

Universidade Federal de Pernambuco

Departamento de Física



# INTRODUÇÃO A MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM FÍSICA—2022.1

Clécio C. de Souza Silva

NOTAS DE AULA E ROTEIRO DE ATIVIDADES

# 1 Métodos básicos para integração de equações do movimento

Em diversos problemas de física, nos deparamos com equações diferenciais de primeira ordem, do tipo:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t),$$

Um exemplo clássico é a segunda lei de Newton, a qual, combinada com a definição de momento linear, forma o sistema de equações:

$$\frac{dx}{dt} = v, \tag{1}$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F}{m}, \tag{2}$$

onde consideramos uma partícula de massa  $m$  constante.

Nos cursos de Física Básica e Mecânica Clássica, aprendemos a resolver essas equações analiticamente, para casos bem específicos, geralmente casos em que  $F$  não depende do tempo e apresenta uma dependência simples de  $x$  e/ou  $v$ . Frequentemente, no entanto, este não é o caso. Um exemplo emblemático é o pêndulo plano. Apesar de sua aparente simplicidade, a força restauradora é não linear, o que é suficiente para impossibilitar uma solução fechada, exceto no limite de pequenas oscilações. Se agora acoplamos um segundo pêndulo ao primeiro, o sistema, além de não linear, passa a ter a possibilidade de apresentar comportamento caótico. O problema torna-se ainda mais dramático quando colocamos diversos corpos para interagir entre si, o que nos deixa com um grande sistema de equações acopladas para resolver. Lidaremos com esses tipos de problema mais adiante.

Há uma grande variedade de algoritmos baseados em diferenças finitas para integração de equações ou sistemas de equações diferenciais. Aqui, estudaremos apenas alguns algoritmos básicos. No entanto, vale ressaltar que mesmo os métodos mais simples, podem produzir resultados bastante satisfatórios, do ponto de vista acadêmico e até mesmo científico, a depender do problema específico abordado.

## 1.1 Acurácia e estabilidade

A maioria dos algoritmos determinísticos de integração numérica são baseados na expansão em série de Taylor. Considere, por exemplo, as Eqs. (1) e (2). Suponha que conhecemos  $x$  e  $v$  no instante  $t = t_n$ , os quais denotaremos  $x_n$  e  $v_n$ . Queremos obter, p. ex.,  $x_{n+1}$ , ou seja,  $x$  no instante  $t = t_{n+1} \equiv t_n + \Delta t$ . Assumindo  $\Delta t$  muito pequeno se comparado a qualquer tempo característico do problema, podemos expandir  $x(t)$  em potências de  $\Delta t$  assim:

$$x_{n+1} = x_n + \left. \frac{dx}{dt} \right|_n \Delta t + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2x}{dt^2} \right|_n \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3), \tag{3}$$

Antes de descrevermos alguns métodos de integração, faremos algumas considerações gerais sobre como estimar o erro inerente a um método e avaliar sua estabilidade. Há basicamente dois tipos de erro associados a uma integração numérica:

*Erro local* É aquele associado ao erro de truncamento da expansão, e corresponde ao erro no decorrer de um passo de tempo. Por exemplo, um método que toma até o termo de segunda ordem em  $\Delta t$  na Eq. (3) tem um erro local de ordem  $\Delta t^3$ .

*Erro global* É aquele associado ao tempo total da simulação  $t_{\text{total}} = N\Delta t$ , onde  $N$  é o número total de passos de tempo correspondente. O erro global acumula os erros associados a cada um dos  $N$  passos de tempo, ou seja, é proporcional a  $N \times \Delta t$ . Como  $N \propto 1/\Delta t$ , temos que

$$(\text{Erro global}) \propto (\text{Erro local})/\Delta t.$$

Dizemos que um método de integração é de ordem  $n$  quando seu erro global é  $\propto \Delta t^n$ .

Torna-se então aparente que a maneira mais direta de minimizar erros, e assim tornar o cálculo mais acurado, é adotar um  $\Delta t$  o menor possível. Por outro lado, se  $\Delta t$  for pequeno demais, será necessário um  $N$  muito grande, o que pode tornar a simulação proibitivamente lenta. Assim, a escolha do  $\Delta t$  deve ser um compromisso entre a acurácia e a velocidade de cálculo. Mais há ainda um outro problema a ser considerado: a estabilidade.

Um método pode ser considerado estável quando a diferença entre a solução numérica e a (suposta) solução exata apenas flutua ou oscila ao longo do tempo. Quando esta diferença cresce consistentemente com  $t$ , o método é dito instável. O problema é que normalmente não conhecemos a solução exata. Afinal, não precisaríamos realizar um cálculo numérico se conhecêssemos a solução. Nesse caso, podemos analisar, por exemplo, soluções exatas de casos especiais do problema ou averiguar o comportamento de alguma constante do movimento, como energia mecânica no caso de sistemas não dissipativos.

Tanto a acurácia quanto a estabilidade estão associadas não só ao método mais ao problema específico abordado. Isso torna a escolha do método a ser utilizado uma tarefa não trivial. Um método que podemos considerar adequado é aquele que consegue produzir resultados estáveis e com boa acurácia, dentro da margem de tolerância adequada para o problema.

## 1.2 Métodos de Euler e de Euler-Cromer

O algoritmo de Euler é o método mais simples (e também o mais limitado) de integração numérica. Corresponde a tomar a expansão de Taylor até o termo de primeira ordem, apenas. No caso da Eq. (1), temos:

$$v_{n+1} = v_n + a_n \Delta t, \quad (4)$$

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t, \quad (5)$$

onde  $a_n = F(x_n, t_n)/m$  é a aceleração instantânea da partícula. Este método possui um erro global de primeira ordem. Além disso, ele é instável para a grande maioria dos problemas. Uma das raras exceções são problemas de movimento sobre amortecido, em que a massa da partícula é desprezível em relação à viscosidade do meio em que se insere. Mas em um oscilador não amortecido ou fracamente amortecido, por exemplo, o erro se acumula no tempo e a solução tende a divergir para tempos muito longos.

Uma maneira simples de compensar a instabilidade do método de Euler é usar a derivada de  $x$  no instante  $t_{n+1}$  para o cálculo de  $x_{n+1}$ , ou seja, substituir  $v_n$  por  $v_{n+1}$  na Eq. (5). Esta modificação do método de Euler é conhecida como *método de Euler-Cromer*.

### 1.3 Método de Euler-Richardson

Outra maneira de “melhorar” o método de Euler, é avaliar a derivada no meio do intervalo. Esta simples modificação torna a integração estável e mais acurada. O algoritmo de Euler-Richardson implementa esta idéia seguindo os passos abaixo.

- (i) Usamos o método de Euler para encontrar  $x_m$  e  $y_m$  no meio do intervalo, ou seja, no instante  $t + \Delta t/2$ ;
- (ii) A partir de  $x_m$  e  $y_m$ , calculamos a força neste instante,  $a_m \equiv F(x_m, y_m, t_n + \Delta t/2)/m$ ;
- (iii) Usamos  $a_m$  e  $v_m$  para obter  $v_{n+1}$  e  $x_{n+1}$ , respectivamente, a partir de um passo de Euler.

Mais explicitamente, o algoritmo pode ser expresso na seguinte forma:

$$a_n = F(x_n, v_n, t_n)/m, \quad (6)$$

$$v_m = v_n + a_n \Delta t/2, \quad (7)$$

$$x_m = x_n + v_n \Delta t/2, \quad (8)$$

$$a_m = F(x_m, v_m, t_n + \Delta t/2)/m, \quad (9)$$

$$v_{n+1} = v_n + a_m \Delta t, \quad (10)$$

$$x_{n+1} = x_n + v_m \Delta t. \quad (11)$$

Pode-se mostrar que o erro global associado ao método de Euler-Richardson é de ordem  $\Delta t^2$ , tanto para  $x$  quanto para  $v$ .

Note que, em cada passo de integração, o método de Euler-Richardson exige um número de operações duas vezes maior que no método de Euler. No entanto, sua estabilidade e acurácia superiores permitem utilizar passos de tempo consideravelmente maiores, tornando-o, no fim das contas, mais rápido que o método de Euler.

### 1.4 Método de Verlet

Considere agora a expansão de Taylor, até terceira ordem em  $\Delta t$ , para a posição nos instantes  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$  e  $t_{n-1} = t_n - \Delta t$ :

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 x}{dt^3} \bigg|_n \Delta t^3 \quad (12)$$

$$x_{n-1} = x_n - v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n \Delta t^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3 x}{dt^3} \bigg|_n \Delta t^3 \quad (13)$$

Somando as Eqs. (12) e (13), eliminamos todos os termos de ordem ímpar da expansão. O resultado corresponde à equação para a posição no método de Verlet,

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a_n \Delta t^2. \quad (14)$$

Note que o erro local associado à Eq. (14) é de quarta ordem, pois os termos de terceira ordem foram todos eliminados. Logo, no método de Verlet, o erro global na posição é de terceira ordem.

Se agora subtrairmos as Eqs. (12) e (13), obtemos a equação para a velocidade no método de Verlet:

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2\Delta t}. \quad (15)$$

Com o  $\Delta t$  no denominador da Eq. (15), vemos claramente que o erro global na velocidade, associado ao método de Verlet, é de segunda ordem.

O método de Verlet é um método simples (exige poucas operações para cada passo de integração), mas de ordem elevada. No entanto, ele apresenta dois problemas: (i) ele não é auto-inicializável (dada a posição inicial  $x_0$ , não podemos utilizar a Eq. 14 pois não conhecemos  $x_{-1}$ ); (ii) a velocidade é obtida pela subtração de duas quantidades muito próximas, o que pode induzir erros de arredondamento do computador (*round-off*). O primeiro problema é facilmente contornável se usarmos um outro algoritmo apenas para inicializar a integração. Já o segundo problema é um pouco mais grave.

Felizmente, com poucas manipulações, é possível eliminar (ou minimizar) esses problemas. O algoritmo de *Verlet da velocidade* é a versão mais conhecida do método de Verlet que é auto-inicializável e bem menos vulnerável a erros de arredondamento:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n \Delta t^2 \quad (16)$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_{n+1} + a_n) \Delta t \quad (17)$$

Fica como exercício demonstrar que o algoritmo de Verlet da velocidade é matematicamente equivalente ao original.

## Atividade 1

**Objetivos:** Familiarizar-se com alguns métodos básicos de integração de equações do movimento; aprender a estimar erros numéricos e estabilidade.

1. Demonstre a equivalência matemática entre os algoritmos de Verlet original, Eqs. (14) e (15), e da velocidade, Eqs. (16) e (17).
2. Escreva um programa para simular um oscilador harmônico simples, de massa  $m$  e constante de mola  $k$ , usando 3 métodos diferentes de integração por diferenças finitas, sendo um deles o de Euler. Use  $m = 1.0$  kg,  $k = 1.0$  N/m e, para os primeiros testes, use um passo de tempo  $dt = 0.1$  s. Seu programa deve ser capaz de gerar um arquivo de dados contendo: tempo, posição, velocidade, energia cinética, energia potencial e energia total. O tempo total simulado deve corresponder a 10 a 20 períodos de oscilação. Verifique se seu programa funciona e produz resultados próximos do esperado fazendo gráficos de  $x(t)$ ,  $v(t)$  etc. Anexe o código-fonte ao seu relatório.
3. Rode seu programa usando diferentes valores de  $dt$ : 0.5 s, 0.1 s, 0.01 s, 0.001 s e 0.0001 s (para cada algoritmo escolhido) e faça as seguintes análises:
  - (a) Para cada caso, a partir de qual valor de  $dt$  o método é exato dentro de uma tolerância de 1%? E de 5%? Justifique sua resposta de forma clara, contrastando os dados e mostrando gráficos.  
**Sugestão:** para o cálculo de erros relativos, evite situações em que o valor da grandeza estimada é muito pequeno. Use, por exemplo, a amplitude das oscilações.
  - (b) Discuta a estabilidade de cada método a partir de gráficos no espaço de fase ( $v \times x$ ) e analisando seus dados quanto à conservação de energia.
4. Repita o item anterior para o caso de um oscilador harmônico amortecido, com constante de viscosidade  $\eta = 0.1$  kg/s.
5. Conclusão. Faça uma discussão geral sobre as atividades anteriores usando os argumentos e comentários que julgar pertinentes. Discuta também as dificuldades encontradas.