Métodos Computacionais I

Instituto de Física
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. Murilo Rangel

Semestre 2012-1

Equações diferenciais

- Método de Euller

- Método de Heun

- Método do Ponto Central

- Métodos de Runge-Kutta

Ver Cap. 7 da Apostila

Equações diferencias

- Equações Diferenciais são fundamentais na Física:
  - Lei de Newton
  - Segunda lei da Ternodinâmica
  - Equações de Maxwell
  - Equação de Schrœdinger
  - Equação de Dirac
- Elas podem ser classificadas de várias formas

Ordinárias	Primeira ordem	Condições iniciais
Parciais	Segunda ordem	Condições de contorno

- Sistemas de equações

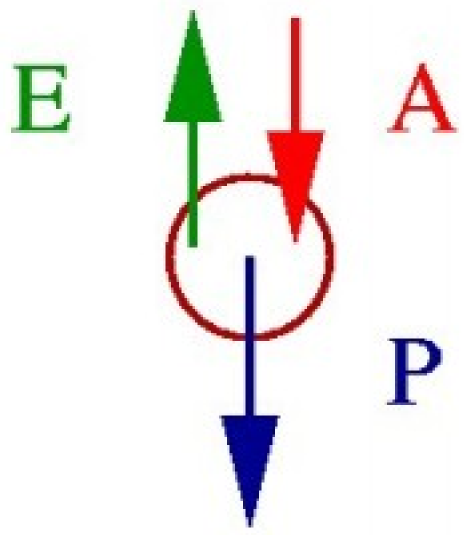
- Equações de primeira ordem:

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

- Exemplo: Cálculo da velocidade de uma bolha de ar em um frasco de xampu. *U.M. Neves, Rev. Bras. de Ens. de Fís - v28, p1 (2006)*

$$m_{ar}\frac{d\vec{v}}{dt} = (-m_{ar}g + m_x g - bv^r)\hat{k}$$

$$\frac{dv}{dt} = Cv^r + D$$



Aproximando a derivada:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \approx \frac{y(x+\Delta x) - y(x)}{\Delta x}$$

- Sabemos:

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

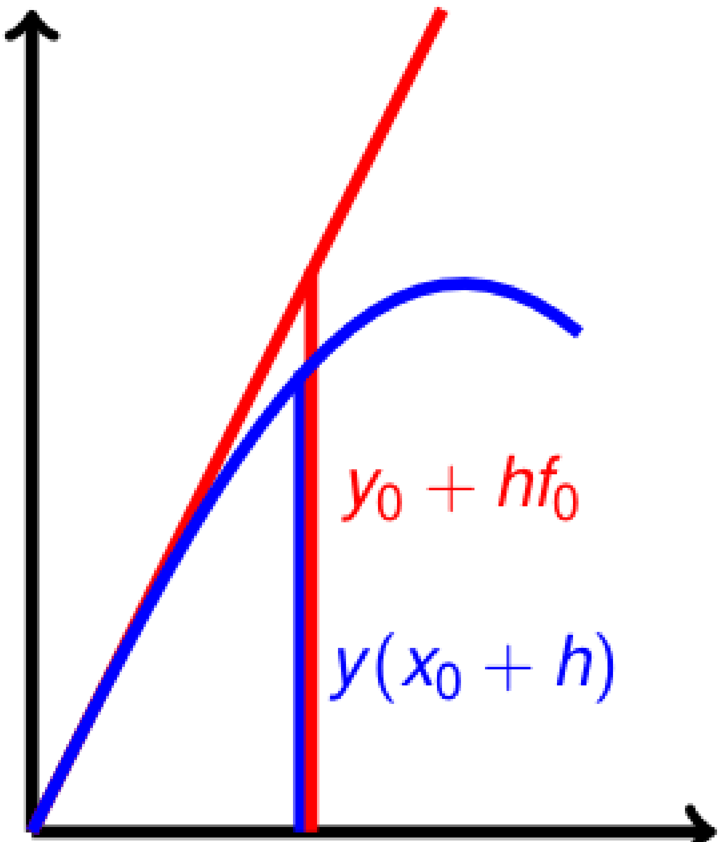
- Aproximando a função por um segmento de reta:

$$y(x_0 + h) \approx y(x_0) + hy'(x_0)$$

$$y(x_0+h) \approx y(x_0)+h\, f(x_0, y(x_0))$$

ou

$$y(x_0 + h) \approx y_0 + h\, f_0$$



Iteragindo ...

- Sabemos:

$$y'(x) = f(x, y) \quad \text{e} \quad y(x_0)$$

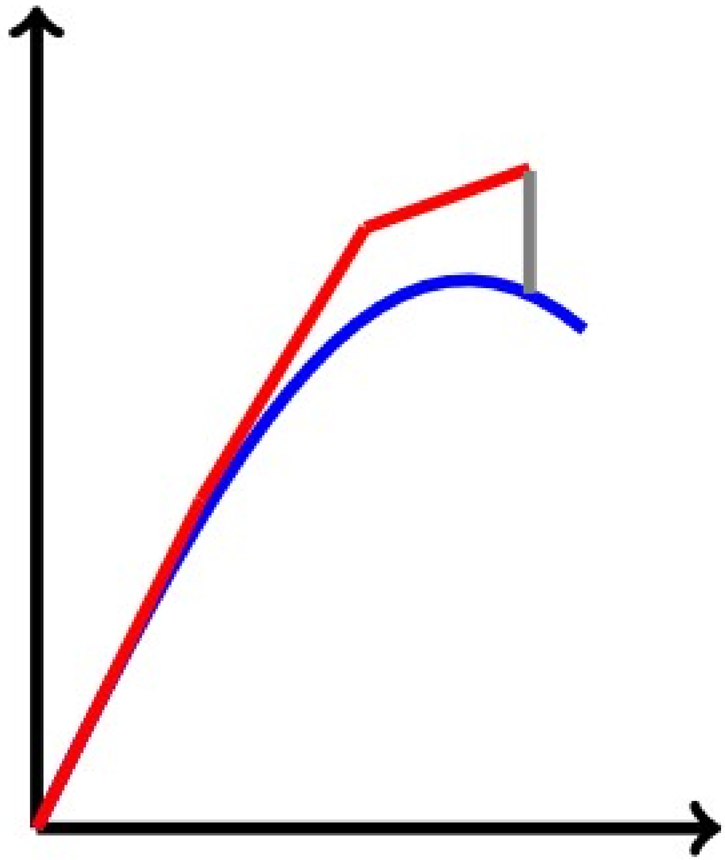
- Repetindo a operação:

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + h\, f(x_i, y(x_i))$$

$$y_{i+1} = y_i + h\, f(x_i, y_i)$$

- Incerteza do método

$$\Delta_i = |y(x_i) - y_i|$$



Equações de segunda ordem

Questão: Encontrar y(x), tal que,

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

$y(0) = A$

$y'(0) = B$

Solução: Reescrevemos

$y' = z$

$z' = y''$

Teremos duas equações diferenciais de primeira ordem

$z' = g(z,x)$

$y' = h(y,x)$

Resolvemos as duas equações simultaneamente

Exemplo

Encontre x(t) usando o método de Euler, tal que:

$x'' = w^2 * x$

onde

$w=23$

$x(t=0) = 0.1$

$x'(t=0) = 0$

compare com a solução exata para diferentes passos de discretização h

Método de Heun

$y(x_{i+1}) = y(x_i) + f(x_i,y_i) * h$

podemos melhorar o método de Euler, trocando
$f(x_i,y_i)$ por $f_M = 0.5*(f(x_i,y_i)+f(x_{i+1},y_{i+1}))$

Usando a média da derivada, a curvatura de y(x) é melhor representada pelo método numérico.

Note, que um passo adicional é necessário. Primeiro, calculamos $y(x_{i+1})$ pelo método de Euler, depois aplicamos o método de Heun.

Exercício: Use o exemplo da página 8 para provar que o método de Heun encontra valores de y(t) mais precisos que o método de Euler para um dado passo de discretização h.

Método do Ponto Central

Em vez de usarmos a derivada no ponto (x_0, y_0), usamos a derivada no ponto intermediário

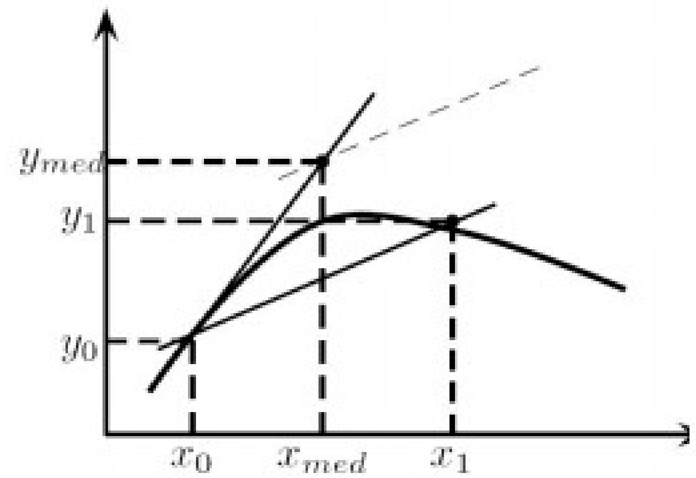
$x_{med} = x_0 + \Delta x/2$.

$y_{i+1} = y_i + f(x_{med}, y_{med})\Delta x$

Mas não sabemos y_{med}

➜ Usamos Euler simples:

$y_{med} = y_i + f(x_i, y_i)\Delta x/2$



(Usamos Euler simples duas vezes para ir de x_i a x_{i+1})

Exercício: Use o exemplo da página 8 para provar que o método de Ponto Central encontra valores de y(t) mais precisos que o método de Euler para um dado passo de discretização h.

Métodos de Runge-Kutta

Vimos que o método de Euler pode ser melhorado quando usamos a informação sobre a derivada em pontos intermediários do intervalo, isto é, levamos em conta a curvatura de $y(x)$. Vamos generalizar o método tomando um ponto intermediário qualquer entre x_i e x_{i+1} e que usa a média ponderada das derivadas, de forma que:

$$y_{i+1} = y_i + \bar{f}\Delta x$$

onde $\bar{f} = af_i + bf_{i'}$

a e b são os pesos,

f_i é a tangente no ponto (x_i, y_i),

$f_{i'}$ é a tangente num ponto intermediário

$f_{i'} = f(x_i + \alpha\Delta x,\ y_i + \beta f_i \Delta x)$

onde α e β especificam a posição do ponto intermediário

Estes parâmetros não são totalmente livres. Se compararmos este método com a expansão em série de Taylor da solução real $y(x)$ obteremos as relações entre eles.

Uma escolha possível é $a = 0 \quad b = 1 \quad \alpha = \beta = \frac{1}{2}$ ➜ Método do ponto central

Outra escolha: $a = b = \frac{1}{2} \quad \alpha = \beta = 1$ ➜ Método de Euler aperfeiçoado

Ambos os algoritmos são conhecidos como métodos de Runge-Kutta de segunda ordem porque o cálculo de y_{i+1} inclui termos $\mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Tarefa 10

Para entregar em aula:

1) Escreva uma função que calcule y(x) dado N equações diferencais de primeira ordem acopladas usando o método de Runge-Kutta generalizado (**rungekutta.h**).

A função deve obedecer o protótipo abaixo:

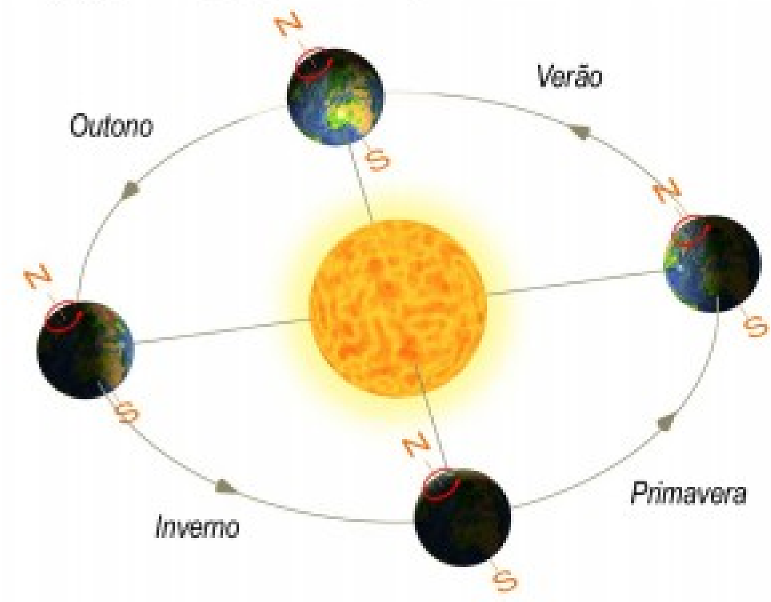
void rungekutta(double *rk, int N, double *y, double x0, double h, void (*dydx)(double x, double *y, double *f))

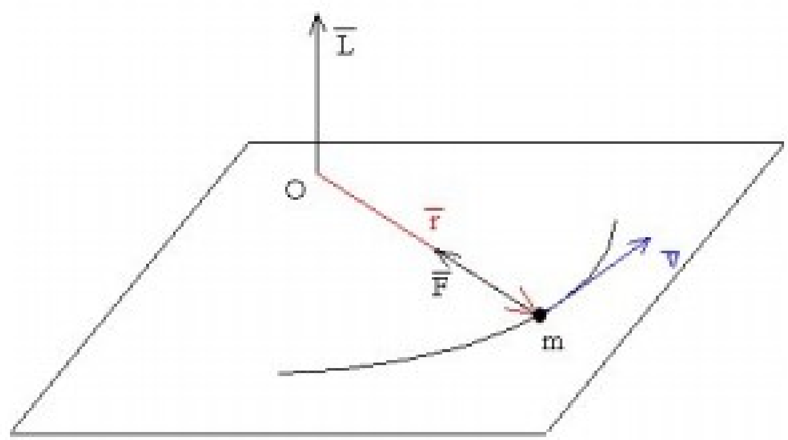
onde
rk são os parâmetros do método de runge-kutta
N é o número de funções acopladas
y são os valores iniciais, os quais devem ser atualizados dentro da função
x0 é o valor inicial de x
h é o passo de discretização
dydx é uma função que contém as equações diferencias acopladas

Tarefa 10

Para semana que vem:

❇ Considere a força central de atração gravitacional entre a Terra e o Sol. Considere a posição do Sol na origem de um eixo de coordenadas e escreva a equação diferencial dada pela segunda lei de Newton para o movimento da Terra. Escreva essa equação como um sistema de equações diferenciais de primeira ordem em coordenadas cartesianas. Dados: $G = 6.67 \times 10^{-11}\, Nm^2/kg^2$, $M_{sol} = 1.98 \times 10^{30}\, kg$, $M_{Terra} = 5.98 \times 10^{24}\, kg$, $R_{sol} = 6.96 \times 10^{8}\, m$, $R_{Terra} = 6.37 \times 10^{6}\, m$.





$$\vec{F} = -\frac{G\, M_{sol}\, M_{Terra}}{r^2}\hat{r}$$

Tarefa 10

escreva um programa `kepler.c` que calcule a trajetória da Terra, dado que, em um momento inicial t=0, a Terra encontra-se a uma distância $x = 1.496 \times 10^{11} m$ do Sol, ou seja, na posição (x,0,0), com uma velocidade inicial igual a $2.97 \times 10^4 m/s$ (aproximadamente igual Ã velocidade orbital média da Terra) na direção positiva do eixo y. O programa deve ler do teclado o valor do passo e as condições iniciais (componentes x,y,z do vetor posição e velocidade, nessa ordem) e imprimir na tela os valores de x, y, z e v_x, v_y v_z para valores de t de 0 até 1 ano, com o seguinte formato:

t (s)	x(m)	y(m)	z(m)	v_x(m/s)	v_y(m/s)	v_z (m/s)
0	1.496×10^{11}	0	0	0	2.97×10^4	0
...						

Usando a saída do programa, faça um gráfico da trajetória da Terra no plano xy ao decorrer de 1 ano, em passos iguais a 1 hora, usando o método de Euler (**euler.gif**), o método do ponto central **(pontocentral.gi**f) e o de método de Heun (**heun.gif**).