Física Computacional I
Aula de Revisão 3

Josiel Mendonça Soares de Souza

Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Departamento de Física Teórica e Experimental

12 de Agosto de 2021

Tópicos da Aula de Hoje

Equações Diferenciais Ordinárias

Equações diferenciais **ordinárias** (EDO) são equações que envolvem derivadas de uma determinada função $f(x)$ com relação a **uma única variável**.

$$F(x) + A_0(x)f(x) + A_1(x)\frac{df}{dx} + A_2(x)\frac{d^2f}{dx^2} + ... + A_n(x)\frac{d^nf}{dx^n} = 0$$

Onde os $A_i(x)$ são coeficientes que podem depender de x e $F(x)$ é uma função arbitrária de x

- No caso acima, temos uma equação diferencial **linear** por envolver apenas uma combinação linear das derivadas de $f(x)$ (lembre que uma derivada de ordem 0 de uma função é a própria função). Caso nossa equação envolvese funções ou mixturas de derivadas (Ex: $f'(x) \cdot f''(x)$, $f(x)f''(x)'$, etc ...) teríamos uma equação diferencial **não linear**.

Equações Diferenciais Ordinárias

Equações diferenciais **ordinárias** (EDO) são equações que envolvem derivadas de uma determinada função $f(x)$ com relação a **uma única variável**.

$$F(x) + A_0(x)f(x) + A_1(x)\frac{df}{dx} + A_2(x)\frac{d^2f}{dx^2} + ... + A_n(x)\frac{d^nf}{dx^n} = 0$$

Onde os $A_i(x)$ são coeficientes que podem depender de x e $F(x)$ é uma função arbitrária de x

- No caso acima, temos uma equação diferencial **linear** por envolver apenas uma combinação linear das derivadas de $f(x)$ (lembre que uma derivada de ordem 0 de uma função é a própria função). Caso nossa equação envolvese funções ou mixturas de derivadas (Ex: $f'(x) \cdot f''(x)$, $f(x)f''(x)'$, etc ...) teríamos uma equação diferencial **não linear**.
- Também, da equação acima, podemos distinguir uma equação diferencial **homogênea** de uma **não homogênea** dependendo se a função $F(x)$ nula ou não. Para $F(x) = 0$, temos uma EDO homogênea, e para $F(x) \neq 0$ temos uma EDO não homogênea.

Equações Diferenciais Ordinárias

Equações diferenciais **ordinárias** (EDO) são equações que envolvem derivadas de uma determinada função $f(x)$ com relação a **uma única variável**.

$$F(x) + A_0(x)f(x) + A_1(x)\frac{df}{dx} + A_2(x)\frac{d^2 f}{dx^2} + ... + A_n(x)\frac{d^n f}{dx^n} = 0$$

Onde os $A_i(x)$ são coeficientes que podem depender de x e $F(x)$ é uma função arbitrária de x

- No caso acima, temos uma equação diferencial **linear** por envolver apenas uma combinação linear das derivadas de $f(x)$ (lembre que uma derivada de ordem 0 de uma função é a própria função). Caso nossa equação envolvese funções ou mixturas de derivadas (Ex: $f'(x) \cdot f''(x)$, $f(x)f''(x)'$, etc ...) teríamos uma equação diferencial **não linear**.
- Também, da equação acima, podemos distinguir uma equação diferencial **homogênea** de uma **não homogênea** dependendo se a função $F(x)$ nula ou não. Para $F(x) = 0$, temos uma EDO homogênea, e para $F(x) \neq 0$ temos uma EDO não homogênea.
- O **grau** ou **ordem** da nossa EDO pode ser identificada a partir da ordem máxima de uma derivada encontrada na equação (no exemplo acima temos uma EDO de ordem ‘n’).

Método de Euler

Expansão/Série de Taylor :

$$g(t) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t)}{dt^n}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^n$$

Método de Euler

Expansão/Série de Taylor :

$$g(t) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t)}{dt^n}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^n$$

$$g(t) \approx g(t_0) + \frac{dg}{dt}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dt^2}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 g}{dt^3}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^3 + \dots$$

Método de Euler

Expansão/Série de Taylor :

$$g(t) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t)}{dt^n}\bigg|_{t=t_0} (t-t_0)^n$$

$$g(t) \approx g(t_0) + \frac{dg}{dt}\bigg|_{t=t_0} (t-t_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dt^2}\bigg|_{t=t_0} (t-t_0)^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 g}{dt^3}\bigg|_{t=t_0} (t-t_0)^3 + \ldots$$

$$g(\underbrace{t_0+\delta t}_{\equiv t'}) = g(t') \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t_0} (\overbrace{t'-t_0}^{\delta t})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t_0} (\delta t)^n$$

Método de Euler

Expansão/Série de Taylor :

$$g(t) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t)}{dt^n}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^n$$

$$g(t) \approx g(t_0) + \frac{dg}{dt}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dt^2}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 g}{dt^3}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^3 + ...$$

$$g(\underbrace{t_0 + \delta t}_{\equiv t'}) = g(t') \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t_0} (\overbrace{t' - t_0}^{\delta t})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t_0} (\delta t)^n$$

Fazendo $t' \equiv t$ com $\delta t = t' - t$:

Método de Euler

Expansão/Série de Taylor :

$$g(t) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t)}{dt^n}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^n$$

$$g(t) \approx g(t_0) + \frac{dg}{dt}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dt^2}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 g}{dt^3}\bigg|_{t=t_0} (t - t_0)^3 + \ldots$$

$$g(\underbrace{t_0 + \delta t}_{\equiv t'}) = g(t') \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t_0} (\overbrace{t' - t_0}^{\delta t})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t_0} (\delta t)^n$$

Fazendo $t' \equiv t$ com $\delta t = t' - t$:

$$g(t + \delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n g(t')}{dt'^n}\bigg|_{t'=t} (\delta t)^n = g(t) + \frac{dg}{dt'}\delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dt'^2}\delta t^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 g}{dt'^3}\delta t^3 + \ldots$$

Método de Euler

$$x(t+h) = x(t) + hf(x,t) + \frac{h^2}{2}\dot{f}(x,t) + +\frac{h^3}{6}\ddot{f}(x,t) + O(h^4)$$

onde,

$$f(x,t) \equiv \frac{dx}{dt} \Rightarrow \boxed{\frac{dx}{dt} = f(x,t)} \leftarrow \text{EDO de Primeira Ordem Não Homogênea}$$

Os pontos acima do f denotam derivadas com relação a t.

Método de Euler

$$x(t+h) = x(t) + hf(x,t) + \frac{h^2}{2}\dot{f}(x,t) + + \frac{h^3}{6}\ddot{f}(x,t) + O(h^4)$$

onde,

$$f(x,t) \equiv \frac{dx}{dt} \Rightarrow \boxed{\frac{dx}{dt} = f(x,t)} \leftarrow \text{EDO de Primeira Ordem Não Homogênea}$$

Os pontos acima do f denotam derivadas com relação a t.
O método de Euler surge da expansão de Taylor até a primeira ordem em h:

$$\boxed{x(t+h) = x(t) + hf(x,t)}$$

Método de Euler

$$x(t+h) = x(t) + hf(x,t) + \frac{h^2}{2}\dot{f}(x,t) + + \frac{h^3}{6}\ddot{f}(x,t) + O(h^4)$$

onde,

$$f(x,t) \equiv \frac{dx}{dt} \Rightarrow \boxed{\frac{dx}{dt} = f(x,t)} \leftarrow \text{EDO de Primeira Ordem Não Homogênea}$$

Os pontos acima do f denotam derivadas com relação a t.
O método de Euler surge da expansão de Taylor até a primeira ordem em h:

$$\boxed{x(t+h) = x(t) + hf(x,t)}$$

O erro desse método é de segunda ordem em h, ou seja, $\mathbf{Err} = \mathbf{ch^2}$ para um valor de c desconhecido.

Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem

$$x(t+h) = x(\overbrace{t+h/2}^{\equiv t_1}+h/2) = x(t_1+h/2) = x(t_1) + \frac{1}{2}hf[x(t_1),t_1] + \frac{1}{4}h^2\dot{f}[x(t_1),t_1] + O(h^3)$$

$$x(t) = x(\underbrace{t+h/2}_{\equiv t_1}-h/2) = x(t_1-h/2) = x(t_1) - \frac{1}{2}hf[x(t_1),t_1] + \frac{1}{4}h^2\dot{f}[x(t_1),t_1] - O(h^3)$$

Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem

$$x(t+h) = x(\overbrace{t+h/2}^{\equiv t_1}+h/2) = x(t_1+h/2) = x(t_1) + \frac{1}{2}hf[x(t_1),t_1] + \frac{1}{4}h^2\dot{f}[x(t_1),t_1] + O(h^3)$$

$$x(t) = x(\underbrace{t+h/2}_{\equiv t_1}-h/2) = x(t_1-h/2) = x(t_1) - \frac{1}{2}hf[x(t_1),t_1] + \frac{1}{4}h^2\dot{f}[x(t_1),t_1] - O(h^3)$$

$$x(t+h) = x(t) + \overbrace{hf[x(t_1),t_1]}^{\equiv K_2}+O(h^3)$$

$$x(t_1) = x(t+h/2) = x(t) + \frac{1}{2}\underbrace{hf[x(t),t]}_{\equiv K_1}+\ldots$$

Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem

$$x(t+h) = x(\overbrace{t+h/2}^{\equiv t_1}+h/2) = x(t_1+h/2) = x(t_1) + \frac{1}{2}hf[x(t_1),t_1] + \frac{1}{4}h^2\dot{f}[x(t_1),t_1] + O(h^3)$$

$$x(t) = x(\underbrace{t+h/2}_{\equiv t_1}-h/2) = x(t_1-h/2) = x(t_1) - \frac{1}{2}hf[x(t_1),t_1] + \frac{1}{4}h^2\dot{f}[x(t_1),t_1] - O(h^3)$$

$$x(t+h) = x(t) + \overbrace{hf[x(t_1),t_1]}^{\equiv K_2} + O(h^3)$$

$$x(t_1) = x(t+h/2) = x(t) + \frac{1}{2}\underbrace{hf[x(t),t]}_{\equiv K_1} + \ldots$$

$$\mathbf{RK2}: \begin{cases} K_1 \equiv hf[x(t),h] \\ K_2 \equiv hf[x+K_1/2,\ t+h/2] \\ x(t+h) = x(t) + K_2 \end{cases}$$

Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem

Para o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4), temos um sistema de equações semelhante ao Runge-Kutta de segunda ordem (RK2). Este método tem a vantagem de ser mais preciso do que o RK2 com uma imprecisão da ordem de h^5 (erro de quinta ordem). Nossas EDO's agora podem ser resolvidas de forma mais precisa a partir do conjunto de equações abaixo:

$$x(t+h) = x(t) + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

$$\begin{cases} K_1 = hf(x,t) \\ K_2 = hf(x + K_1/2,\ t + h/2) \\ K_3 = hf(x + K_2/2,\ t + h/2) \\ K_4 = hf(x + K_3,\ t + h) \end{cases}$$

Equações Diferenciais de Segunda Ordem

Uma equação diferencial linear homogênea de segunda ordem possui a seguinte forma:

$$\boxed{A(t)\frac{d^2y}{dt^2} + B(t)\frac{dy}{dt} + C(t)y(t) + D(t) = 0}$$

O exemplo mais famoso de uma equação desse tipo é o do oscilador harmônico:

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -\omega^2 y$$

Cuja solução é da forma:

$$y(t) = c_1 e^{i\omega t} + c_2 e^{-i\omega t}$$

Equações Diferenciais de Segunda Ordem

Para resolvermos equações lineares de segunda ordem numericamente, precisamos reduzir nossas equações um sistema de equações diferenciais de primeira ordem e, em seguida, utilizar os métodos aprendidos anteriormente em suas formas vetoriais.

$$\boxed{A(t)\frac{d^2y}{dt^2} + B(t)\frac{dy}{dt} + C(t)y(t) + D(t) = 0}$$

$$V(t) = \frac{dy}{dt} \Rightarrow \frac{dV}{dt} = \frac{d^2y}{dt^2}$$

$$\boxed{\frac{dy}{dt} = V(t)} \qquad \boxed{\frac{dV}{dt} = -\frac{1}{A}[BV(t) + Cy(t) + D]}$$

Equações Diferenciais de Segunda Ordem

$$x(t+h) = x(t) + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

$$\begin{cases} K_1 = hf(x,t) \\ K_2 = hf(x + K_1/2,\ t + h/2) \\ K_3 = hf(x + K_2/2,\ t + h/2) \\ K_4 = hf(x + K_3,\ t + h) \end{cases}$$

Equações Diferenciais de Segunda Ordem

$$x(t+h) = x(t) + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

$$\begin{cases} K_1 = hf(x,t) \\ K_2 = hf(x + K_1/2,\ t + h/2) \\ K_3 = hf(x + K_2/2,\ t + h/2) \\ K_4 = hf(x + K_3,\ t + h) \end{cases}$$

$$\vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + \frac{1}{6}(\vec{K}_1 + 2\vec{K}_2 + 2\vec{K}_3 + \vec{K}_4)$$

$$\begin{cases} \vec{K}_1 = hf(\vec{r},t) \\ \vec{K}_2 = hf(\vec{r} + \vec{K}_1/2,\ t + h/2) \\ \vec{K}_3 = hf(\vec{r} + \vec{K}_2/2,\ t + h/2) \\ \vec{K}_4 = hf(\vec{r} + \vec{K}_3,\ t + h) \end{cases}$$

Método Adaptativo

Vamos estimar o erro do método RK4 de **forma prática**.

$$\begin{cases} \text{Método 1 } [X_1(t+2h)]: \quad \overbrace{[x(t) \to x(t+h)]}^{\text{Err}=ch^5} \longrightarrow \overbrace{[x(t+h) \to x(t+2h)]}^{\text{Err}=ch^5} \\ \text{Método 2 } [X_2(t+2h)]: \quad \underbrace{[x(t) \to x(t+2h)]}_{\text{Err}=c(2h)^5} \end{cases}$$

Método Adaptativo

Vamos estimar o erro do método RK4 de **forma prática**.

$$\begin{cases} \text{Método 1 } [X_1(t+2h)] : & \overbrace{[x(t) \to x(t+h)]}^{\text{Err}=ch^5} \longrightarrow \overbrace{[x(t+h) \to x(t+2h)]}^{\text{Err}=ch^5} \\ \text{Método 2 } [X_2(t+2h)] : & \underbrace{[x(t) \to x(t+2h)]}_{\text{Err}=c(2h)^5} \end{cases}$$

$$X_1 = x(t+2h) + 2ch^5$$

$$X_2 = x(t+2h) + c(2h)^5$$

$$Err_{(X_1)} = 2ch^5 \qquad , \qquad Err_{(X_2)} = c(2h)^5$$

$$X_2 - X_1 = 32ch^5 - 2ch^5 = 30\underbrace{(ch^5)}_{Err_{calc}}$$

$$\boxed{Err_{calc} = \frac{|X_2 - X_1|}{30}}$$

Método Adaptativo

Para o método adaptativo, precisamos variar o tamanho do passo a cada iteração de modo a manter um **erro aceitável** a cada passo.

$$1s \longrightarrow \delta$$
$$h \longrightarrow \epsilon$$

$$h = \frac{\epsilon}{\delta} \Rightarrow \epsilon_{cr} = h_{cr}\delta$$

Método Adaptativo

Para o método adaptativo, precisamos variar o tamanho do passo a cada iteração de modo a manter um **erro aceitável** a cada passo.

$$1s \longrightarrow \delta$$
$$h \longrightarrow \epsilon$$

$$h = \frac{\epsilon}{\delta} \Rightarrow \epsilon_{cr} = h_{cr}\delta$$

$$\frac{\epsilon_{cr}}{\epsilon_{calc}} = \frac{ch_{cr}^5}{ch_{calc}^5} = \frac{30h_{cr}\delta}{|X_2 - X_1|} \Rightarrow h_{cr}^4 = h_{calc}^4\left[\frac{30(h_{calc}\delta)}{|X_2 - X_1|}\right]$$

Método Adaptativo

Para o método adaptativo, precisamos variar o tamanho do passo a cada iteração de modo a manter um **erro aceitável** a cada passo.

$$1s \longrightarrow \delta$$
$$h \longrightarrow \epsilon$$

$$h = \frac{\epsilon}{\delta} \Rightarrow \epsilon_{cr} = h_{cr}\delta$$

$$\frac{\epsilon_{cr}}{\epsilon_{calc}} = \frac{ch_{cr}^5}{ch_{calc}^5} = \frac{30h_{cr}\delta}{|X_2 - X_1|} \Rightarrow h_{cr}^4 = h_{calc}^4\left[\frac{30(h_{calc}\delta)}{|X_2 - X_1|}\right]$$

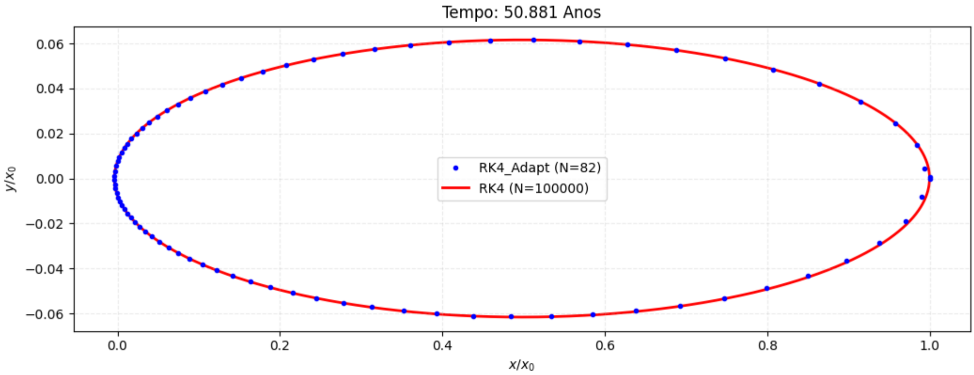
$$\boxed{h_{cr} = h_{calc}\left[\frac{30(h_{calc}\delta)}{|X_2 - X_1|}\right]^{1/4}} \qquad \rho \equiv \frac{(h_{calc}\delta)}{|X_2 - X_1|/30} \begin{array}{l} \leftarrow \text{Erro Alvo} \\ \leftarrow \text{Erro Calculado} \end{array}$$

Método Adaptativo

Algoritmo:

```
time = {...}
h = {...}
delta = {...}
rho = 0
while(rho<1):
  X1 = RK4(RK4(X, h), h) # x(t) -> x(t+h) -> x(t+2h)
  X2 = RK4(X, 2h) # x(t) -> x(t+2h)
  rho = 30*h*delta/abs(X2-X1)
  if(rho < 1): # Err_alvo < Err_calc
    h = h*pow(rho, 1/4) # O próximo h será menor do que o anterior!
  else: # Err_alvo <= Err_calc
    X = X1
    time = time + 2*h
    h = h*pow(rho, 1/4) # O próximo h será maior do que o anterior!
```

Método Adaptativo



Método de Leapfrog

O método de Leapfrog é semelhante ao método de Runge-Kutta de segunda ordem (RK2);
Este método, apesar de possuir a mesma precisão do RK2, ele tem a vantagem de ser reversível (por exemplo, reversível no tempo o que leva a uma conservação de energia).

No método **RK2** tinhamos que:

1.) $x(t+h/2) = x(t) + \frac{h}{2} f(x,t);$

2.) $x(t+h) = x(t) + hf[x(t+h/2), t+h/2];$

3.) $x(t+3h/2) = x(t+h) + \frac{3h}{2} f[x(t+h), t+h];$

4.) $x(t+2h) = x(t+h) + hf[x(t+3h/2), t+3h/2];$

Método de Leapfrog

O método de Leapfrog é semelhante ao método de Runge-Kutta de segunda ordem (RK2);
Este método, apesar de possuir a mesma precisão do RK2, ele tem a vantagem de ser reversível (por exemplo, reversível no tempo o que leva a uma conservação de energia).

No método de **Leapfrog** temos:

1.) $x(t+h/2) = x(t) + \frac{h}{2} f(x,t);$

2.) $x(t+h) = x(t) + hf[x(t+h/2), t+h/2];$

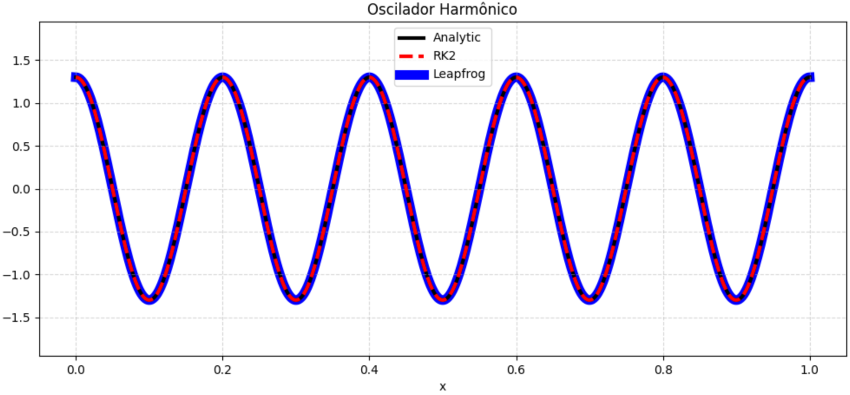
3.) $x(t+3h/2) = x(t+h/2) + hf[x(t+h), t+h];$

4.) $x(t+2h) = x(t+h) + hf[x(t+3h/2), t+3h/2];$

Apenas os passos com h semi-inteiro (a partir do passo 3) são diferentes do RK2!

Método de Leapfrog

Vamos comparar a solução do oscilador harmônico usando o método RK2 e o Leapfrog com 1000 pontos:



Método de Verlet

O método de Verlet é uma forma simplificada do método de Leapfrog para casos onde o lado direiro da equação diferencial não depende da variável do lado esquerdo. Um exemplo disso, é a equação de movimento para uma massa de prova em um campo elétrico ou gravitacional:

$$\boxed{\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{GM}{r^2}\hat{r}} \qquad \boxed{\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1 q_2}{m r^2}\hat{r}}$$

Em casos como este podemos usar o método de Leapfrog apenas com os passos inteiros de h para a evolução de $x(t)$ e passos semiinteiros de h para a evolução da derivada de $x(t)$, ou seja, de dx/dt.

Método de Verlet

Algoritmo

```
x[0] = {...} ; vx[0] = {...}
vx_semi_int = vx[0] + 0.5*h*f(x[0])
for i in range(1,N):
  x[i] = x[i-1] + h*vx_semi_int  # Apenas passos inteiros em x(t)
  vx_semi_int = vx_semi_int + h*f(x[i]) # Apenas passos semi-inteiros em vx(t)

```

Método de Verlet

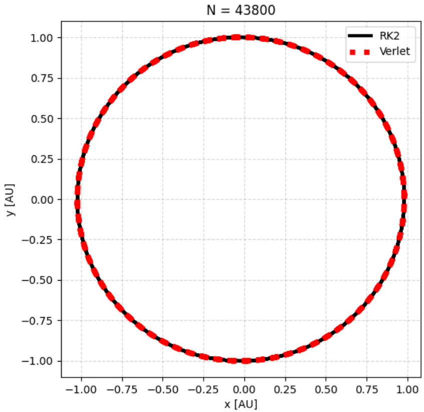


Figura: Problema 3 da lista 11 (Órbita da Terra).

Problemas de Condição de Contorno

Transforme seu problema de condições de contorno em problemas de condições iniciais com o método de tentativa e erro (método do tiro), usando o método da **bissecção** aprendido na unidade anterior do curso.

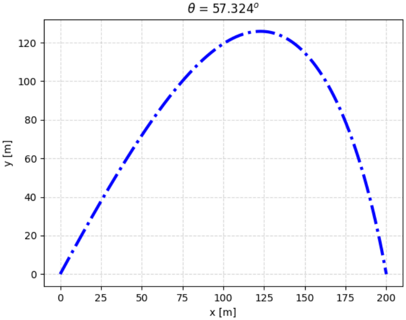


Figura: Problema 4 da lista 11 (Tiro de canhão).