Apresentação 1 — Aula Teórica 1

Física Computacional

Departamento de Física Universidade de Aveiro

11 ou 12 de fevereiro de 2019



Equações diferenciais ordinárias (ODE - ordinary differential equations)

- Equações diferenciais são equações que relacionam variáveis independentes e variáveis dependentes e as suas derivadas.
- Equações diferenciais ordinárias são aquelas que envolvem uma única variável independente e uma dependente.
- Sistemas de equações diferenciais ordinárias podem envolver várias variáveis dependentes mas uma única variável independente.
- A ordem de uma ODE é a ordem máxima das derivadas presentes.

Os problemas com ODE podem ser:

- problema de valor inicial quando temos o valor de todas as variáveis dependentes definido num único valor da variável independente;
- **problema de condições fronteira** quando temos o valor das variáveis dependentes definido em mais do que um valor da variável independente.

Exemplos de equações diferenciais

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - (x^2 - 4x + 2)e^{-x}, \quad 0 < x < L,
T(x,0) = 0, \quad T(0,t) = 0, \quad T(L,t) = L^2 e^{-L}$$

2
$$\frac{d^2y}{dx^2} - xy = 0$$
, $y(0) = 1$, $y(100) = 0$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 1.25 \exp(x + y/2), \quad a_x < x < b_x, \quad a_y < y < b_y$$

$$u(a_x, y) = u(b_x, y) = u(x, a_y) = u(x, b_y) = 0$$

$$u(a_x, y) = u(b_x, y) = u(x, a_y) = u(x, b_y) = 0$$

$$\frac{dC_1}{dt} = -k_1C_1 + k_2C_2C_3$$

$$\frac{dC_2}{dt} = k_1 C_1 - k_2 C_2 C_3 - 2k_3 C_2^2$$

$$\frac{dC_3}{dt} = 2k_3C_2^2$$

$$C_1(0) = 0.9, \quad C_2(0) = 0.1, \quad C_3(0) = 0$$

Exemplos de equações diferenciais

$$\frac{d^2y}{d\tau^2} = -\frac{1}{(1+\epsilon y)^2}, \quad y(0) = 0, \quad y'(0) = 1$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = g(x), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < y < 1,$$

$$T(0, y) = T(1, y) = T_a, \quad T(x, 0) = T_b, \quad \frac{\partial T}{\partial y}(x, 1) = 0$$

3
$$\frac{d^2u}{dx^2} + \alpha \frac{du}{dx} + \beta u = f(x), \quad u(0) = u_0, \quad u(L) = u_L$$

$$d^{2}F + \left(az - \frac{F^{2}}{1 + F^{2}}\right)F = 0, \quad F(\pm L) = 0,$$

Equações diferenciais ordinárias (ODE)

Quando pretendemos obter a solução para um problema físico, deparamo-nos frequentemente com a tarefa de resolver uma equação diferencial. Vamos começar por nos dedicar ao caso mais simples:

Equações diferenciais ordinárias de primeira ordem com condições iniciais e sem condições fronteira.

Como todos sabemos, as equações diferenciais ordinárias (ODE) distinguem-se das equações diferenciais às derivadas parciais (PDE) pela existência de uma única variável independente: todas as derivadas são feitas em ordem a uma única variável, a que, numa discussão genérica, vamos chamar t, embora isso não queira de forma alguma dizer que a variável independente seja sempre o tempo.

Equações diferenciais ordinárias (ODE)

ODE de primeira ordem

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = f(t, y) \tag{1}$$

Em alguns casos, nos quais a função f(t,y) é bastante simples, a equação diferencial pode ser integrada explicitamente. De qualquer forma, para escrever a solução é preciso conhecer uma condição inicial, ou seja, o valor de y(t) para um dado valor do tempo. Se se tratasse de uma ODE de ordem n, teríamos que conhecer n constantes.

Na esmagadora maioria dos problemas físicos, mesmo em casos em que a formulação matemática é aparentemente muito simples, as equações diferenciais não podem ser resolvidas explicitamente e outros métodos têm que ser usados.

Vamos começar o nosso estudo dos métodos numéricos com o método de Euler, que é o mais simples dos algoritmos usados para transformar uma equação diferencial numa equação algébrica de diferenças finitas. Vamos supor que queremos determinar y(t) para valores de t entre t_0 e $t_{\rm f}$ e que conhecemos o valor inicial $y_0=y(t_0)$. A equação 1 permite-nos determinar

$$y^{(1)}(t_0) = \left[\frac{dy}{dt}\right]_{t=t_0} = f[t_0, y(t_0)]$$

Estamos a usar $y^{(n)}(t)$ para representar a derivada de ordem n de y(t).

Para aplicar o método de Euler, define-se uma grelha de valores da variável independente igualmente espaçados no intervalo a estudar:

$$t_0, t_0 + h, t_0 + 2h, t_0 + 3h, \dots, t_f$$
 $(t_0, t_1, t_2, t_3, \dots, t_{N-1})$

Para simplificar, o espaçamento h (ou h_t , ou Δt , ou δt) é escolhido de forma a que $t_{\rm f}-t_0$ seja um seu múltiplo inteiro. É fácil de perceber que o número de pontos, neste caso, é dado por:

$$N = \frac{t_{\rm f} - t_0}{h} + 1$$

Para começar, como podemos obter uma estimativa numérica de $y(t_0 + h)$? A série de Taylor aplicada a este caso dá-nos:

$$y(t_0 + h) = y(t_0) + y^{(1)}(t_0) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(t_0) \cdot h^2 + \frac{1}{2!}y^{(3)}(t_0) \cdot h^3 + \dots$$

No método de Euler, cortamos a expansão antes do termo em h^2 . Numa aula posterior, iremos discutir a possibilidade de incluir termos de ordem superior. O valor y_1 obtido pelo método de Euler é uma estimativa numérica para $y(t_0 + h)$ e é dado por

$$y_1 = y_0 + f(t_0, y_0) \cdot h$$

Erro local do método de Euler

Segundo a expressão do resto de Lagrange para a expansão de Taylor, existe um valor t' compreendido entre t_0 e t_0+h tal que se tem

$$y(t_0 + h) = y(t_0) + y^{(1)}(t_0) \cdot h + \frac{1}{2}y^{(2)}(t') \cdot h^2$$

Isto significa que o erro introduzido neste passo é da ordem de h^2 .

Conhecidos t_1 e y_1 , pode-se calcular (t_1, y_1) e usar o mesmo procedimento para calcular y_2 (estimativa para $y(t_0 + 2h)$):

$$y_2 = y_1 + f(t_1, y_1) \cdot h$$

Aplicando repetidamente este procedimento, podemos determinar todos os valores y_k , ou seja, a estimativa numérica dos valores de y(t) nos pontos t_k :

Método de Euler — ODE de primeira ordem

$$y_{k+1} = y_k + f(t_k, y_k) \cdot h$$
 para $k = 0, 1, 2, ..., N-2$

Chama-se a atenção para uma dificuldade que surge quando se usa o MATLAB: os vetores do MATLAB não podem ter índices nulos, pelo que os índices do MATLAB têm de ser alterados para começarem em 1. Assim, o valor y_0 da discussão acima é dado pelo elemento y (1) do vetor y no MATLAB.

Um exemplo simples de aplicação é estudado na alínea a) do Problema 1.1 do Trabalho Prático 1. Sem ter cuidado com os aspetos práticos do programa, podemos ver que a variável y nesse trabalho é a velocidade de um corpo e a função f é a expressão do somatório das forças nele aplicadas num dado instante, em função da velocidade e do tempo, dividido pela massa. Na prática, a aceleração é apenas função explícita da velocidade, ou seja, em vez de f(t,y), temos f(y).

Método de Euler para sistemas de ODE de 1a ordem

Consideremos um sistema muito simples:

Sistema de ODE de primeira ordem

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = f_x(t, x, y)$$
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = f_y(t, x, y)$$

A generalização a fazer é evidente:

Método de Euler — Sistema de ODE de primeira ordem

$$x_{k+1} = x_k + f_x(t_k, x_k, y_k) \cdot h$$

$$y_{k+1} = y_k + f_y(t_k, x_k, y_k) \cdot h$$

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

12 | 28

Forma dinâmica para as ODE

Uma equação diferencial de segunda ordem

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}t^2} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}\right)$$

pode ser expressa como 2 ODE acopladas de primeira ordem.

Considerando que as variáveis dependentes são:

$$y(t) \quad \text{e} \quad y^{(1)}(t) = \frac{dy}{dt},$$
obtemos
$$\frac{dy}{dt} = y^{(1)} \quad \text{e} \quad \frac{dy^{(1)}}{dt} = f(t, y, y^{(1)})$$

Método de Euler — ODE de 2ª ordem

$$\begin{cases} y_{k+1}^{(1)} = y_k^{(1)} + f(t_k, y_k, y_k^{(1)}) \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + y_k^{(1)} \cdot h \end{cases}$$

Movimento retilíneo

Um dos exemplos de equação diferencial de segunda ordem é a 2^a lei de Newton aplicado a uma trajetória retilínea y(t)

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\sum F\left(t, y, \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}\right)}{m}$$

Neste caso:

$$y^{(1)}(t) = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = v(t) \quad \text{e} \quad f(t, y, v) = \sum_{k} F(t, y, v) / m$$

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k + f(t_k, y_k, v_k) \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + v_k \cdot h \end{cases}$$

Movimento no espaço tridimensional

Generalizando para um caso em que a trajetória não é retilínea, mas dada por $\mathbf{r}(t) = x(t)\hat{\mathbf{i}} + y(t)\hat{\mathbf{j}} + z(t)\hat{\mathbf{k}}$,

$$\frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\sum \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})}{m}$$

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t} = f_x(t, x, y, z, v_x, v_y, v_z) = \frac{\sum F_x}{m} \\ \frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t} = f_y(t, x, y, z, v_x, v_y, v_z) = \frac{\sum F_y}{m} \\ \frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t} = f_z(t, x, y, z, v_x, v_y, v_z) = \frac{\sum F_z}{m} \end{cases}$$

As funções f_x , f_y e f_z são as componentes da aceleração segundo os eixos cartesianos.

Movimento no espaço tridimensional

Método de Euler para a velocidade

$$\begin{cases} v_{x,k+1} = v_{x,k} + f_x(t_k, x_k, y_k, z_k, v_{x,k}, v_{y,k}, v_{z,k}) \cdot h \\ v_{y,k+1} = v_{y,k} + f_y(t_k, x_k, y_k, z_k, v_{x,k}, v_{y,k}, v_{z,k}) \cdot h \\ v_{z,k+1} = v_{z,k} + f_z(t_k, x_k, y_k, z_k, v_{x,k}, v_{y,k}, v_{z,k}) \cdot h \end{cases}$$

Método de Euler para a posição

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + v_{x,k} \cdot h \\ y_{k+1} = y_k + v_{y,k} \cdot h \\ z_{k+1} = z_k + v_{z,k} \cdot h \end{cases}$$

Aerodinâmica de um objeto esférico

Nos problemas 1.2 e 2.3, estuda-se a trajetória de bolas (de ténis e de futebol) sujeitas:

- ao **peso**;
- à **força de arrasto** (*drag force*) que se deve a dois fenómenos; o atrito e a diferença de pressões entre a parte da frente da bola (relativamente ao seu movimento) e a parte de trás da bola que se encontra a uma menor pressão;
- efeito de Magnus que ocorre quando a bola tem também um movimento de rotação.

Alguns conceitos de aerodinâmica

Camada limite — camada de ar que rodeia a esfera e que apresenta velocidades graduais, desde a velocidade do fluido nas posições mais distantes da esfera até à velocidade da esfera na superfície desta.

Esteira — região de pressão baixa que se forma atrás da bola.

- O movimento do ar na camada limite pode ser laminar ou turbulento.
 A transição para regime turbulento ocorre para velocidades superiores.
- No regime turbulento, a esteira é menos extensa porque a camada limite separa-se da bola mais atrás.

Aerodinâmica de um objeto esférico — força de arrasto

Uma bola, que consideramos inicialmente sem rotação, desloca-se no ar com uma velocidade instantânea \boldsymbol{v} . O módulo da velocidade é $v=|\boldsymbol{v}|=\sqrt{v_x^2+v_y^2+v_z^2}$. A força de arrasto, que tem a mesma direção da velocidade, mas o sentido oposto, é habitualmente parametrizada por:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{\mathbf{D}} &= -\frac{1}{2} C_{\mathbf{D}} \rho A v^{2} \hat{\boldsymbol{v}} \\ &= -\frac{1}{2} C_{\mathbf{D}} \rho A v^{2} \frac{v_{x} \hat{\boldsymbol{i}} + v_{y} \hat{\boldsymbol{j}} + v_{z} \hat{\boldsymbol{k}}}{v} \\ &= -\frac{1}{2} C_{\mathbf{D}} \rho A \left(v v_{x} \hat{\boldsymbol{i}} + v v_{y} \hat{\boldsymbol{j}} + v v_{z} \hat{\boldsymbol{k}} \right) , \end{aligned}$$

onde ρ é a massa volúmica do ar e $A=\pi R^2$ é a área da secção transversal da bola. O parâmetro adimensional $C_{\rm D}$ (ou $C_{\rm A}$) é o coeficiente de arrasto (drag).

Aerodinâmica de um objeto esférico — força de arrasto

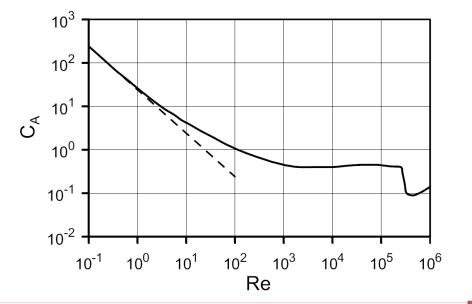
No contexto em que estamos a trabalhar, o coeficiente de arrasto é dependente apenas de um parâmetro chamado número de Reynolds:

$$Re = \frac{2\rho Rv}{\eta},$$

onde η é a viscosidade do ar. Como já foi dito, a força de arrasto é devida a dois fenómenos, o atrito e a diferença de pressões entre a parte da frente da bola (relativamente ao seu movimento) e a parte de trás da bola, onde se desenvolve a zona de baixa pressão a que chamamos esteira.

É evidente que, para uma mesma velocidade, a força de arrasto será tanto menor quanto menor for a secção transversal da esteira, ou seja, quanto mais atrás a camada limite se separar da esfera.

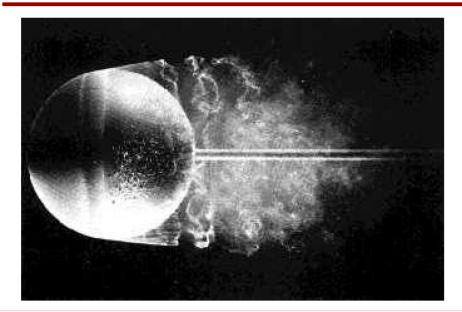
Coeficiente de arrasto de uma esfera lisa



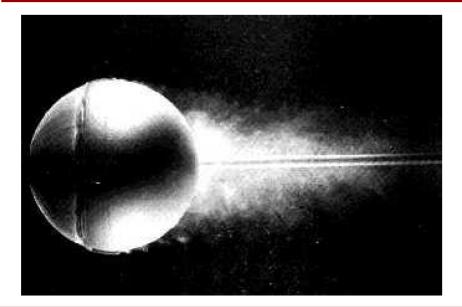
Coeficiente de arrasto de uma esfera lisa

- Para valores do número de Reynolds bastante pequenos, estamos no limite de Stokes: C_D é inversamente proporcional à velocidade e o módulo da força de arrasto é proporcional a v.
- C_D é aproximadamente constante numa gama intermédia de valores do número de Reynolds.
- A variação abrupta do coeficiente ocorre quando a camada limite se torna turbulenta e passa a separar-se da bola mais tarde, reduzindo as dimensões transversais da esteira.

Camada limite laminar



Camada limite turbulenta



Efeito de Magnus

Vamos considerar a situação em que a bola é lançada com rotação. Na figura do slide seguinte, o eixo de rotação é perpendicular ao plano da fotografia.

Como a rotação é no sentido horário, a velocidade do ar em relação à superfície superior da esfera é menor que a velocidade do ar relativamente à superfície inferior. A camada limite separa-se primeiro na superfície inferior e o ar é efetivamente desviado para baixo.

A terceira lei de Newton diz-nos que se a bola aplica força sobre o ar que o faz desviar para baixo, então o ar realiza força sobre a esfera que a faz desviar para cima.

A força devida aos efeitos aerodinâmicos passa a ter duas componentes, uma paralela à velocidade, $F_{\rm D}$, e outra perpendicular a ela e ao eixo de rotação, $F_{\rm L}$ (L de *lift*).

Efeito de Magnus (rotação no sentido horário)



Parametrização da força de Magnus

A força de Magnus é perpendicular à velocidade de translação e ao eixo de rotação e é habitualmente parametrizada por

$$\boldsymbol{F}_{L} = \frac{1}{2} C_{L} \rho A v^{2} \left(\hat{\boldsymbol{\omega}} \times \hat{\boldsymbol{v}} \right)$$

O parâmetro $C_{\rm L}$ depende do número de Reynolds e do parâmetro de rotação (de spin)

$$S = \frac{R\omega}{v}$$

(e, em princípio, do ângulo entre o eixo de rotação e a velocidade de translação).

Parametrização da força de Magnus

É preciso ter em atenção que a rotação afeta o coeficiente de arrasto que passa a ser também função do parâmetro *S*, como no exemplo da bola de ténis do Problema 1.2.

No Problema 1.3, a força de Magnus é parametrizada de uma forma ligeiramente diferente:

$$F_{L} = \frac{1}{2} C_{M} \rho AR (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v})$$