



# Física Computacional

2023/2024

Universidade de Aveiro

Departamento de Física

## Folha de Revisões 1

### **Problema FR1.1: Oscilador quártico — Método de Crank–Nicolson**

a) Vamos voltar a estudar o oscilador quártico do Problema 2.3 (Problema 3 do Trabalho 2).

As propriedades são: massa  $m = 1$  kg,  $K = 1$  N/m e energia potencial

$$V(x) = \frac{1}{2} K x^2 (1 + \alpha x^2)$$

Com  $\alpha = -0.1 \text{ m}^{-1}$ . A força restauradora é

$$F_x(x) = -K x (1 + 2\alpha x^2)$$

As equações diferenciais de primeira ordem são:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = v_x \\ \frac{dv_x}{dt} = -\frac{K}{m} (x + 2\alpha x^3) \end{cases}$$

**Como a segunda equação é não linear, a aplicação do método exige uma abordagem diferente da que foi usada, por exemplo, na alínea d) do Problema 2.1.**

Aplicando o método de Crank-Nicolson ao sistema, obtém-se,

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + (v_k + v_{k+1}) \frac{h}{2} \\ v_{k+1} = v_k - \frac{Kh}{2m} [x_k + x_{k+1} + 2\alpha(x_k^3 + x_{k+1}^3)] \frac{h}{2} \end{cases} \Leftrightarrow$$

Estas equações podem ser escritas como:

$$\begin{cases} x_{k+1} - x_k - (v_k + v_{k+1}) \frac{h}{2} = 0 \\ v_{k+1} - v_k + \frac{Kh}{2m} [x_k + x_{k+1} + 2\alpha(x_k^3 + x_{k+1}^3)] \frac{h}{2} = 0 \end{cases}$$

Neste problema, em cada passo de Crank–Nicolson, vamos usar um método numérico fornecido pelo MATLAB para determinar os valores de  $x_{k+1}$  e  $v_{x,k+1}$  que são raízes do sistema escrito acima.

(Vamos usar a função **fsolve** que permite resolver um sistema de equações não lineares, do tipo  $F(x) = 0$ . Note que no nosso caso temos duas 2 equações,  $F(1) = 0$  e  $F(2) = 0$ ).

### Como implementar em MATLAB?

No corpo do programa, pode começar por definir um vetor de constantes e as opções para a função **fsolve**,

```
const = [h/2, K*h/(2*m), 2*alfa];  
options = optimset('Display','off','Tolx',1e-10,'TolFun',1e-10);
```

O ciclo do método de Crank–Nicolson escreve-se,

```
for k=1:N-1  
    func = @(xv) fcr(xv,x(k),vx(k),const);  
  
    xv0 = [x(k),vx(k)];  
  
    aux = fsolve(func,xv0,options);  
  
    x(k+1) = aux(1);  
  
    vx(k+1) = aux(2);  
end
```

Começa-se por definir uma função anónima, baseada numa função escrita num outro ficheiro.

Quando se chama a função **fsolve**, indica-se  $xv0 = [x(k), vx(k)]$  como os valores perto dos quais deverão ser encontradas as soluções.

Falta é claro, escrever o ficheiro **fcr.m** !!

Complete o seguinte, escrevendo as expressões  $F(1)$  e  $F(2)$  que têm que ser iguais a zero, de acordo com o sistema.

```
function F = fcr(xv,xold,vold,const)

    % const(1), const(2) e const(3) estão definidas no programa
    % principal.

    % xold é x(k) e vold é vx(k).

    % xv(1) é x(k+1) e xv(2) é vx(k+1).

    F(1)=_____ ;

    F(2)=_____ ;

end
```

Usando as condições iniciais  $x_0 = 1\text{ m}$   $v_{x0} = 1\text{ m/s}$ , faça os gráficos de  $x$  e  $v_x$  em função do tempo e também de  $v_x$  em função de  $x$ .

b) Obtenha a amplitude e o período da oscilação.

### Problema FR1.2: Oscilador quártico — Métodos de Runge-Kutta

Repita a alínea **a)** do problema anterior usando o método de Runge–Kutta de 3º ordem representado na seguinte tabela de Butcher .

0			
1/2	1/2		
3/4	0	3/4	
	2/9	1/3	4/9

Calcule a energia total para  $h = 0.01$ , e compare com o valor obtido pelo método de Euler-Cromer (Problema 2.3 do Trabalho 2).

### Problema FR1.3: Oscilador quártico — ode45

Repita a alínea **a)** do problema anterior usando a **ode45** do MATLAB. Compare o valor obtido para a energia total, e compare com os resultado obtido pelo método de Runge -Kutta de 3ª ordem (FR1.2)