Introdução à Física Computacional II (4300318)

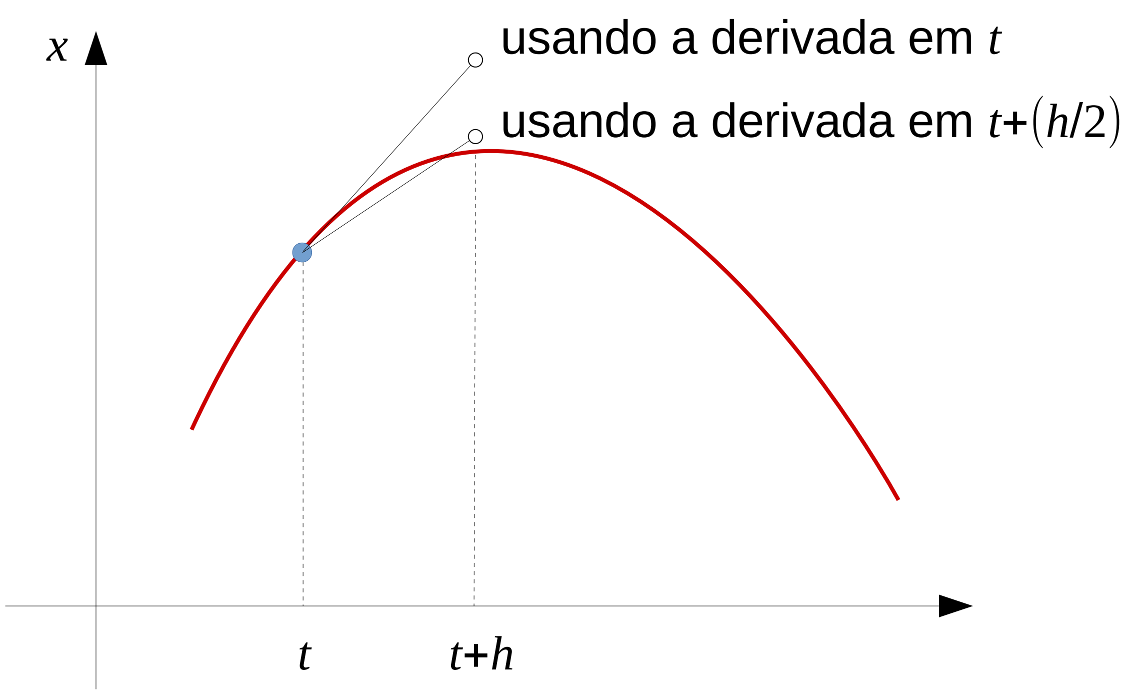
Prof. André Vieira
apvieira@if.usp.br
Sala 3120 – Edifício Principal

Aula 2

Solução numérica de equações diferenciais: método de Runge-Kutta (4ª. ordem) e soluções ao longo de intervalos infinitos

O método de Runge–Kutta ($2^{\underline{a}}$ ordem)

- Podemos tentar melhorar o método de Runge–Kutta de segunda ordem utilizando a derivada calculada em um ponto intermediário entre t e $t+h$. Como decidir que ponto escolher?



O método de Runge–Kutta (2ª ordem)
Dedução alternativa da equação de recorrência

- Queremos

$$k_1 = h f(x_n, t_n),$$
$$k_2 = h f(x_n + B k_1, t_n + A h),$$
$$x_{n+1} = x_n + a k_1 + b k_2,$$

com $t_n \equiv t_0 + nh$, $x_n \equiv x(t_n)$, de tal forma que o erro cometido em um passo seja cúbico em h. Mas

$$x_{n+1} = x_n + h\left(\frac{dx}{dt}\right)_{t_n} + \tfrac{1}{2}h^2\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right)_{t_n} + O(h^3)$$

e

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{df(x,t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} = f\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t},$$

O método de Runge–Kutta (2ª ordem)
Dedução alternativa da equação de recorrência

- Queremos

$$k_1 = hf(x_n, t_n),$$
$$k_2 = hf(x_n + Bk_1, t_n + Ah),$$
$$x_{n+1} = x_n + ak_1 + bk_2,$$

Note que agora, com A e B, relaxamos o vínculo de que a derivada intermediária seja calculada no meio do intervalo.

com $t_n \equiv t_0 + nh$, $x_n \equiv x(t_n)$, de tal forma que o erro cometido em um passo seja cúbico em h. Mas

$$x_{n+1} = x_n + h\left(\frac{dx}{dt}\right)_{t_n} + \tfrac{1}{2}h^2\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right)_{t_n} + O(h^3)$$

e

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{df(x,t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} = f\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t},$$

O método de Runge–Kutta (2ª ordem)

Dedução alternativa da equação de recorrência

e assim

$$x_{n+1} = x_n + \left[h f + \tfrac{1}{2} h^2 \left(f \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right] (x_n, t_n) + O(h^3),$$

enquanto

$$k_2 = h \left[f + B k_1 \frac{\partial f}{\partial x} + A h \frac{\partial f}{\partial t} \right] (x_n, t_n) + O(h^3).$$

Portanto,

$$x_{n+1} = x_n + a k_1 + b h \left[f + B k_1 \frac{\partial f}{\partial x} + A h \frac{\partial f}{\partial t} \right] (x_n, t_n) + O(h^3).$$

O método de Runge–Kutta (2ª ordem)

Dedução alternativa da equação de recorrência

$$x_{n+1} = x_n + \left[h f + \tfrac{1}{2} h^2 \left(f \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right] (x_n, t_n) + O(h^3)$$

$$x_{n+1} = x_n + \left[(a+b) h f + b h^2 \left(B f \frac{\partial f}{\partial x} + A \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right] (x_n, t_n) + O(h^3)$$

Comparando as potências de h:

$$a + b = 1 \qquad b B = \tfrac{1}{2} \qquad b A = \tfrac{1}{2}$$

Uma escolha possível (mas não única!) é

$$a = 0, \;\; b = 1; \quad B = A = \tfrac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\begin{gathered} k_1 = h f(x_n, t_n) \\ k_2 = h f\left(x_n + \tfrac{1}{2} k_1, t_n + \tfrac{1}{2} h\right) \\ x_{n+1} = x_n + k_2 \end{gathered}}$$

O método de Runge–Kutta (2ª ordem)

Dedução alternativa da equação de recorrência

$$x_{n+1} = x_n + \left[hf + \tfrac{1}{2}h^2 \left(f\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right](x_n, t_n) + O(h^3)$$

$$x_{n+1} = x_n + \left[(a+b)hf + bh^2 \left(Bf\frac{\partial f}{\partial x} + A\frac{\partial f}{\partial t} \right) \right](x_n, t_n) + O(h^3)$$

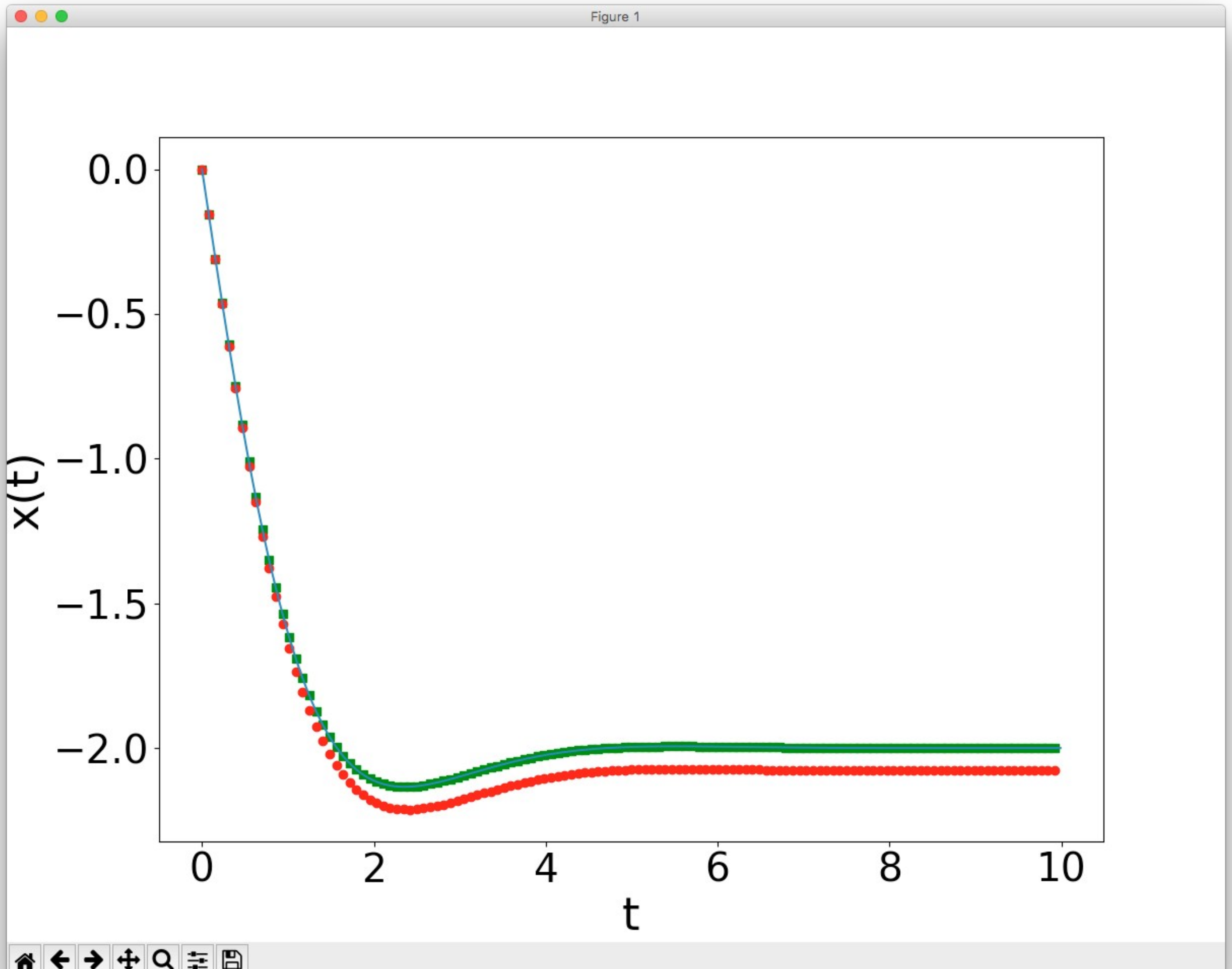
Comparando as potências de h:

$$a+b=1 \qquad bB=\tfrac{1}{2} \qquad bA=\tfrac{1}{2}$$

Outra escolha possível é

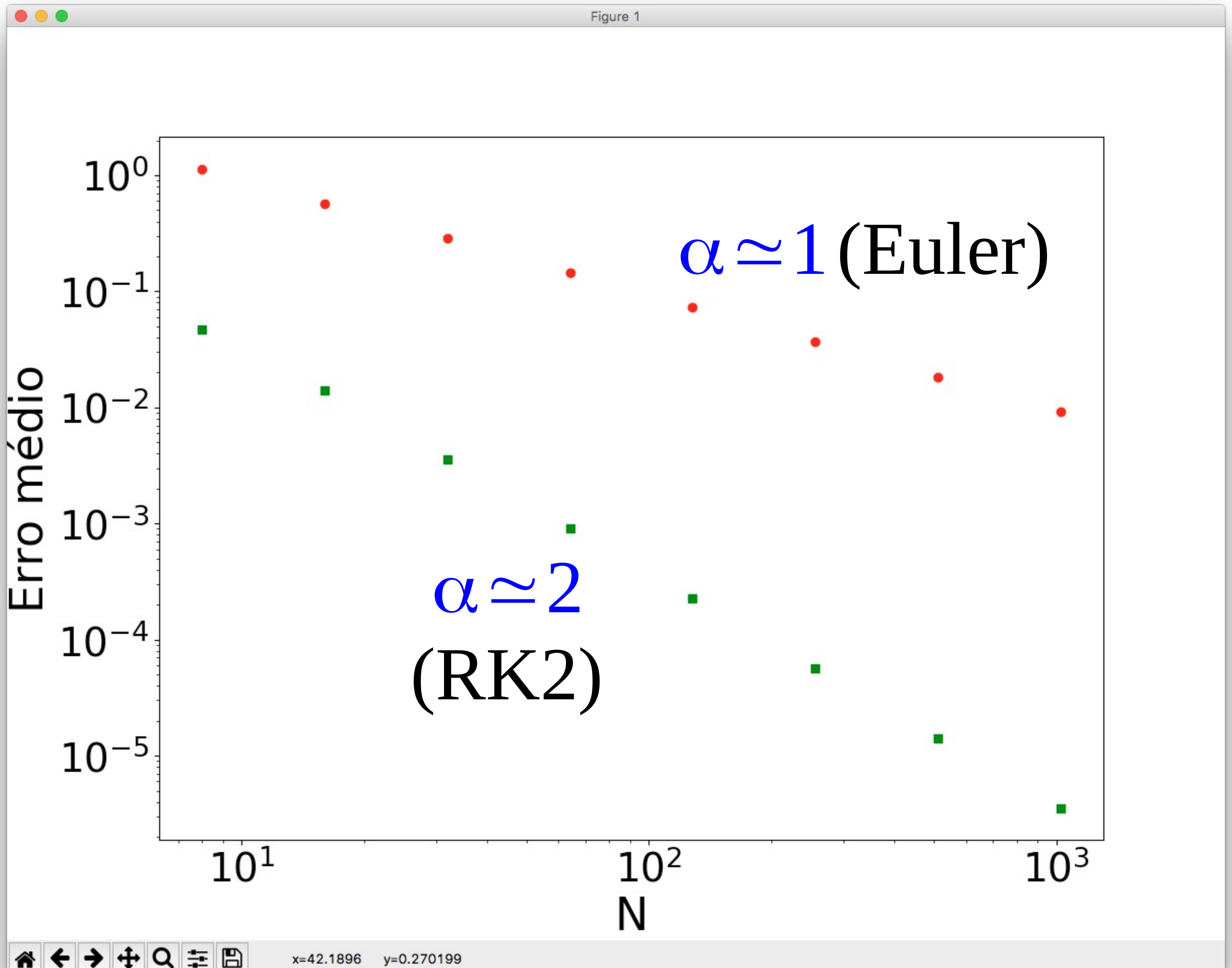
$$a=b=\tfrac{1}{2}; \quad B=A=1 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\begin{gathered} k_1 = hf(x_n, t_n) \\ k_2 = hf(x_n + k_1, t_n + h) \\ x_{n+1} = x_n + \tfrac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{gathered}}$$

Exemplo 1 (exercício da aula 1 com a forma modificada de RK2)



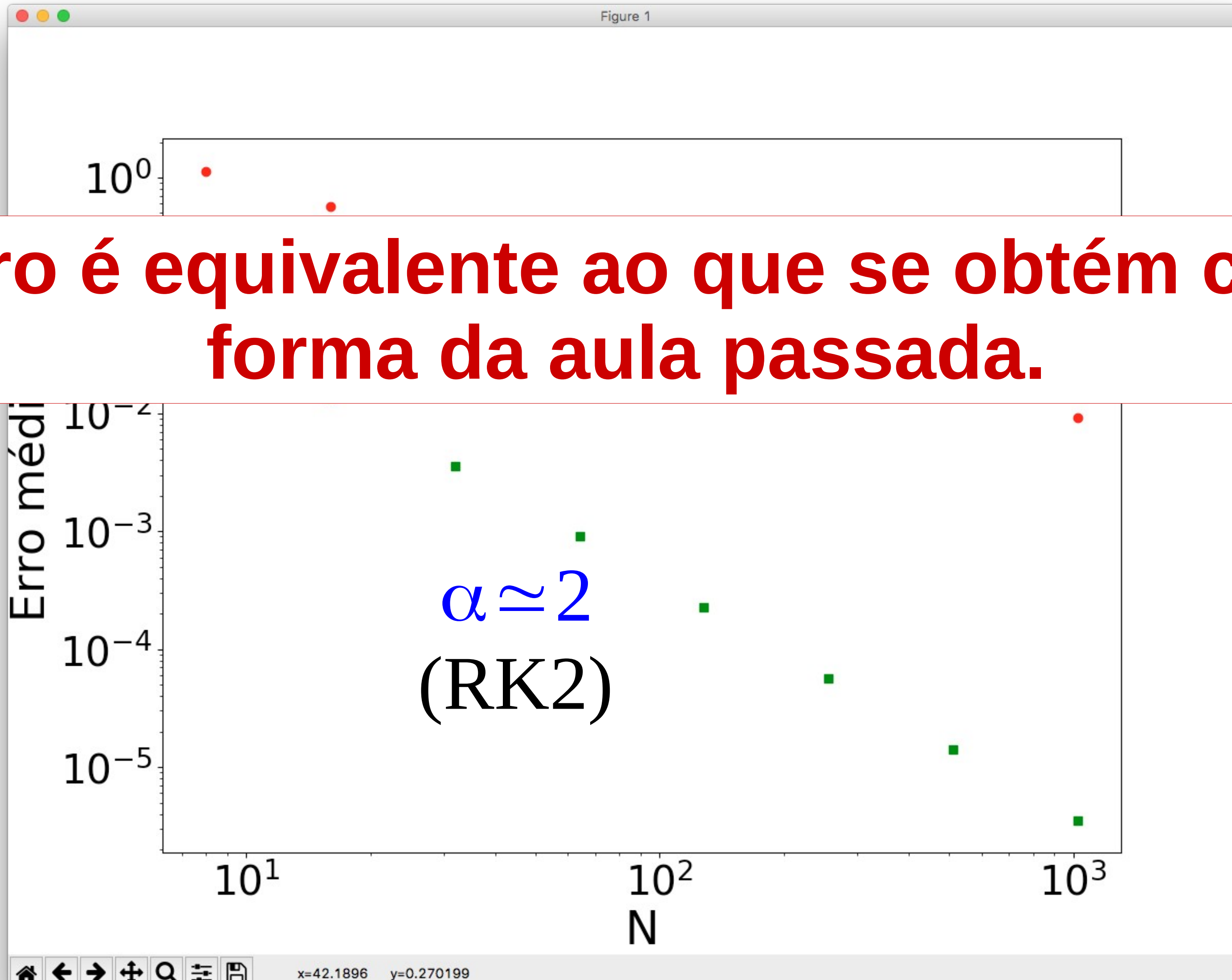
`gamma = 1.0, N = 128`

Exemplo 1 (exercício da aula 1 com a forma modificada de RK2)



gamma = 1.0

Exemplo 1 (exercício da aula 1 com a forma modificada de RK2)



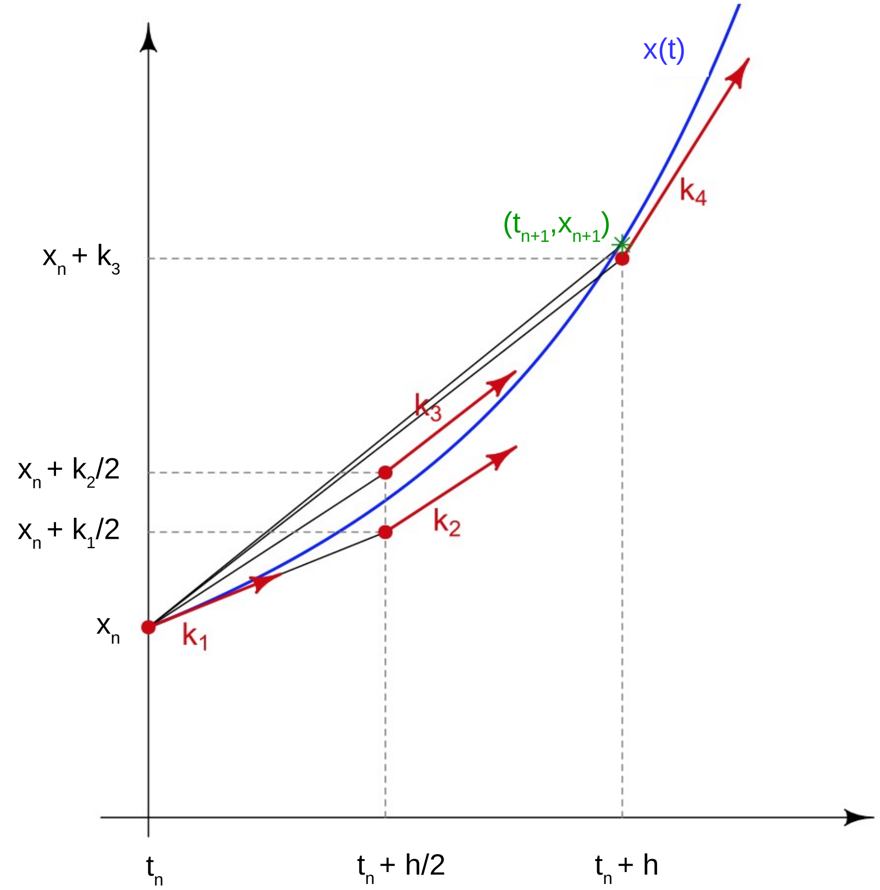
O erro é equivalente ao que se obtém com a forma da aula passada.

gamma = 1.0

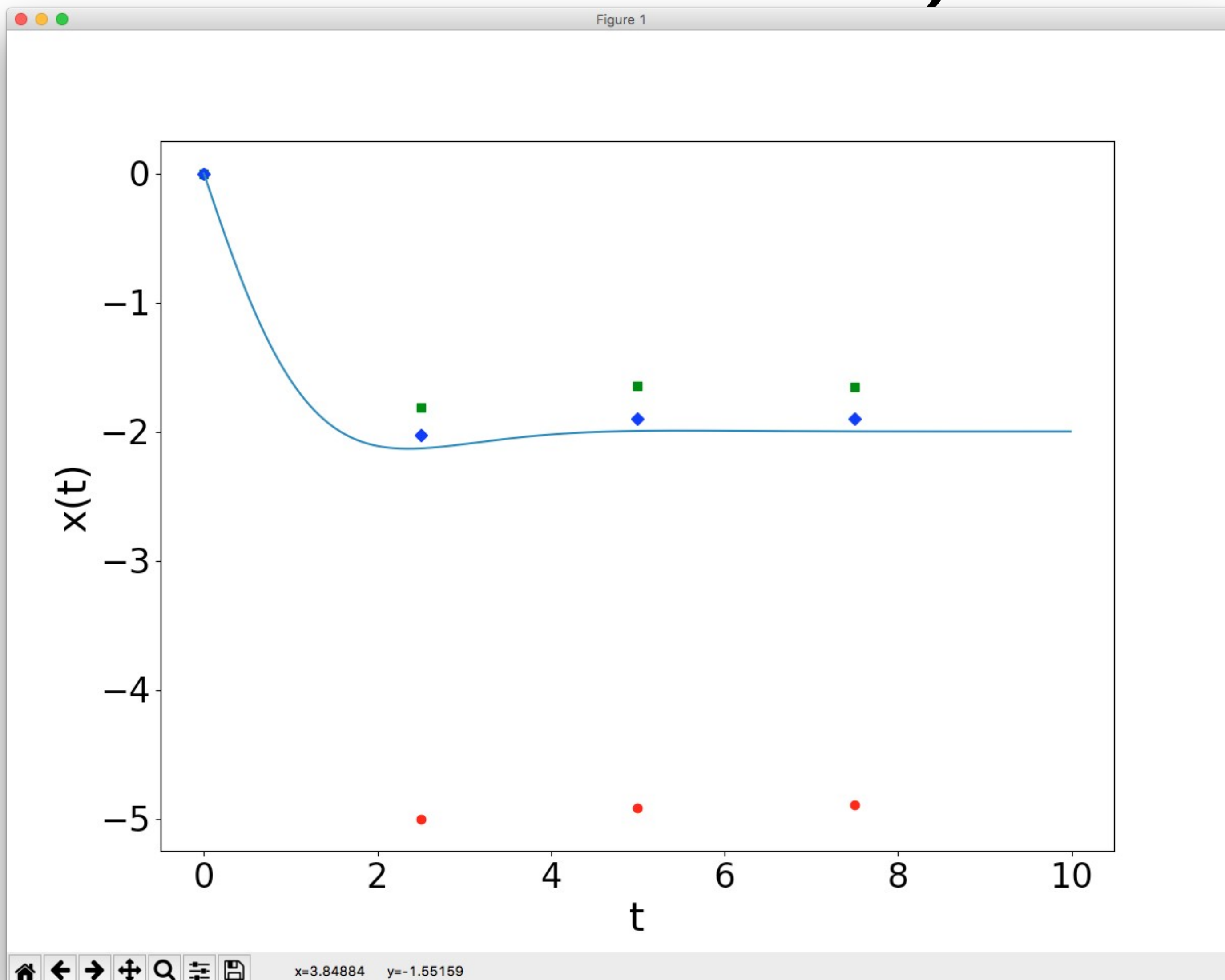
O método de Runge–Kutta (4ª ordem)

- Analogamente ao que foi feito no caso de RK2, é possível obter um erro proporcional à quinta potência de h usando

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

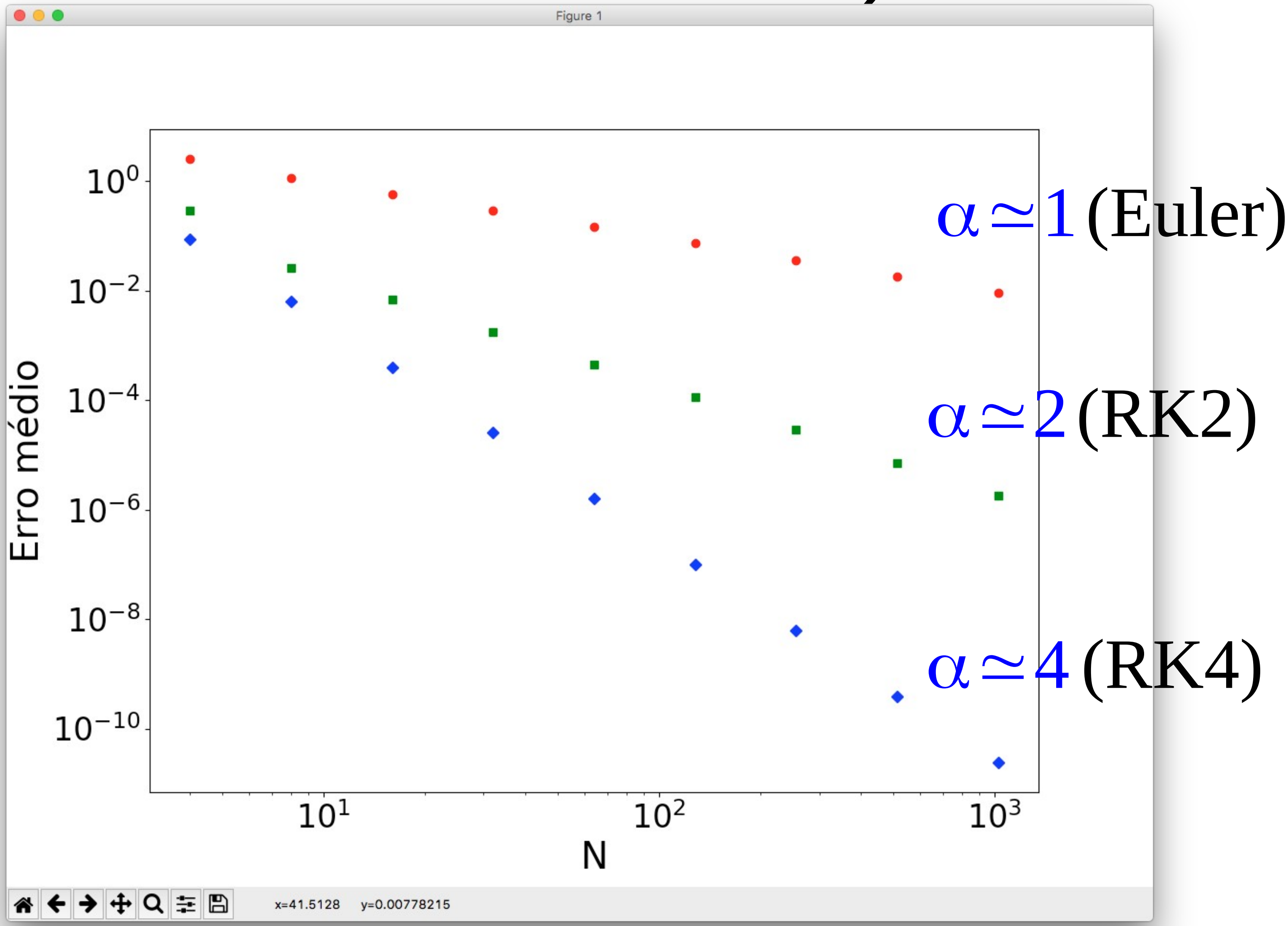


Exemplo 2 (exercício da aula 1 incluindo RK4)



gamma = 1.0, N = 4

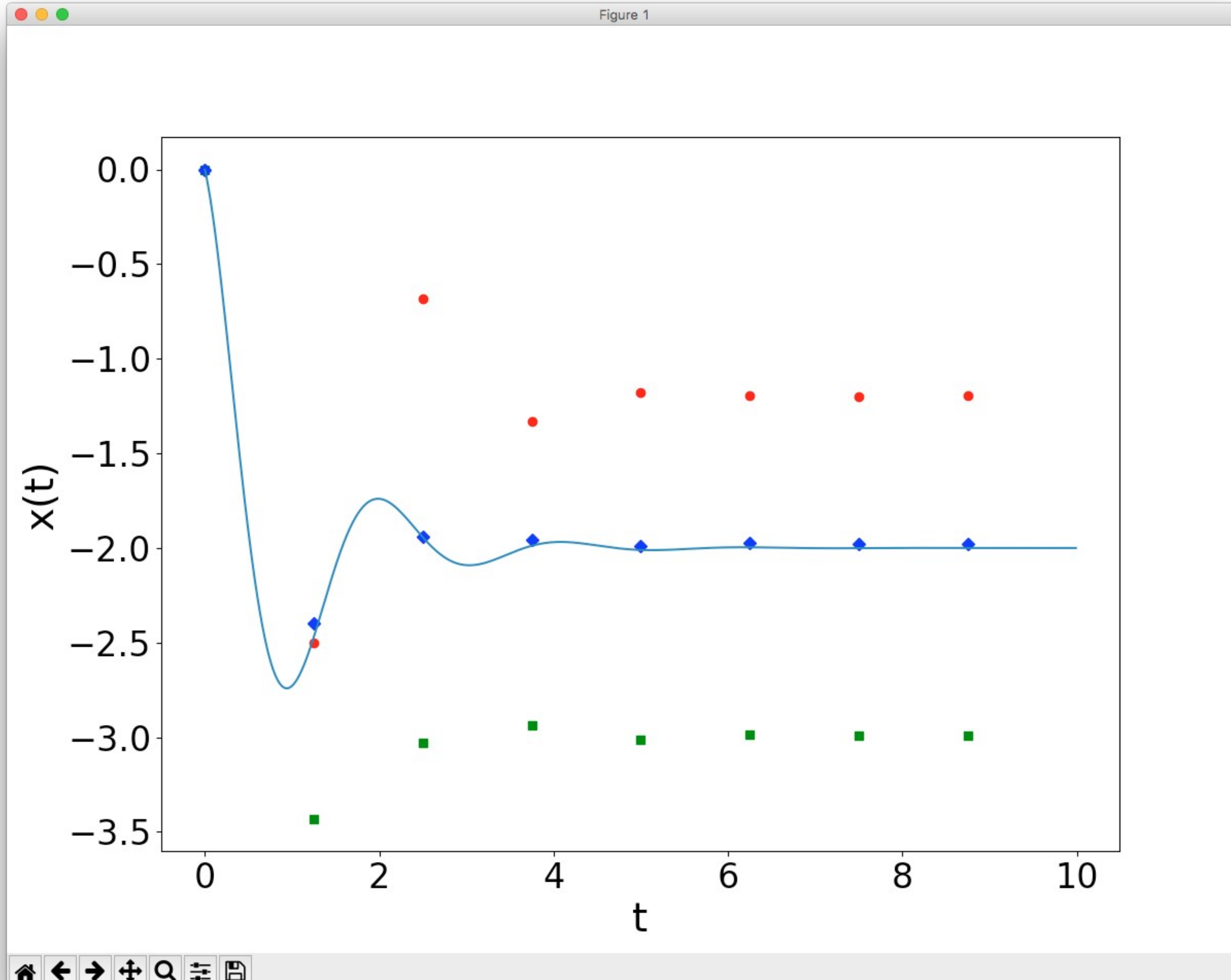
Exemplo 2 (exercício da aula 1 incluindo RK4)



gamma = 1.0

Exemplo 3

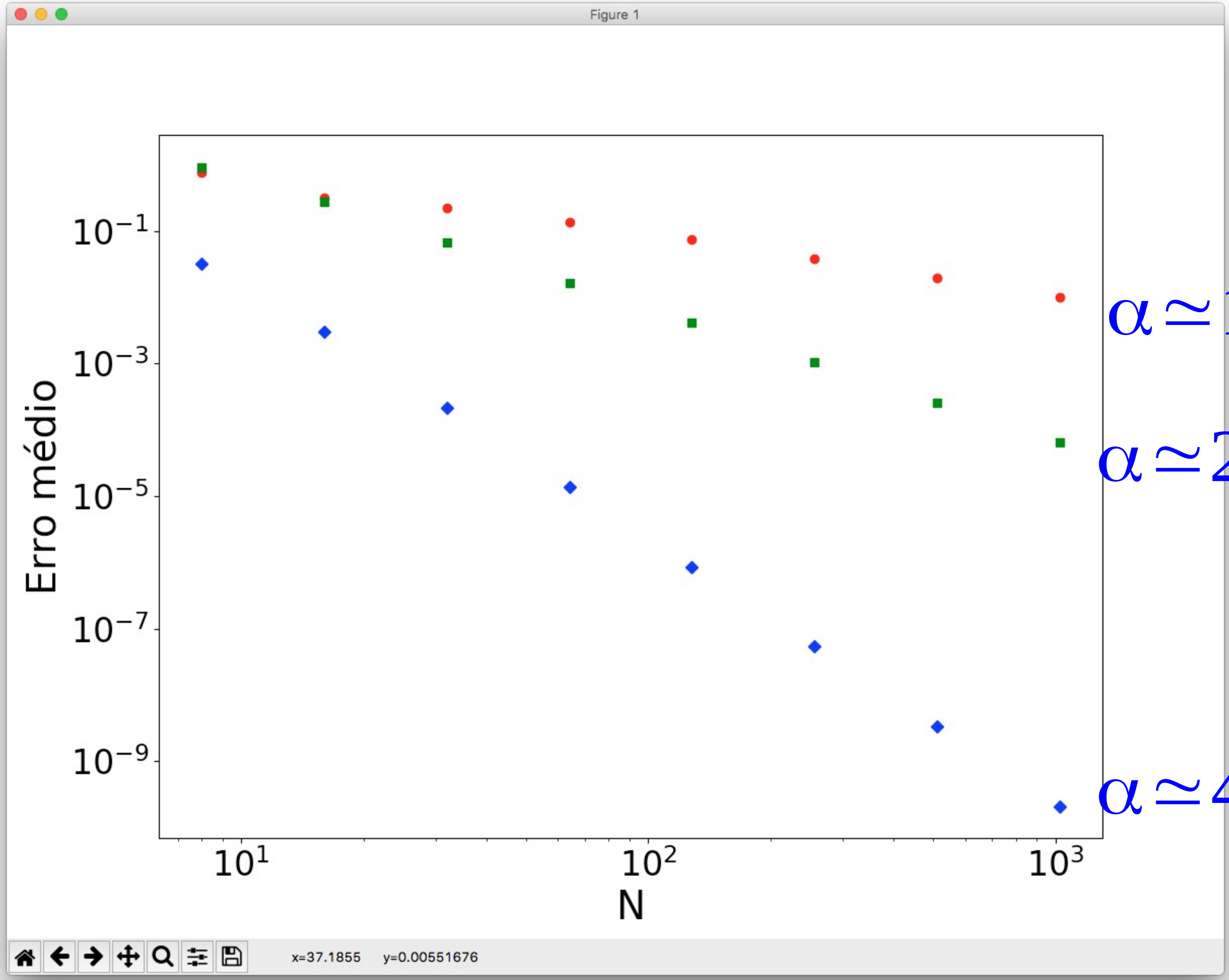
$$\frac{dx}{dt} = -2\exp(-\gamma t)\left[\gamma \cos(\omega t) + \omega\,\mathrm{sen}(\omega t)\right]$$



gamma = 1.0, omega = 3.0, N = 8

Exemplo 3

$$\frac{dx}{dt} = -2\exp(-\gamma t)[\gamma\cos(\omega t) + \omega\,\mathrm{sen}(\omega t)]$$



$\alpha \simeq 1$ (Euler)

$\alpha \simeq 2$ (RK2)

$\alpha \simeq 4$ (RK4)

gamma = 1.0, omega = 3.0

Soluções em intervalos infinitos

- Até agora apenas analisamos soluções que partem de um ponto inicial e percorrem um intervalo finito. Mas, em física, muitas vezes buscamos soluções que incluem valores arbitrariamente grandes da variável independente.

Soluções em intervalos infinitos

- Até agora apenas analisamos soluções que partem de um ponto inicial e percorrem um intervalo finito. Mas, em física, muitas vezes buscamos soluções que incluem valores arbitrariamente grandes da variável independente.
- Uma saída é realizar uma mudança de variável para que tenhamos que lidar apenas com intervalos finitos.

Soluções em intervalos infinitos

- Por exemplo, podemos definir

$$u=\frac{t}{1+t} \quad \Rightarrow \quad t=\frac{u}{1-u}$$

Note que, enquanto t vai de 0 a infinito, u vai de 0 até 1.

e transformar a equação diferencial:

$$\frac{dx}{dt}=f(x,t) \quad \Rightarrow \quad \frac{dx}{du}=\frac{dt}{du}f(x,t(u))$$

$$\frac{dt}{du}=\frac{1}{(1-u)^2}$$

$$\boxed{\frac{dx}{du}=\frac{1}{(1-u)^2}f\left(x,\frac{u}{1-u}\right)\equiv g(x,u)}$$

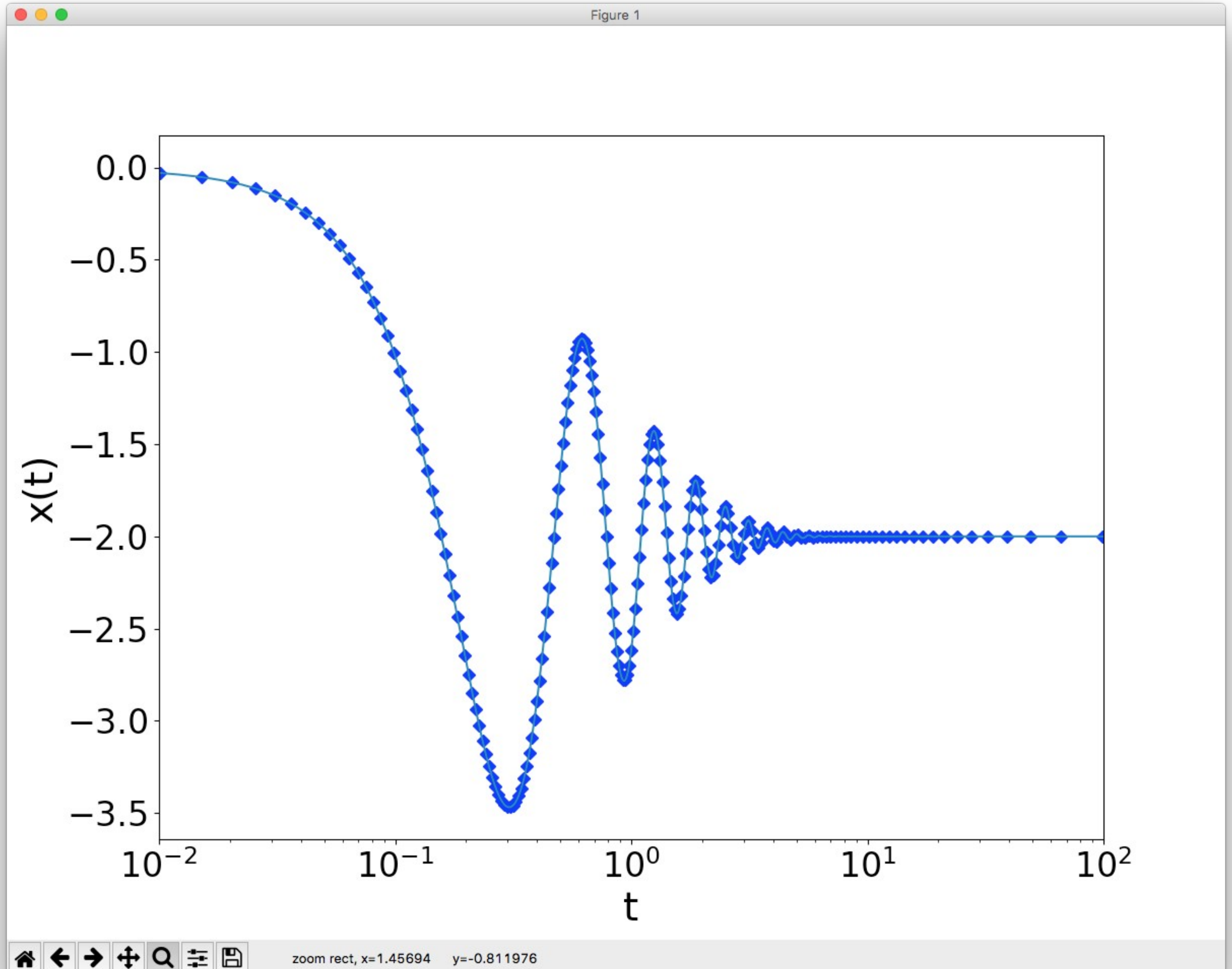
Exemplo 4

$$\frac{dx}{dt} = -2\exp(-\gamma t)[\gamma\cos(\omega t) + \omega\,\mathrm{sen}(\omega t)]$$

```
gama, omega = 1.0, 10.0

def g(x,u):
    t = u/(1.0-u)
    f = -2.0*exp(-gama*t)*(gama*cos(omega*t)+omega*sin(omega*t))
    return f/(1.0-u)**2

def passo_rk4(f,x,t,h):            # Calcula um passo no método de RK4
    k1 = h*f(x,t)
    k2 = h*f(x+0.5*k1,t+0.5*h)
    k3 = h*f(x+0.5*k2,t+0.5*h)
    k4 = h*f(x+k3,t+h)
    return (k1+2.0*(k2+k3)+k4)/6.0

def sol_exata(t,a,xa):
    b = xa - 2.0*exp(-gama*a)*cos(omega*a)
    return 2.0*exp(-gama*t)*cos(omega*t) + b

a = 1.e-9           # Início do intervalo
b = 1.0-1.0e-9      # Final do intervalo
xa = 0.0            # Condição inicial, ou seja, x(a)

N_exato = 1000      # Número de pontos para a sol. exata
h_exato = (b-a)/N_exato

t_exato = []
x_exato = []
u_exato = arange(a,b,h_exato)
for u in u_exato:  # Criando a lista com a solução exata
    t=u/(1.0-u)
    t_exato.append(t)
    x_exato.append(sol_exata(t,a,xa))

N = 200              # Número de passos da integração numérica
h = (b-a)/N          # Tamanho do passo da integração

xrk4 = xa
u_rk4 = arange(a,b,h)
t_rk4 = []
x_rk4 = []

for u in u_rk4:     # Realizando a integração numérica
    t=u/(1.0-u)
    t_rk4.append(t)
    x_rk4.append(xrk4)
    xrk4 += passo_rk4(g,xrk4,u,h)
```

Exemplo 4

$$\frac{dx}{dt}=-2\exp(-\gamma t)\left[\gamma\cos(\omega t)+\omega\,\mathrm{sen}(\omega t)\right]$$



gamma = 1.0, omega = 10.0, N = 200

Exercícios no moodle

O objetivo deste exercício é quantificar a dependência do erro associado ao métodos de Runge-Kutta de quarta ordem com os parâmetros da equação diferencial, fixado o tamanho do passo de integração.

Escreva um programa que integre numericamente a equação diferencial

$$\frac{dx}{dt} = -2\exp(-\gamma t)\left[\gamma\cos(\omega t) + \omega \operatorname{sen}(\omega t)\right],$$

no intervalo entre $t = 0$ e $t = 10$, utilizando tanto o método Runge-Kutta de quarta ordem. Utilize como condição inicial $x(0) = 0$. Além de realizar essas integrações numéricas, seu programa deve calcular o erro médio associado ao cálculo, definido como

$$\text{erro} \equiv \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\left[x_{\text{num}}(t_n) - x_{\text{exato}}(t_n)\right]^2},$$

em que $t_n = nh$, sendo h o passo de integração, enquanto $x_{\text{num}}(t_n)$ e $x_{\text{exato}}(t_n)$ representam, respectivamente, os valores de $x(t)$ calculados pela integração numérica e pela solução exata até $t = t_n$. Aqui, N representa o número máximo de passos de tempo utilizados na integração, que deve ser fixado em $N = 100$. A solução exata da equação diferencial, como pode ser facilmente verificado por substituição direta ou por integração analítica, é

$$x_{\text{exato}}(t) = x(0) - 2 + 2\exp(-\gamma t)\cos(\omega t).$$

Em seu programa, crie uma lista para armazenar os valores dos erros para $\omega \in \{1.0, 2.0, 4.0, 16.0, 32.0, 64.0, 128.0, 256.0\}$, e a utilize para fazer um gráfico log-log que mostre a dependência desses erros com ω. Você deve perceber uma mudança qualitativa no gráfico entre as regiões $\omega < 32.0$ e $\omega > 32.0$. A que você atribui essa mudança?

Exercícios no moodle

Esta questão vale 1 ponto de bônus no EP 1.

A transformação de coordenadas discutida na aula não é a única que permite integrar numericamente uma equação diferencial em um intervalo infinito. Uma das infinitas demais opções é a transformação

$$u = \tanh t.$$

Utilize essa transformação para integrar numericamente a equação diferencial

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{x^2 + t^2}$$

entre $t = 0$ e $t = \infty$, partindo da condição inicial $x(0) = 1$. Em seu programa, utilize o método de Runge-Kutta de quarta ordem, com 100 passos de tempo, e faça um gráfico de $x(t)$ conforme a integração numérica, limitando o eixo das abscissas ao intervalo $t \in (0, 80)$.