Introdução à Computação em Física

PROBLEMA DO VALOR INICIAL

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

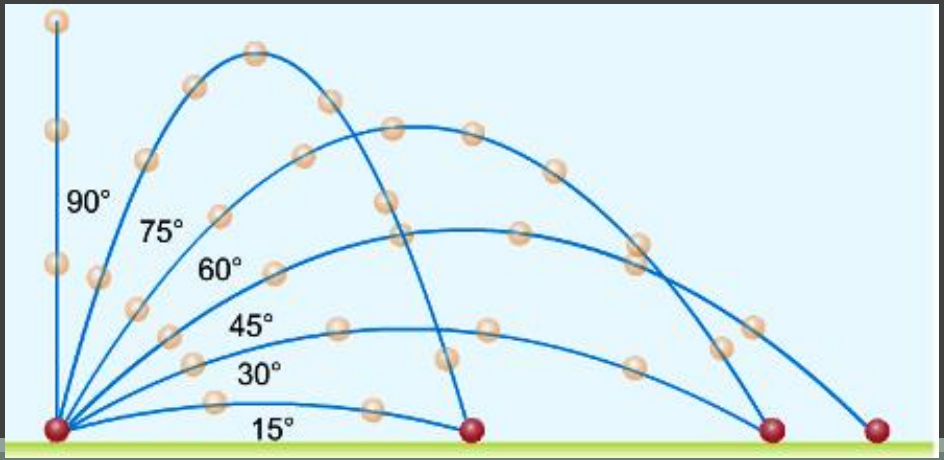
Introdução

Vários fenômenos da natureza são descritos via equações diferenciais. Inclusive, na física onde vários problemas são estudados utilizando equações diferenciais, dado um conjunto de condições de contorno. Ex.: Segunda lei de Newton:

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

+ Posição e velocidade iniciais conhecidas

lançamento de projéteis

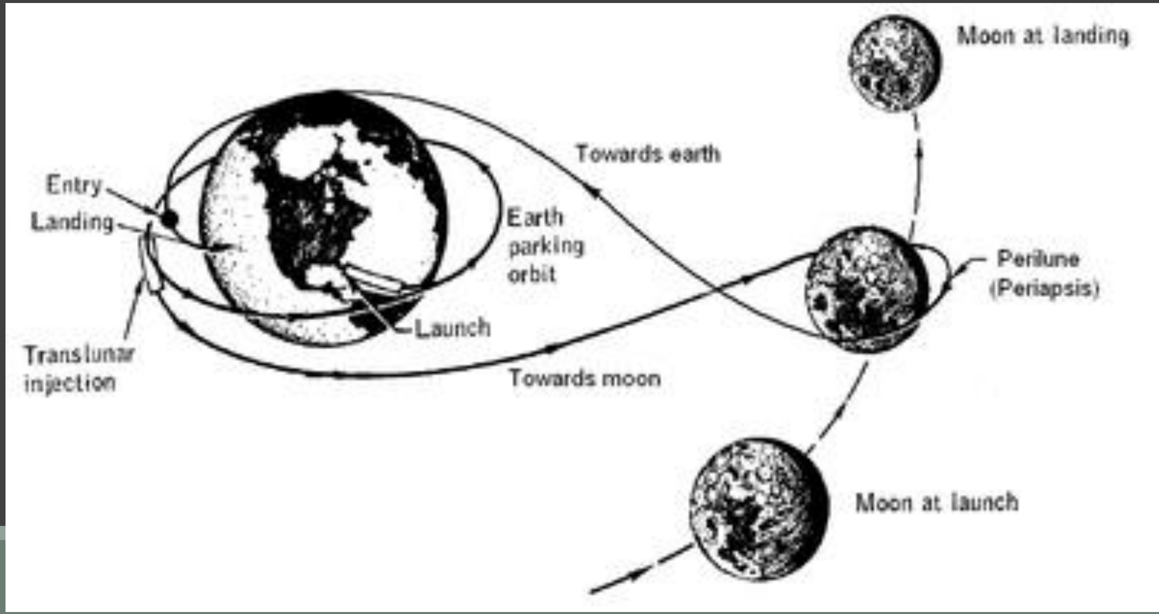


Cálculos de orbitas

Introdução

Vale ressaltar que existem diversos métodos para se obter soluções analíticas de equações diferenciais. Porém, vale ressaltar que várias dessas equações não possuem solução analítica, e exigem o emprego de métodos numéricos.

Iremos estudar métodos numéricos que são empregados para obter a solução de uma equação diferencial considerando a condição inicial.



Equações diferenciais ordinárias (EDO's)

São equações envolvendo derivadas, que possuem uma única variável independente. Como exemplo, podemos citar:

$$\frac{dy}{dx} = x + y$$

: y é função de x. x é a única variável independente. EDO de primeira ordem

$$\frac{dy}{dt} = x - 2y$$

: x e y são funções de t. t é a única variável independente.

$$\frac{d^2y}{dw^2} = x^2 + y^2$$

: x e y são funções de w. w é a única variável independente. EDO de segunda ordem

Aula de hoje: Problema do valor inicial (PVI)

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

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

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

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, $y_{k-1}, y_{k-2}, \ldots, y_{k-m}$.

Método de Taylor

Vale destacar que a sequência de pontos $\{x_k\}$ é definida por:

$$x_k = x_0 + kh$$ k=0,1,2,..., N $$N = \frac{x_N - x_0}{h}$$

Vamos considerar que f(x,y) seja contínua e derivável em relação a x e y. Sendo y(x) a solução exata de nosso PVI. A expansão em série de Taylor para y(x) no ponto x_k é dada por:

$$y(x) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}(x - x_k) + \frac{y''(x_k)}{2!}(x - x_k)^2 + \cdots + \frac{y^n(x_k)}{n!}(x - x_k)^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_k)^{n+1}$$

Método de Taylor

Aplicando a expansão anterior em $x_k + h = x_{k+1}$:

$$y(x) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}(x - x_k) + \frac{y''(x_k)}{2!}(x - x_k)^2 + \cdots + \frac{y^n(x_k)}{n!}(x - x_k)^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_k)^{n+1}$$

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}(x_{k+1} - x_k) + \frac{y''(x_k)}{2!}(x_{k+1} - x_k)^2 + \cdots + \frac{y^n(x_k)}{n!}(x_{k+1} - x_k)^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x_{k+1} - x_k)^{n+1}$$

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}h + \frac{y''(x_k)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{y^n(x_k)}{n!}h^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}$$

Último termo associado a erro de truncamento

Método de Taylor

Da última equação anterior, temos que:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \frac{y'(x_k)}{1!}h + \frac{y''(x_k)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{y^n(x_k)}{n!}h^n + \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}$$

Em relação as derivadas, temos que:

$$y'(x_k) = f(x_k, y_k)$$

$$\begin{aligned} y''(x_k) &= \frac{d}{dx}f(x_k, y_k) \\ &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}y' \\ &= f_x + f_y f \end{aligned}$$

$$y'''(x_k) = f_y(f_x + f_y f) + f^2 f_{yy} + 2f f_{xy} + f_{xx}$$

+ termos de ordem superior

Que podem ser substituídas na primeira equação;
Logo, obtemos uma aproximação para $y(x_{k+1})$, baseado no conhecimento de $y(x_k)$, que depende da maior da derivada.

Método de Euler e erro associado

No método de Taylor o erro do cálculo de $y(x_{k+1})$ é dado por

$$E(x_{k+1}) = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}$$

$$\xi \in [x_k, x_{k+1}]$$

O chamado **método de Euler** é obtido considerando a primeira ordem:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hf(x_k, y_k)$$

$$\Downarrow$$

$$y_{k+1} = y_k + hf_k$$

k=0,1,2,..., N

$$E(x_{k+1}) = \frac{y''(\xi)}{2!}h^2$$

Exemplo:

Seja o seguinte problema de valor inicial: $$\frac{dy}{dx} = y \qquad y(0) = 1$$

Considerando h = 0.02:

$x_0 = 0$
$x_1 = 0.02$
$x_2 = 0.04$
$x_3 = 0.06$

$\Rightarrow$

$y_0 = 1$
$y_1 = y_0 + hy(0) = 1 + 0.02*1 = 1.02$
$y_2 = y_1 + hy_1 = 1.02 + (0.02*1.02) = 1.0404$
$y_3 = y_2 + hy_2 = 1.0612$

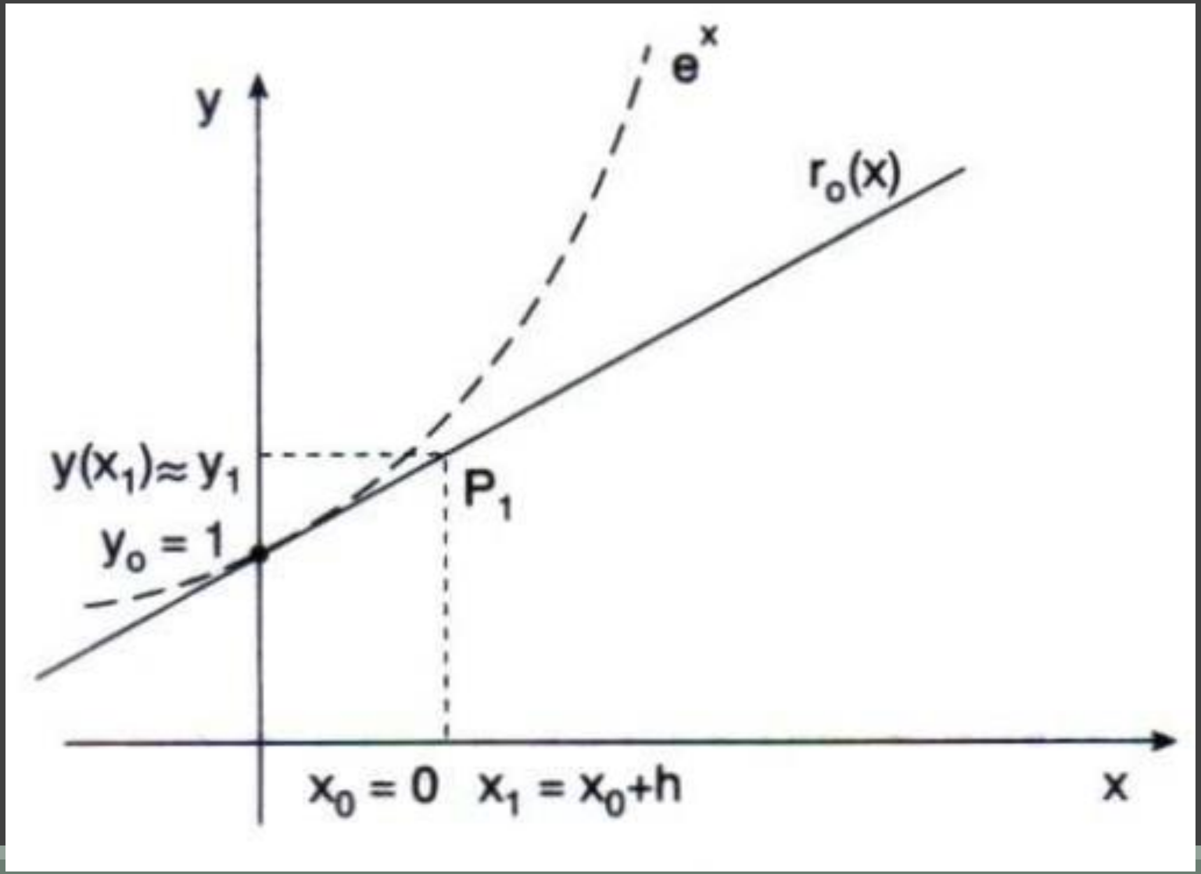
Solução analítica dada por
y(x) = exp (x), tal que

y(0.04) = 1.0408
y(0.06) = 1.0618

Erro vai aumentando conforme k aumenta (erro vai acumulando devido a truncagem)

Método de Euler (graficamente)

Erro vai aumentando conforme k aumenta



Métodos de Runge-Kutta

No método de Taylor vimos que aproximações de ordem superior envolvem cálculos de derivadas de f(x,y), que insere mais complicações na obtenção da solução desejada.

Nos métodos de Runge-Kutta, os cálculos das derivadas são eliminados. Por outro lado, como veremos a seguir, será necessário calcular os valores de f(x,y) em outros pontos.

Esses métodos podem ser entendidos a partir do chamado método geral explícito de um passo, onde:

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k, h)$$

k=0,1,2,..., N

Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são obtidos considerando a seguinte definição:

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k, h)$$

$$\phi(x, y, h) = \sum_{j=1}^{R} c_j k_j$$

$$k_1 = f(x, y)$$

$$k_j = f\left(x + a_j h, y + h \sum_{m=1}^{j-1} b_{jm} km\right)$$

$$a_j = \sum_{m=1}^{j-1} b_{jm}$$

j=2,3,..., R
(R estágio do método)

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

Os métodos de Runge-Kutta de ordem 2 são obtidos considerando R = 2,

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k, h)$$

$$\phi(x, y, h) = c_1 k_1 + c_2 k_2 \qquad k_1 = f(x, y) \qquad k_2 = f(x + a_2 h, y + h b_{21} k_1) \qquad a_2 = b_{21}$$

$$k_2 = f(x + a_2 h, y + h a_2 f)$$

Expandindo k_2 em série de Taylor em torno de (x,y):

$$k_2 = f(x,y) + (a_2 h) f_x(x,y) + (h a_2 f) f_y(x,y) + \frac{(a_2 h)^2}{2!} f_{xx}(x,y) + (a_2 h)(h a_2 f) f_{xy}(x,y) + \frac{(h a_2 f)^2}{2!} f_{yy}(x,y) + O(h^3)$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

$$k_2 = f(x,y) + (a_2h)f_x(x,y) + (ha_2f)f_y(x,y) + \frac{(a_2h)^2}{2!}f_{xx}(x,y) + (a_2h)(ha_2f)f_{xy}(x,y) + \frac{(ha_2f)^2}{2!}f_{yy}(x,y) + O(h^3)$$

Podemos agora obter uma expressão para $\Phi(x,y,h)$, uma vez que conhecemos k_1 e k_2:

$$\phi(x,y,h) = c_1 f + c_2\left[f + (a_2h)f_x + (ha_2f)f_y + \frac{(a_2h)^2}{2!}f_{xx} + (a_2h)^2 f f_{xy} + \frac{(ha_2f)^2}{2!}f_{yy} + O(h^3)\right]$$

$$\Downarrow$$

$$\phi(x,y,h) = (c_1 + c_2)f + c_2a_2hF + \frac{(a_2h)^2}{2!}c_2G + O(h^3)$$

Onde:

$$F = f_x + f_y f$$

$$G = f_{xx} + 2ff_{xy} + f_{yy}f^2$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

Temos que:

$$\phi(x,y,h) = (c_1 + c_2)f + c_2 a_2 h F + \frac{(a_2 h)^2}{2!} c_2 G + O(h^3)$$

$$F = f_x + f_y f$$

$$G = f_{xx} + 2f f_{xy} + f_{yy} f^2$$

Por outro lado, do método de Taylor, sabemos que:

$$y'(x) = f(x,y) = \phi(x,y,h)$$

$$\phi(x,y,h) = f(x,y) + \frac{h}{2!} f'(x,y) + \frac{h^2}{3!} f''(x,y) + O(h^3)$$

$$\Downarrow$$

$$\phi(x,y,h) = f + \frac{h}{2!}(f_x + f_y f) + \frac{h^2}{3!}[f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_y(f_x + f_y f)] + O(h^3)$$

Logo,

$$\phi(x,y,h) = f + \frac{h}{2} F + \frac{h^2}{3!}[G + f_y F] + O(h^3)$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

Assim sendo, temos que:

$$F = f_x + f_y f$$

$$\phi(x,y,h) = (c_1 + c_2)f + c_2 a_2 h F + \frac{(a_2 h)^2}{2!} c_2 G + O(h^3)$$

$$G = f_{xx} + 2f f_{xy} + f_{yy} f^2$$

$$\phi(x,y,h) = f + \frac{h}{2}F + \frac{h^2}{3!}[G + f_y F] + O(h^3)$$

Comparando as duas equações acima:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

duas equações e três incógnitas, possui infinitas soluções.
De acordo com os valores dessas constantes, teremos os diferentes métodos oriundos do método de Runge-Kutta de ordem 2

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2 (Euler Modificado)

Para a solução particular:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} c_1 &= 0 \\ c_2 &= 1 \\ a_2 &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Temos o método chamado de **Euler Modificado**, onde:

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k, h)$$

$$\phi(x, y, h) = c_1 k_1 + c_2 k_2$$

$$k_1 = f(x, y) \qquad k_2 = f(x + a_2 h, y + h b_{21} k_1)$$

$$a_2 = b_{21}$$

Método de Euler Modificado

$$y_{k+1} = y_k + hk_2$$

$$k_1 = f(x_k, y_k)$$

$$k_2 = f\left(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_1\right)$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2 (Euler Melhorado)

Para a solução particular:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ c_2 a_2 = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{2} \\ c_2 &= \frac{1}{2} \\ a_2 &= 1 \end{aligned}$$

Temos o método chamado de **Euler Melhorado**, onde:

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k, h)$$

$$\phi(x, y, h) = c_1 k_1 + c_2 k_2$$

$$k_1 = f(x, y) \qquad k_2 = f(x + a_2 h, y + h b_{21} k_1)$$

$$a_2 = b_{21}$$

$\Rightarrow$

Método de Euler Melhorado

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$$

$$k_1 = f(x_k, y_k)$$

$$k_2 = f(x_k + h, y_k + hk_1)$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 3

De maneira análoga ao feito anteriormente, podemos obter as equações dos métodos de Runge-Kutta de ordem 3. Nesse caso,

$$y_{k+1} = y_k + h(c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3)$$

$$k_1 = f(x, y)$$

$$a_2 = b_{21} \qquad k_2 = f(x + a_2h, y + hb_{21}k_1)$$

$$k_3 = f(x + ha_3, y + h(a_3 - b_{32})k_1 + b_{32}k_2)$$

$$a_3 = b_{31} + b_{32}$$

Onde os coeficientes são solução das equações:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 + c_3 = 1 \\ c_2a_2 + c_3a_3 = \frac{1}{2} \\ c_3b_{32}a_2 = \frac{1}{6} \\ c_2a_2^2 + c_3a_3^2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 3 (Método de Heun)

O **método de Heun** é obtido considerando

$$\begin{cases} c_1 + c_2 + c_3 = 1 \\ c_2 a_2 + c_3 a_3 = \frac{1}{2} \\ c_3 b_{32} a_2 = \frac{1}{6} \\ c_2 a_2^2 + c_3 a_3^2 = \frac{1}{3} \end{cases} \Rightarrow \quad c_1 = \frac{1}{4} \quad c_2 = 0 \quad c_3 = \frac{3}{4} \qquad a_3 = \frac{2}{3} \quad a_2 = \frac{1}{2} \quad b_{32} = \frac{2}{3}$$

No método de Heun, temos então:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3)$$

$$k_1 = f(x_k, y_k)$$

$$k_2 = f\left(x_k + \frac{1}{3}h, y_k + \frac{1}{3}hk_1\right)$$

$$k_3 = f\left(x_k + \frac{2}{3}h, y_k + \frac{2}{3}hk_2\right)$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 3 (Método de Nystrom)

O **método de Nystrom** é obtido considerando

$$\begin{cases} c_1 + c_2 + c_3 = 1 \\ c_2 a_2 + c_3 a_3 = \frac{1}{2} \\ c_3 b_{32} a_2 = \frac{1}{6} \\ c_2 a_2^2 + c_3 a_3^2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

$$c_1 = \frac{1}{4} \qquad c_2 = c_3 \qquad c_3 = \frac{3}{8}$$

$$a_2 = a_3 \qquad a_3 = \frac{2}{3} \qquad b_{32} = \frac{2}{3}$$

No método de Nystrom, temos então:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{4}\left(k_1 + \frac{3}{2}(k_2 + k_3)\right)$$

$$k_1 = f(x_k, y_k)$$

$$k_2 = f\left(x_k + \frac{2}{3}h, y_k + \frac{2}{3}hk_1\right)$$

$$k_3 = f\left(x_k + \frac{2}{3}h, y_k + \frac{2}{3}hk_2\right)$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 4

Dois métodos de Runge-Kutta de ordem 4 são definidos pelas equações abaixo:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6}\Big(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4\Big)$$

$$k_1 = f(x_k, y_k)$$

$$k_2 = f\Big(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_1\Big)$$

$$k_3 = f\Big(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_2\Big)$$

$$k_4 = f(x_k + h, y_k + hk_3)$$

Segundo método:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{8}\Big(k_1 + 3(k_2 + k_3) + k_4\Big)$$

$$k_1 = f(x_k, y_k)$$

$$k_2 = f\Big(x_k + \frac{1}{3}h, y_k + \frac{1}{3}hk_1\Big)$$

$$k_3 = f\Big(x_k + \frac{2}{3}h, y_k - \frac{1}{3}hk_1 + hk_2\Big)$$

$$k_4 = f(x_k + h, y_k + hk_1 - hk_2 + hk_3)$$

Atividades práticas

1. Implemente um código utilizando o método de Euler para resolver PVI abaixo, considerando h = 0.1 , 10 pontos e x em [0.0, 1.0]:

$$y'(x) = x - 2y$$
$$y(0) = 1$$

Sabendo que a solução analítica é dada por: $$y = \frac{1}{4}(5e^{-2x} + 2x - 1)$$

Faça um gráfico dos pontos obtidos pelo método de Euler e da função analítica.

Atividades práticas

2. Implemente os métodos de Euler modificado e melhorado para resolver PVI abaixo, considerando h = 0.125. Calcule y(1) e y(2).

$$y'(x) = \frac{2y}{x+1} + (x+1)^3$$
$$y(0) = 3$$

3. Implemente os métodos de Heun e Nystrom para a solução do problema da questão 2. Calcule novamente y(1) e y(2).

4. Implemente algum dos métodos de Runge-Kutta de 4 ordem para solução de

$$y'(x) = -y + x + 2$$
$$y(0) = 2$$

Considere h = 0.1

Calcule y(0.3)

Atividades práticas

5. Traga para a próxima aula algum exemplo de aplicação na Física dos métodos vistos nesta aula.