Equações Diferenciais

Exemplos simples

$$\frac{dN}{dt} = kN(t)$$

$$m\frac{dv}{dt} = -kv(t)$$

$$m\frac{dv}{dt} = -kv(t) + F(t)$$

$$m\frac{dv}{dt} = -kv(t) - kx(t)$$

mesmo estes exemplos simples podem tornar-se complicado se as constantes não forem constantes, e puderem depender das próprias variáveis

Método numérico

Arranjar uma sequência x_i que seja seja tão próxima quanto possível de $x(t_i)$ em t_i.

E o método consiste em começar com um valor de x num instante inicial $t=t_0$, designada por condição inicial, e obter uma fórmula de recurrência que permita obter x_i através de valores x_k com $k<i$.

A diferença principal em relação aos sistemas discretos tratados nas primeiras aulas é a de que t_i e t_{i+1} podem diferir de uma quantidade arbitráriamente pequena (limite contínuo), e queremos que qualquer x_i esteja próximo da solução exacta, independentemente do passo $(t_{i+1}-t_i)$ usado no método.

Como calcular a derivada?

$$\frac{dv}{dt} = -kv$$

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \left.\frac{dv}{dt}\right|_t (t+\Delta t - t) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2v}{dt^2}\right|_t \Delta t^2 + \ldots$$

Se dt fôr pequeno, então podemos assumir que:

$$v(t+\Delta t) \approx v(t) + v'(t)\Delta t$$

$$\boxed{v'(t) \approx \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t}}$$

Aula 11 Simulação de Modelação

$$v'(t) \approx \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t}$$

Derivada Avançada

$$v'(t) \approx \frac{v(t) - v(t-\Delta t)}{\Delta t}$$

Derivada Atrasada

$$v'(t) \approx \frac{v(t+\Delta t) - v(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$

Derivada Centrada

Exemplo

$$v'(t) \approx \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} = \frac{v(t) + \Delta t \times v'(t) + \Delta t^2 v''(t)/2 + \ldots - v(t)}{\Delta t}$$

$$\frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} = v'(t) + \Delta t \frac{v''(t)}{2} + \ldots$$

É uma boa aproximação se o Δt, fôr pequeno. Mas haverá fórmulas mais precisas?

Exercício

Provar que:

$$\frac{dv}{dt} \approx \frac{1}{2\Delta t}\big(-3v(t) + 4v(t+\Delta t) - v(t+2\Delta t)\big)$$

Esta fórmula é uma melhor aproximação para a derivada, porém envolve conhecer 3 pontos.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + v'(t)\Delta t + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2v}{dt^2}\right|_t \Delta t^2 + \ldots$$

$$\frac{d^2v}{dt^2} \approx \frac{v(t) - 2v(t-\Delta t) + v(t-2\Delta t)}{\Delta t^2}$$

$$v(t) = v(t-\Delta t) + v'(t)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{v(t) - 2v(t-\Delta t) + v(t-2\Delta t)}{\Delta t^2}\Delta t^2$$

$$v'(t) = \frac{3v(t) - 4v(t-\Delta t) + v(t-2\Delta t)}{2\Delta t}$$

Exercício: fazer com a derivada adiantada e obter a outra fórmula. Mostrar também que a fórmula simétrica é de ordem superior às derivadas adiantada e atrasada.

Podiamos ter feito o exercício ao contrário e tentado obter uma expressão que incluísse uma aproximação para o valor da segunda derivada

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{dv}{dt} \approx \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t},$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} \approx \frac{\frac{x(t+2\Delta t) - x(t+\Delta t)}{\Delta t} - \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}}{\Delta t},$$

$$\boxed{\frac{d^2x}{dt^2} \approx \frac{x(t+2\Delta t) - 2x(t+\Delta t) + x(t)}{\Delta t^2},}$$

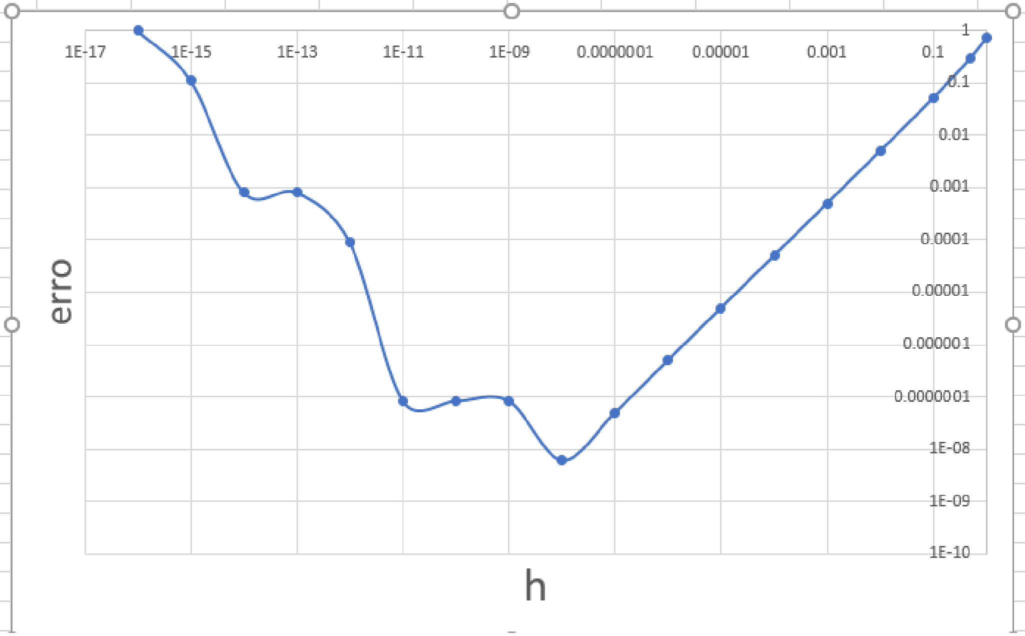
2ª derivada avançada

Como escolher o passo?

Método de Euler é de ordem 1, e por isso requer um maior número de passos e tempo de computação que métodos de ordem superior.
No entanto passos muito pequenos podem levar a erros de arredondamento.

$$\frac{dexp(t)}{dt} = \exp(t) \approx \frac{\exp(t+h) - \exp(t)}{h}$$

	B	C	D
1		t=	0
2	d(exp(t))/dt=exp(t)	[exp(t+h)-exp(t)]/h	erro
3	1	1.718281828	0.718282
4	1	1.297442541	0.297443
5	1	1.051709181	0.051709
6	1	1.005016708	0.005017
7	1	1.000500167	0.0005
8	1	1.000050002	5E-05
9	1	1.000005	5E-06
10	1	1.0000005	5E-07
11	1	1.000000049	4.94E-08
12	1	0.999999994	6.08E-09
13	1	1.000000083	8.27E-08
14	1	1.000000083	8.27E-08
15	1	1.000000083	8.27E-08
16	1	1.000088901	8.89E-05
17	1	0.999200722	0.000799
18	1	0.999200722	0.000799
19	1	1.110223025	0.110223
20	1	0	1
21			
22			



Para passos muito pequenos o erro no cálculo da derivada começa a ser afectado pelos erros de arredondamento numérico.

Método de Euler

$$\frac{dv}{dt} = -kv \longrightarrow v(t+\Delta t) - v(t) = -kv(t)\Delta t$$

$$v(t+\Delta t) = v(t) - kv(t)\Delta t$$

calculado no início do intervalo (t, t+ Δt): em t

Como fazer em Excel?

Melhorar o método

$$\frac{dv}{dt} = -kv \longrightarrow v(t+\Delta t) - v(t) = -k\left(\frac{v(t) + v(t+\Delta t)}{2}\right)\Delta t$$

$$\boxed{v(t+\Delta t) = \frac{1 - k\Delta t/2}{1 + k\Delta t/2} v(t)}$$

no entanto, no caso de equações não lineares, este procedimento não funciona.

$$\frac{dv}{dt} = -kv^3 \longrightarrow v(t+\Delta t) - v(t) = -k\frac{v(t)^3 + v(t+\Delta t)^3}{2}\Delta t$$

Através desta abordagem não é possível inverter a equação.

Uma outra forma será utilizar o método de Euler para prevêr melhor v(t+ Δt)

$$v(t+\Delta t) - v(t) = -k\frac{v(t)^3 + (v(t) - k\Delta t\, v(t)^3)^3}{2}\Delta t$$

Este é o método de Heun, sendo um método de ordem 2.

Podemos usar estimativas da função e derivada entre t e t+Δt para melhorar estimativa:

$$\frac{dv}{dt} = f(v,t) \longrightarrow v(t+\Delta t) = v(t) + \Delta v$$

Método	Equações
Euler (erro de ordem Δt^2)	$\Delta v = k_1$ $k_1 = \Delta t \times (f(t,v))$
Euler Modificado (Heun) (erro de ordem Δt^3)	$\Delta v = \frac{1}{2}[k_1 + k_2]$ $k_1 = \Delta t \times (f(t,v))$ $k_2 = \Delta t \times (f(t+\Delta t, v + k_1))$
Runge-Kutta 3ª ordem (erro de ordem Δt^4)	$\Delta v = \frac{1}{4}[k_1 + 3k_3]$ $k_1 = \Delta t \times (f(t,v))$ $k_2 = \Delta t \times (f(t+\Delta t/3, v + k_1/3))$ $k_3 = \Delta t \times (f(t+2\Delta t/3, v + 2k_2/3))$
Runge Kutta 4ª ordem (erro de ordem Δt^5)	$\Delta v = \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$ $k_1 = \Delta t \times (f(t,v))$ $k_2 = \Delta t \times (f(t+\Delta t/2, v + k_1/2))$ $k_3 = \Delta t \times (f(t+\Delta t/2, v + k_2/2))$ $k_4 = \Delta t \times (f(t+\Delta t, v + k_3))$

Método de Heun aplicado no caso precedente:

$$v(t+\Delta t) - v(t) = \Delta v = \frac{1}{2}[k_1 + k_2]$$

$$k_1 = \Delta t f(t, v) = \Delta t \times (-kv(t)^3)$$

$$k_2 = \Delta t \times \left(f(t+\Delta t, v + k_1)\right) = \Delta t \times [-k(v(t) + (-kv(t)^3\Delta t)^3]$$

Exemplo

(retirado de um outro curso)

Um corpo à temperatura de 1200K arrefece quando colocado à temperatura ambiente, a 300K. Assuming que há trocas de energia com o ambiente por radiação, e que a temperatura do corpo evoluirá de acordo com a equação:

$$\frac{d\theta}{dt} = -2.2067\times10^{-12}\left(\theta^4 - 81\times10^8\right), \theta(0) = 1200K$$

Determinar a temperatura quando $t = 480$s usando um método de Runge-Kutta.

Assuma o passo de $h = 240$s

$$\frac{d\theta}{dt} = -2.2067\times10^{-12}\left(\theta^4 - 81\times10^8\right)$$

$$f(t,\theta) = -2.2067\times10^{-12}\left(\theta^4 - 81\times10^8\right)$$

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)h$$

Passo 1: $i = 0, t_0 = 0, \theta_0 = \theta(0) = 1200$

$$k_1 = f(t_0, \theta_o) = f(0{,}1200) = -2.2067 \times 10^{-12}\left(1200^4 - 81\times 10^8\right) = -4.5579$$

$$k_2 = f\left(t_0 + \frac{1}{2}h, \theta_0 + \frac{1}{2}k_1 h\right) = f\left(0 + \frac{1}{2}(240), 1200 + \frac{1}{2}(-4.5579)240\right) = f(120{,}653.05)$$

$$= -2.2067 \times 10^{-12}\left(653.05^4 - 81\times 10^8\right) = -0.38347$$

$$k_3 = f\left(t_0 + \frac{1}{2}h, \theta_0 + \frac{1}{2}k_2 h\right) = f\left(0 + \frac{1}{2}(240), 1200 + \frac{1}{2}(-0.38347)240\right) = f(120{,}1154.0)$$

$$= 2.2067 \times 10^{-12}\left(1154.0^4 - 81\times 10^8\right) = -3.8954$$

$$k_4 = f\left(t_0 + \frac{1}{2}h, \theta_0 + \frac{1}{2}k_3 h\right) = f\left(0 + \frac{1}{2}240, 1200 + \frac{1}{2}(-3.894)240\right) = f(120{,}265.10)$$

$$= 2.2067 \times 10^{-12}\left(265.10^4 - 81\times 10^8\right) = 0.0069750$$

$$\theta_1 = \theta_0 + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h$$

$$= 1200 + \frac{1}{6}\left(-4.5579 + 2\left(-0.38347\right) + 2\left(-3.8954\right) + \left(0.069750\right)\right)240$$

$$= 1200 + \frac{1}{6}\left(-13.046\right)240$$

$$= 675.65K$$

Passo 2: $i=1, t_1=240, \theta_1=675.65K$

$$k_1 = f(t_1, \theta_1) \quad = f(240{,}675.65) = -2.2067 \times 10^{-12}\left(675.65^4 - 81\times 10^8\right) = -0.44199$$

$$k_2 = f\left(t_1 + \frac{1}{2}h, \theta_1 + \frac{1}{2}k_1 h\right) = f\left(240 + \frac{1}{2}(240), 675.65 + \frac{1}{2}(-0.44199)240\right) = f(360{,}622.61)$$
$$= -2.2067\times 10^{-12}\left(622.61^4 - 81\times 10^8\right) = -0.31372$$

$$k_3 = f\left(t_1 + \frac{1}{2}h, \theta_1 + \frac{1}{2}k_2 h\right) = f\left(240 + \frac{1}{2}(240), 675.65 + \frac{1}{2}(-0.31372)240\right) \quad = f(360{,}638.00)$$
$$= -2.2067\times 10^{-12}\left(638.00^4 - 81\times 10^8\right) \quad = -0.34775$$

$$k_4 = f\left(t_1 + \frac{1}{2}h, \theta_1 + k_3 h\right) = f\left(240 + \frac{1}{2}240, 675.65 + (-0.34775)240\right) \quad = f(360{,}592.19)$$
$$= 2.2067\times 10^{-12}\left(592.19^4 - 81\times 10^8\right) \quad = -0.25351$$

$$\theta_2 = \theta_1 + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h$$

$$= 675.65 + \frac{1}{6}\left(-0.44199 + 2\left(-0.31372\right) + 2\left(-0.34775\right) + \left(-0.25351\right)\right)240$$

$$= 675.65 + \frac{1}{6}\left(-2.0184\right)240$$

$$= 594.91K$$

θ_2 é a temperatura aproximada no instante: $t_2 = t_1 + h$ = $240 + 240 = 480$s

A solução exacta é dada por:

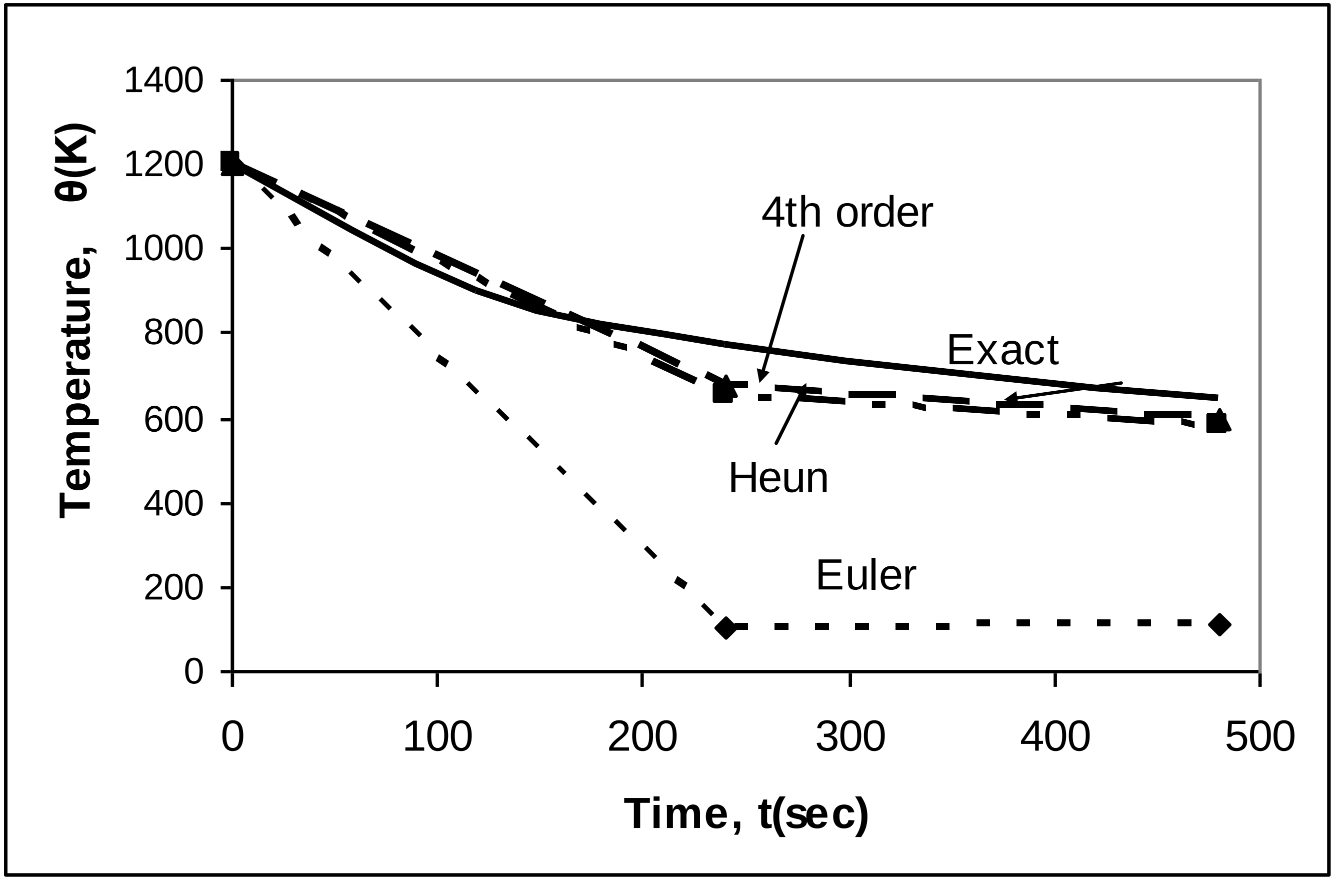
$$0.92593\ln\frac{\theta-300}{\theta+300}-1.8519\tan^{-1}\left(0.00333\theta\right)=-0.22067\times10^{-3}t-2.9282$$

Em t=480s teriamos $\theta(480)=647.57K$

Para obter maior exactidão teriamos de diminuir o passo.

TPC: repetir dimuindo o passo para metade.

Comparação entre métodos



Importante:

- Métodos de RK tradicionais não são simpléticos, i.e., não conservam a energia em sistemas conservativos.
No entanto, podem haver extensões a estes métodos que os podem tornar.

- Em muitas situações práticas a energia não se conserva sendo que a maior contribuição para a imprecisão vem de outras fontes (por exemplo: variação brusca de forças). Nestes casos os métodos de RK podem ser vantajosos, e principalmente métodos em que o passo possa ser alterado (adaptativos).

- Estes métodos não são invariantes no tempo: fazendo n iterações e revertendo não obtemos o mesmo resultado. O mesmo não sucede com o método leap frog e verlet que veremos de seguida.

Mais informação:
http://young.physics.ucsc.edu/115/leapfrog.pdf

Resolução de Equações do movimento de segunda ordem

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -k\,x \qquad \begin{cases} x(0) \\ v(0) \end{cases}$$

condições iniciais

A aplicação directa do método de Euler, levaria a considerar duas equações acopladas:

$$m\frac{dv}{dt} = -kx(t)$$

$$\frac{dx}{dt} = v(t)$$

donde:

$$\boxed{\begin{aligned} v(t+\Delta t) &= v(t) - \frac{k}{m}x(t)\Delta t \\ x(t+\Delta t) &= x(t) + v(t)\Delta t \end{aligned}}$$

(Euler simples)

Este método não é muito preciso, e em particular não conserva a energia:

$$E(t+\Delta t) = \frac{1}{2}mv^2(t+\Delta t) + \frac{1}{2}kx^2(t+\Delta t) =$$

$$= \frac{1}{2}m\left(v(t) - \frac{k}{m}x(t)\Delta t\right)^2 + \frac{1}{2}k\big(x(t)+v(t)\Delta t\big)^2 =$$

$$= E(t) + \frac{1}{2}\frac{k^2}{m}x^2(t)\Delta t^2 + \frac{1}{2}kv^2\Delta t^2$$

Que como se vê cresce sempre!

Método Euler-Cromer

A variante no método de Euler-Cromer consiste em calcular uma estimativa para a velocidade e usar essa estimativa para calcular a estimativa da próxima posição.

$$v(t+\Delta t) = v(t) - \frac{k}{m}x(t)\Delta t$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v(t+\Delta t)\Delta t$$

(Euler Cromer)

Este método conserva “melhor” a energia:

$$E(t+\Delta t)=\frac{1}{2}mv^2(t+\Delta t)+\frac{1}{2}kx^2(t+\Delta t)=$$

$$=\frac{1}{2}m\left(v(t)-\frac{k}{m}x(t)\Delta t\right)^2+\frac{1}{2}k\left(x(t)+v(t+\Delta t)\Delta t\right)^2=$$

$$=\frac{1}{2}m\left(v(t)-\frac{k}{m}x(t)\Delta t\right)^2+\frac{1}{2}k\left(x(t)+v(t)\Delta t-\frac{k}{m}x(t)\Delta t^2\right)^2=$$

$$=E(t)-\frac{k^2}{m}x(t)v(t)\Delta t^3+\ldots$$

Que pode não crescer sempre e
além disso, é proporcional a uma potência
superior de Δt

Método de Verlet

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \qquad \begin{cases} x(0) \\ v(0) \end{cases}$$

condições iniciais

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{x}}{\mathrm{dt}^2} \approx \frac{\mathrm{x}(\mathrm{t}+\Delta\mathrm{t}) - 2\mathrm{x}(\mathrm{t}) + \mathrm{x}(\mathrm{t}-\Delta\mathrm{t})}{\Delta\mathrm{t}^2}}$$

2ª derivada centrada

$$x(t+\Delta t) \approx x(t) + x(t) - x(t-\Delta t) - \Delta t^2\,\frac{kx(t)}{m}$$

Método de Verlet

$$x(t+\Delta t) \approx 2x(t) - x(t-\Delta t) - \Delta t^2 \frac{kx(t)}{m}$$

Se fôr necessário podemos sempre ter acesso à velocidade através de:

pontos onde as
quantidades são calculadas

$$v(t) = \frac{x(t+\Delta t) - x(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$

Este método é ligeiramente melhor que o de Euler-Cromer,
mas é mais complicado de utilizar.

Leap Frog method

Parecido com o de Euler-Cromer, mas usa um ponto intermédio no intervalo:

$$v\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)=v\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right)+\frac{\Delta t}{2}a(t)$$

$$x(t+\Delta t)=x(t)+\Delta t\left(v(t)+\frac{\Delta t}{2}a(t)\right)+\ldots$$

Por isso o método pode ser:

$$\begin{cases} v\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)=v\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right)-\Delta t\,\frac{kx(t)}{m} \\ x(t+\Delta t)=x(t)+\Delta t\; v\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \; v\left(t + \dfrac{\Delta t}{2}\right) \\[2ex] v\left(t + \dfrac{\Delta t}{2}\right) = v\left(t - \dfrac{\Delta t}{2}\right) - \Delta t \, \dfrac{kx(t)}{m} \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(0) \\ v(0) \end{cases}$$

condições iniciais

em geral usa-se v(0) em v(0+ Δt)
(aproximação para facilitar)