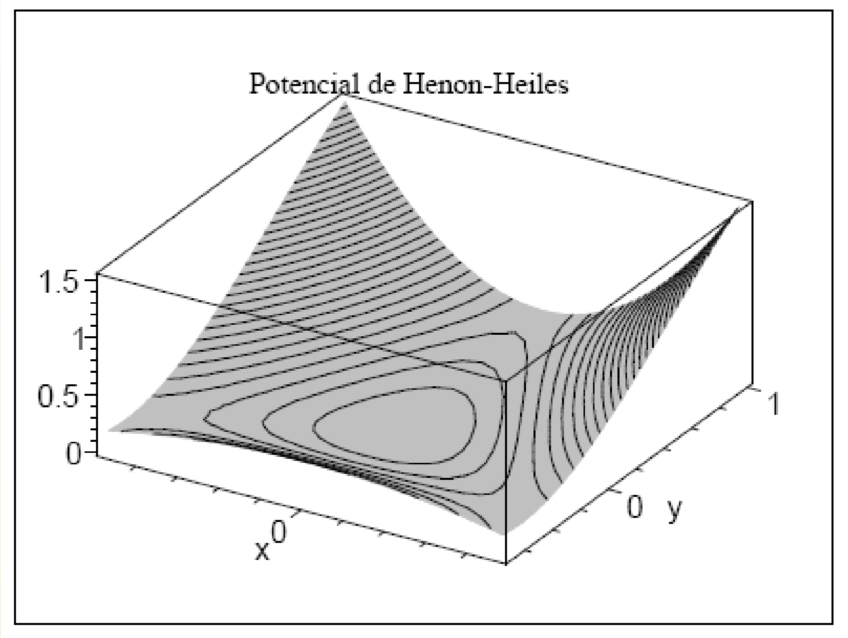
Tal perturbação pode ser considerada como um aumento da energia do sistema

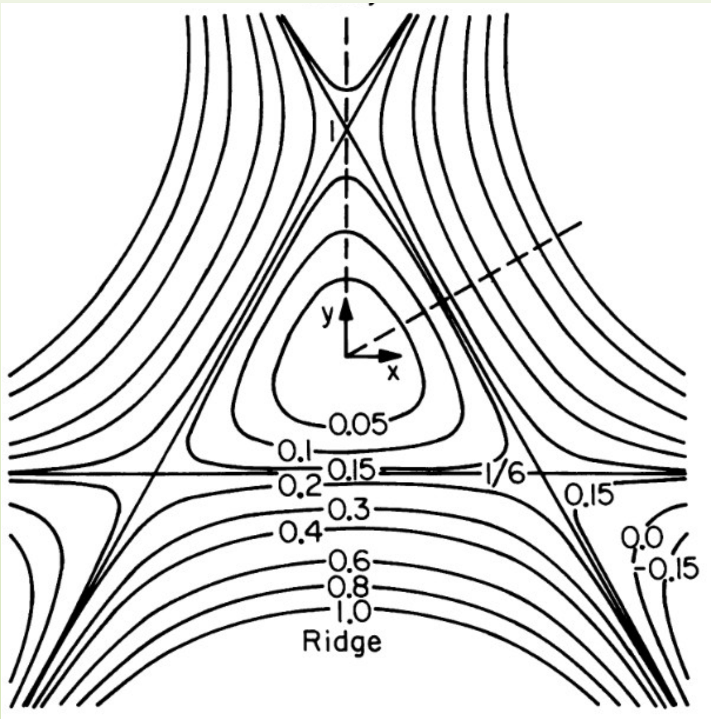
FÍSICA COMPUTACIONAL

ORDEM E CAOS NO MOVIMENTO EM DUAS DIMENSÕES

O potencial de Henon e Heiles:

- Tem um mínimo em (0, 0) onde V = 0
- Três pontos de escape onde V = 1/6
- A faixa de energias com estados confinados é 0 < E < 1/6





FÍSICA COMPUTACIONAL

PROJETO 2. MOVIMENTO BI-DIMENSIONAL NO POTENCIAL DE HENON-HEILES

Partindo do Hamiltoniano de uma partícula sob o potencial de Henon-Heiles construa:

1- Trajetória da partícula no plano (x,y) para um tempo entre 0 e 100 s;

2- Superfície de seção (y, P_y) para $x = 0$.

Considere as seguintes condições iniciais (fornecidas ao sistema) para cada um dos problemas acima (Sempre $x_0 = 0$).

$E = 1/8$

$y_0 = 0.02$, $P_{y0} = -0.08$

$y_0 = 0.2$, $P_{y0} = 0$

$y_0 = -0.1$, $P_{y0} = 0.04$

$y_0 = -0.05$, $P_{y0} = 0.2$

$y_0 = 0.3$, $P_{y0} = 0.3$

$y_0 = -0.12$, $P_{y0} = 0$

$E = 1/12$

$y_0 = 0.02$, $P_{y0} = -0.08$

$y_0 = 0.2$, $P_{y0} = 0$

$y_0 = -0.1$, $P_{y0} = 0.04$

$y_0 = -0.05$, $P_{y0} = 0.2$

$y_0 = 0.3$, $P_{y0} = 0.3$

$y_0 = -0.12$, $P_{y0} = 0$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROJETO 2. MOVIMENTO BI-DIMENSIONAL NO POTENCIAL DE HENON-HEILES

$$E = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2}\left(x^2 + y^2\right) + x^2 y - \frac{1}{3} y^3$$

$$\frac{dx}{dt} = p_x \qquad \frac{dy}{dt} = p_y$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = -x - 2xy \qquad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial y} = -y - x^2 + y^2$$

4 EDOs acopladas

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROJETO 2. MOVIMENTO BI-DIMENSIONAL NO POTENCIAL DE HENON-HEILES

Para integrar as EDOs utilize o **<u>método de Runge-Kutta de 4ª ordem</u>**.

Ex:

```
j1=h*px;
k1=h*py;
m1=h*Fx(x,y);
n1=h*Fy(x,y);

j2=h*(px+0.5*m1);
k2=h*(py+0.5*n1);
m2=h*Fx(x+0.5*j1,y+0.5*k1);
n2=h*Fy(x+0.5*j1,y+0.5*k1);

......
......
```

```
x+=(j1 + 2*j2 + 2*j3 + j4)/6;
y+=(k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4)/6;
px+=(m1 + 2*m2 + 2*m3 + m4)/6;
py+=(n1 + 2*n2 + 2*n3 + n4)/6;
```

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROJETO 2. MOVIMENTO BI-DIMENSIONAL NO POTENCIAL DE HENON-HEILES

Exemplo: