Introdução à Computação em Física

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS - PARTE 2

PROF. WALBER

Refs.:
Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais (2nd edição), M. A. G. Ruggiero, V. L. da Rocha Lopes
Cálculo numérico Com Aplicações (2nd edição), L. C. Barroso, M. M.A. Barroso, F. F. C. Filho, M. L. B. de Carvalho, M. L. Maia

Aula anterior: Problema do valor inicial (PVI)

Queremos obter a solução de uma equação diferencial, onde conhecemos uma condição inicial. Esse é o problema do valor inicial (PVI).

$$y' = f(x, y)$$
$$y(x_0) = y_0$$

Vimos esquemas numéricos para se calcular y(x), em um conjunto de pontos x_1, x_2, x_3, ..., em que $x_k = x_0 + kh$. O valor y_k é obtido a partir dos valores anteriores y_{k-1}, y_{k-2},..., y_0.

Métodos de passo simples: cálculo de y_k depende apenas de y_{k-1};
Métodos de passo múltiplo: cálculo de y_k depende de m valores anteriores, y_{k-1}, y_{k-2}, ..., y_{k-m}.

Aula anterior: Métodos de passo simples

Método de Euler;

Métodos de Euler modificado e melhorado (RK – ordem 2);

Métodos de Heun e Nystrom (RK – ordem 3);

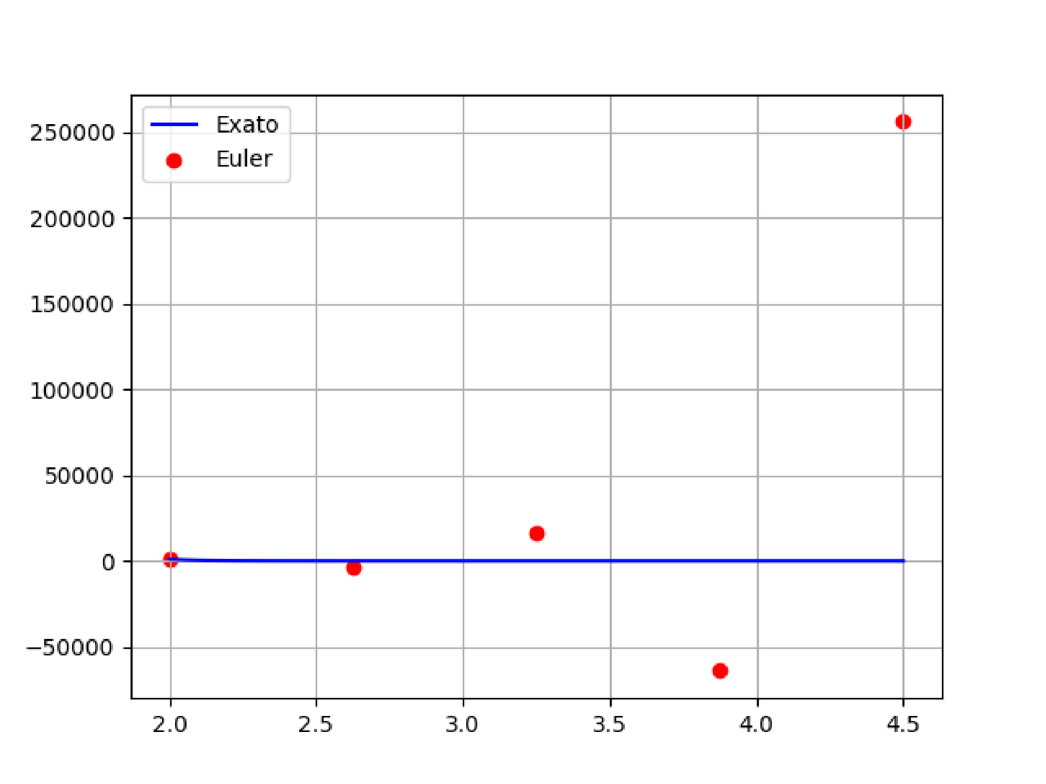
Métodos de RK de quarta ordem (2 métodos);

Veremos a seguir alguns métodos de passo múltiplo, onde teremos que conhecer o valor da solução em mais de um ponto;
Buscamos métodos mais precisos e estáveis (na obtenção da solução desejada).
Tenham em mente que a precisão pode ser bastante sensível a h.
Nesse contexto, os métodos de passo múltiplo se destacam.

Métodos de passo simples

Método de Euler;

h = 0.5



$$y'(x) = -10y$$
$$y(2) = 1000$$

Solução exata

$$y(x) = 1000e^{-10x+20}$$

Estabilidade está associada com h.

Métodos baseados em integração numérica

Iremos explorar uma classe de métodos de passo múltiplo baseada na integração numérica. Esses são conhecidos como métodos de Adams-Bashforth e tem como base a integração da equação diferencial:

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} y'(x)dx = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))dx$$

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))dx$$

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))dx$$

Temos que ter uma aproximação para o cálculo da integral de f: polinômio de interpolação

Método de Adams - Bashforth

Assim sendo, temos que:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))dx$$

Nesse sentido, temos os seguintes métodos:

1. Método explícito: obtidos quando utilizamos os pontos x_k, x_{k-1}, ..., x_{k-m} para interpolar f(x,y);

2. Método implícito: quando utilizamos no conjunto de pontos, sobre os quais queremos interpolar f(x,y), o ponto x_{k+1}.

Método de Adams - Bashforth de passo 2

Vamos inicialmente aproximar f(x,y(x)) por um polinômio de grau um $p_1(x)$ (forma de Newton)

$$p_1(x) = \frac{(x - x_k)}{(x_{k-1} - x_k)} f(x_{k-1}, y_{k-1}) + \frac{(x - x_{k-1})}{(x_k - x_{k-1})} f(x_k, y_k)$$

Fazendo:

$$x = x_k + hz$$

$$\begin{aligned} x - x_k &= hz \\ x - x_{k-1} &= x - (x_k - h) \\ x - x_{k-1} &= h(z+1) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$p_1(x) = (z+1) f_k - z f_{k-1}$$

$$y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} [(z+1) f_k - z f_{k-1}] dx$$

$$dx = hdz$$

$\Rightarrow$

$$y_{k+1} = y_k + h \int_0^1 [(z+1) f_k - z f_{k-1}] dz$$

Método de Adams - Bashforth de passo 2

Logo, temos que:

$$y_{k+1} = y_k + h \int_0^1 [(z+1)f_k - z f_{k-1}]dz$$

$$\Downarrow$$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(3f_k - f_{k-1})$$

Onde:

$$f_k = f(x_k, y_k)$$

$$f_{k-1} = f(x_{k-1}, y_{k-1})$$

Nesse caso, precisamos de dois valores de y_0 e y_1. O primeiro é dado pelo PVI e o outro pode ser obtido com algum método de passo simples.

Método de Adams - Bashforth de passo 3

De maneira análoga, pode-se obter o método de Adams-Bashforth de passo 3

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{12}(23f_k - 16f_{k-1} + 5f_{k-2})$$

Onde:

$$f_k = f(x_k, y_k)$$

$$f_{k-1} = f(x_{k-1}, y_{k-1})$$

$$f_{k-2} = f(x_{k-2}, y_{k-2})$$

k = 2, 3, ..., m-1

Precisamos de três valores de y_0 , y_1 , y_2. O primeiro é dado pelo PVI e o outros podem ser obtidos com algum método de passo simples.

Método de Adams-Bashforth de passo quatro

Para o método de passo quatro, vamos supor que conhecemos quatro pontos (x_{k-3}, y_{k-3}), (x_{k-2}, y_{k-2}), (x_{k-1},y_{k-1}) e (x_k,y_k). Assim sendo, vamos aproximar f(x,y) por um polinômio de grau 3:

$$p_3(x) = \frac{(x-x_{k-2})(x-x_{k-1})(x-x_k)}{(x_{k-3}-x_{k-2})(x_{k-3}-x_{k-1})(x_{k-3}-x_k)}f_{k-3} + \frac{(x-x_{k-3})(x-x_{k-1})(x-x_k)}{(x_{k-2}-x_{k-3})(x_{k-2}-x_{k-1})(x_{k-2}-x_k)}f_{k-2} + \frac{(x-x_{k-3})(x-x_{k-2})(x-x_k)}{(x_{k-1}-x_{k-3})(x_{k-1}-x_{k-2})(x_{k-1}-x_k)}f_{k-1} + \frac{(x-x_{k-3})(x-x_{k-2})(x-x_{k-1})}{(x_k-x_{k-3})(x_k-x_{k-2})(x_k-x_{k-1})}f_k$$

Sendo:

$$\begin{aligned} x - x_k &= hz \\ x - x_{k-1} &= h(z+1) \\ x - x_{k-2} &= h(z+2) \\ x - x_{k-3} &= h(z+3) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow$$

$$p_3(x) = (z^3+3z^2+2z)\frac{(-f_{k-3})}{6} + (z^3+4z^2+3z)\frac{f_{k-2}}{2} + (z^3+5z^2+6z)\frac{(-f_{k-1})}{2} + (z^3+6z^2+11z+6)\frac{f_k}{6}$$

Método de Adams-Bashforth de passo quatro

Assim sendo,

$$p_3(x) = (z^3+3z^2+2z)\frac{(-f_{k-3})}{6} + (z^3+4z^2+3z)\frac{f_{k-2}}{2} + (z^3+5z^2+6z)\frac{(-f_{k-1})}{2} + (z^3+6z^2+11z+6)\frac{f_k}{6}$$

$$\Rightarrow$$

$$y_{k+1} = y_k + h\int_0^1 \Big[-\frac{f_{k-3}}{6}(z^3+3z^2+2z) + \frac{f_{k-2}}{2}(z^3+4z^2+3z) - \frac{f_{k-1}}{2}(z^3+5z^2+6z) + \frac{f_k}{6}(z^3+6z^2+11z+6)\Big]dz$$

Logo:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3})$$

$k = 3, 4, \ldots, m-1$

Vemos que este método necessita dos valores de (x_k,y_k), (x_{k-1},y_{k-1}), (x_{k-2},y_{k-2}) e (x_{k-3},y_{k-3}) .

Método de Adams-Bashforth de cinco passos

Outro método explícito de Adams-Bashfort é o método de cinco passos, dado por:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{720}(1901 f_k - 2774 f_{k-1}$$
$$+2616 f_{k-2} - 1274 f_{k-3} + 251 f_{k-4})$$

$k = 4, 5, ..., m-1$

Vemos que este método necessita dos valores de (x_k, y_k), (x_{k-1}, y_{k-1}), (x_{k-2}, y_{k-2}) , (x_{k-3}, y_{k-3}) e (x_{k-4}, y_{k-4}) .

Erros associadas aos métodos

Método de Euler : $$E = \frac{y''(\xi)}{2}h^2$$ $$\xi \in (x_k, x_{k+1})$$

Método de RK de ordem 2 (Euler modificado e melhorado) : $$E = \frac{y'''(\xi)}{3!}h^2$$

Método de RK de ordem 3 (Heun e Nystrom) : ~ $O(h^3)$

Método de RK de ordem 4 : ~ $O(h^4)$

Erros associadas aos métodos (passo múltiplo)

Método de AB de dois passos : $E = \frac{5y'''(\xi)}{12}h^2$ $\xi \in (x_{k-1}, x_{k+1})$

Método de AB de três passos: $E = \frac{3y^{(4)}(\xi)}{8}h^3$ $\xi \in (x_{k-2}, x_{k+1})$

Método de AB de quatro passos: $E = \frac{251y^{(5)}(\xi)}{720}h^4$ $\xi \in (x_{k-3}, x_{k+1})$

Método de AB de cinco passos: $E = \frac{95y^{(6)}(\xi)}{288}h^5$ $\xi \in (x_{k-4}, x_{k+1})$

Métodos Implícitos

Método implícitos

- Os métodos implícitos fazem uso de um ponto adicional para a interpolação utilizada no passo da integração;

- O ponto adicional é (x_{k+1},y_{k+1});

- Dentre este grupo de métodos vamos elencar alguns baseados nos métodos vistos anteriores;

- Iremos ver os chamados métodos implícitos de Adams-Moulton;

Métodos de dois e três passos

Os métodos de Adams-Moulton de dois e três passos são dados abaixo:

- 2 passos:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{12}[5f_{k+1} + 8f_k - f_{k-1}]$$ $$E = \frac{y^{(4)}(\xi)}{24}h^3$$ $$\xi \in (x_{k-1}, x_{k+1})$$

- 3 passos:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}[9f_{k+1} + 19f_k - 5f_{k-1} + f_{k-2}]$$ $$E = \frac{19y^{(5)}(\xi)}{720}h^4$$ $$\xi \in (x_{k-2}, x_{k+1})$$

Método de quatro passos

O métodos de Adams-Moulton de quatro passos pode ser escrito como:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{720}[251 f_{k+1} + 646 f_k - 264 f_{k-1} + 106 f_{k-2} - 19 f_{k-3}]$$

$$E = \frac{3y^{(6)}(\xi)}{160} h^5 \qquad \xi \in (x_{k-3}, x_{k+1})$$

É interessante ter em mente que nos métodos implícitos de Adams-Moulton é necessário o valor de f_{k+1};

Atividades práticas

1. Utilize um dos métodos de Runge-Kutta de 4 ordem para obter os pontos necessários do PVI abaixo, para aplicar os métodos de Adams-Bashforth de 2 e 4 passos

$$
\begin{aligned}
y'(x) &= y - x^2 + 1 \\
y(0) &= 0.5
\end{aligned}
$$

2. Calcule y(1) e y(2) do problema acima com os métodos de Adams-Bashforth para o problema acima, e compare com os valores obtidos com o método de Heun.

Equações diferenciais de segunda ordem

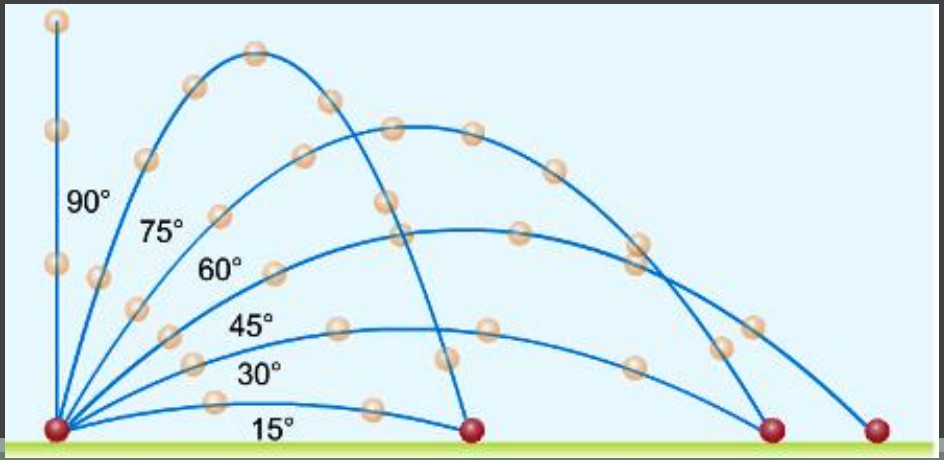
Equações diferenciais de segunda ordem

Vimos até o momento métodos numéricos para resolver equações diferenciais de primeira ordem.
Em Física, há vários casos em que desejamos resolver equações diferenciais de segunda ordem.

$$\mathbf{F} = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}$$

+ Posição e velocidade iniciais conhecidas

lançamento de projéteis



Cálculos de orbitas

Equações diferenciais de segunda ordem

$$\mathbf{F} = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}$$

+ Posição e velocidade iniciais conhecidas

Para resolver uma equação diferencial de segunda ordem escrita como:

$$y''(x) = f(x, y, y')$$

$$y(x_0) = y_0$$
$$y'(x_0) = y'_0$$

Equações diferenciais de segunda ordem

Vamos fazer uma mudança de variável para reduzir a ordem da equação diferencial:

$$y''(x) = f(x, y, y')$$

$$\begin{aligned} y(x_0) &= y_0 \\ y'(x_0) &= y'_0 \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = g(x, y, z) \\ y(x_0) = y_0 \\ z(x_0) = z_0 \end{cases}$$

Duas equações diferencias de primeira ordem.

A solução da segunda equação diferencial irá nos possibilitar obter y

Equações diferenciais de segunda ordem

Seja por exemplo:

$$\begin{cases} y'' = 4y' - 3y - x \\ y(0) = \frac{4}{9} \\ y'(0) = \frac{7}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y' = f(x,y,z) = z \\ z' = g(x,y,z) = 4z - 3y - x \\ y(0) = \frac{4}{9} \\ z(0) = \frac{7}{3} \end{cases}$$

Pelo método de Euler (simples), podemos escrever na forma vetorial:

$$\begin{pmatrix} y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_k \\ z_k \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} f(x_k, y_k, z_k) \\ g(x_k, y_k, z_k) \end{pmatrix}$$

Equações diferenciais de segunda ordem

Método de Euler melhorado:

$$\begin{pmatrix} y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_k \\ z_k \end{pmatrix} + \frac{h}{2} \begin{pmatrix} k_1 + k_2 \\ l_1 + l_2 \end{pmatrix}$$

Onde:

$$\begin{pmatrix} k_1 \\ l_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_k, y_k, z_k) \\ g(x_k, y_k, z_k) \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} k_2 \\ l_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_k + h, y_k + hk_1, z_k + hk_1) \\ g(x_k + h, y_k + hl_1, z_k + hl_1) \end{pmatrix}$$

Atividades práticas:

1. Implementar o método de Euler simples e melhorado para resolver as equações diferenciais abaixo:

$$\begin{cases} y'' = 4y' - 3y - x \\ y(0) = \frac{4}{9} \\ y'(0) = \frac{7}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y' = f(x, y, z) = z \\ z' = g(x, y, z) = 4z - 3y - x \\ y(0) = \frac{4}{9} \\ z(0) = \frac{7}{3} \end{cases}$$

2. Faça o mesmo para a seguinte equação diferencial:

$$\begin{aligned} y'' &= y + e^x \\ y(0) &= 1 \\ y'(0) &= 0 \end{aligned}$$

Utilize h = 0.1.
Calcule y(0.1) e y(0.2).

Atividades práticas:

3. Prepare para a próxima aula um exemplo de aplicação em Física sobre a aplicação dos métodos para se resolver uma EDO de segunda ordem.