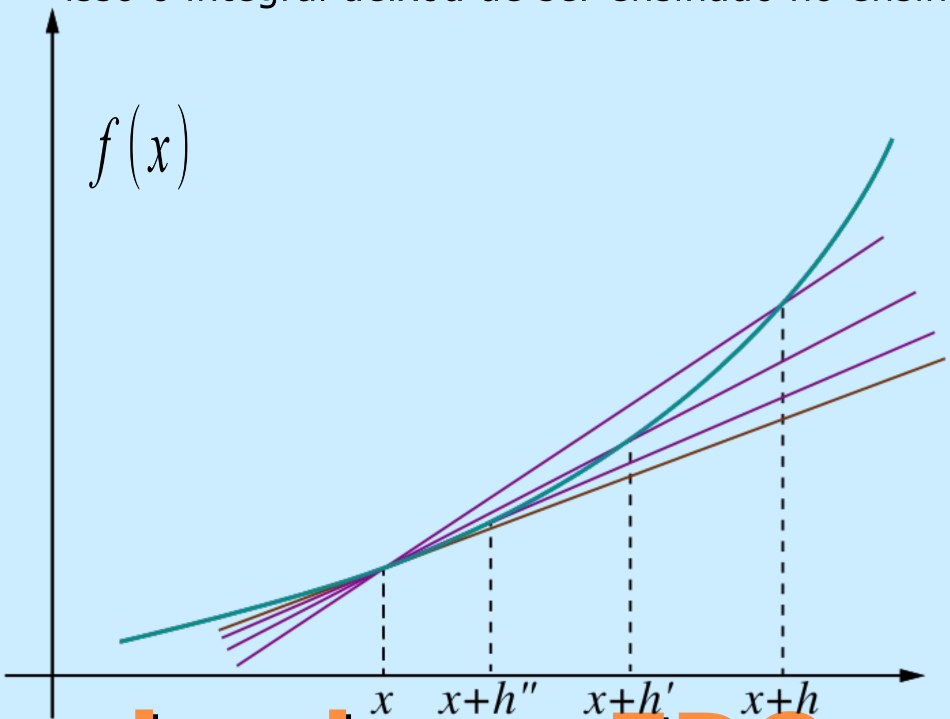
Física Computacional 5

1. Derivadas com diferenças finitas
   a. O conceito de derivada, menos simples que o de integral
   b. Cálculo numérico da derivada com diferenças finitas
   c. Um outro conceito, Equação Diferencial Ordinária
   d. Solução analítica das EDO lineares
2. Resolvendo equações diferenciais com o c++
   a. O algoritmo de Euler para EDOs de 1ª ordem
   b. O melhoramento de Runge-Kutta
   c. Uma EDO de 2ª ordem equivale a duas EDOs de 1ª ordem
   d. O algoritmo de Numerov para algumas EDOs de 2ª ordem

Derivadas e EDOs

fc.trabalhosalunos@gmail.com

- Derivadas com diferenças finitas
- O conceito de derivada, menos simples que o de integral
  - O conceito de derivada é menos simples de entender que o de integral, pois o integral pode definir-se como uma área ou como uma soma. A derivada necessita do conceito de declive e de tangente, que se define no ensino secundário com o limite de uma sucessão. No entanto analíticamente é mais difícil calcularmos um integral, que necessita do conceito de primitiva, e por isso o integral deixou de ser ensinado no ensino secundário.



$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \xrightarrow[h\to 0]{} f'(x)$$

Derivadas e EDOs

Derivadas e EDOs

- Cálculo numérico da derivada com diferenças finitas
  - http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference
  - Numéricamente calculamos a derivada com um passo h finito, mas nesse caso podemos definir tres derivadas diferentes, a avançada, a retardada e a centrada

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

$$f'(x)=\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2\,h}$$

e podemos utilizar qualquer uma delas, sendo a diferença finita centrada a com menor erro. Podemos ainda utilizar expressões com menor erro, que incluem não 2 ou 3 pontos, mas 4, 5, 6, etc

- Um outro conceito, Equação Diferencial Ordinária
  - Uma equação diferencial é uma equação com a qual pretendemos determinar uma função, mas que envolve as derivadas da função.
  - Um caso particular mais simples é o da Equação Diferencial Ordinária, que envolve apenas derivadas ordinárias, ou seja não envolve derivadas parciais,
  - As equações que pretendemos aqui resolver começam por por-se na forma,

$$\text{no caso de uma eq. de 1a ordem de variável x,}$$
$$f' = f'(f, x),$$
$$\text{no caso de uma eq. de 2a ordem de variável x,}$$
$$f'' = f''(f', f, x),$$
$$\text{no caso de uma eq. de na ordem de variável x,}$$
$$f^{(n)} = f^{(n)}\left(f^{(n-1)}, f^{(n-2)}, \ldots f', f, x\right).$$

  - Notamos que cada EDO tem em geral muitas soluções, e para fixarmos a solução pretendida, precisamos de n condições fronteira para uma EDO de ordem n.

Derivadas e EDOs

- Solução analítica das EDOs lineares
  - No caso de termos EDOs lineares, ou seja cuja equação é linear nas derivadas de f, existe uma solução analítica que aqui revemos, pois mostra que o conjunto de soluções é um espaço vectorial, exemplifica a necessidade de condições fronteira, e treina para a solução numérica de EDOs de ordem n com sistemas de equações de ordem 1.

uma EDO é linear quando se pode escrever como uma combinação linear,

$$c_n f^{(n)} + c_{n-1} f^{(n-1)} + c_{n-2} f^{(n-2)} + c_1 f' + c_0 f = 0,$$

e obviamente as soluções são um espaço linear complexo pois a soma de duas soluções, ou o produto de uma solução por um número é solução .

No caso de n=1, a solução é facilmente obtida,

$$f'(x) = a\, f(x) \Rightarrow f(x) = f_0 e^{a x},$$

tal como certamente já resolveram no cado do declínio radioactivo,

$$dN/dt = -\lambda N \Rightarrow N(t) = N_0 e^{-\lambda t}.$$

No entanto a maioria das EDO em física são de 2a ordem, pelo que convém estudarmos a solução de EDOs de qualquer ordem

Derivadas e EDOs

◦ Assim vamos ilustrar como resolver uma EDO de 2ª ordem linear, recorrendo a um pequeno truque muito útil pois é directamente extendido para qualquer ordem n.

Consideremos então uma EDO de 2a ordem que escrevemos na forma

$$f''(x) = a_1 f' + a_0 f$$

o truque consiste em usar uma função auxiliar g afim de rescrevermos a nossa EDO de 2a ordem na forma de duas EDO de 1a ordem,

$$f' = g\,,$$
$$g' = a_1 g + a_0 f\,,$$

que é uma equação matricial, e se a diagonalizarmos para duas novas funções f^* e g^* ficamos com duas equações de 1a ordem,

¿
¿
$f*$
$g*$¿
¿
¿

cuja solução já conhecemos,

¿

$$f*(x) = f*_0 e^{d_0 x}\,, \qquad g*(x) = g*_0 e^{d_1 x}$$

¿

ou seja voltando à nossa função inicial, que é uma combinação linear destas

¿

$$\begin{matrix} f*' \\ g*¿ \end{matrix} = \begin{bmatrix} d_0 & 0 \\ 0 & d_1 \end{bmatrix}¿$$

¿

¿

Derivadas e EDOs

- O uso da função auxiliar bem como a diagonalização da matriz extendem-se de forma óbvia para qualquer ordem n, e no caso de um n geral obtemos que,

a solução geral da nossa EDO linear de ordem n se escreve na forma

$$f(x) = A_0 e^{d_0 x} + A_1 e^{d_1 x} + \ldots A_n e^{d_n x},$$

o que verifica que o conjunto das soluções é um espaço vectorial complexo de dimensão n, que necessita de n condições fronteira para fixarmos os A_0, A_1, $\ldots A_n$. E também, cada uma das exponenciais $e^{d_i x}$ é solução da EDO. Assim a forma mais directa de obtermos os parâmetros d_i consiste em substituirmos a exponencial na EDO, de forma que obtemos os d_i resolvendo uma ~simples equação algébrica

$$c_n d^n + c_{n-1} d^{n-1} + \ldots c_0 = 0.$$

- Esta solução analítica pode ser utilizada como teste para os nossos códigos numéricos.

Derivadas e EDOs

- Resolvendo equações diferenciais com o c++
- O algoritmo de Euler para EDOs de 1ª ordem
  - http://en.wikipedia.org/wiki/Euler_method

Pretendemos resolver a EDO

$$f' = f'(f, x),$$

partindo da condição inicial (condição fronteira)

$$f(x_0) = f_0.$$

Euler notou usando a diferença finita avançada para a derivada como equação, obtemos uma solução para o ponto seguinte,

$$f(x+h) = f(x) + h\, f'(f, x)$$

assim obteve um algoritmo que permite calcular iterativamente a função f,

$$x_{n+1} = x_n + h$$

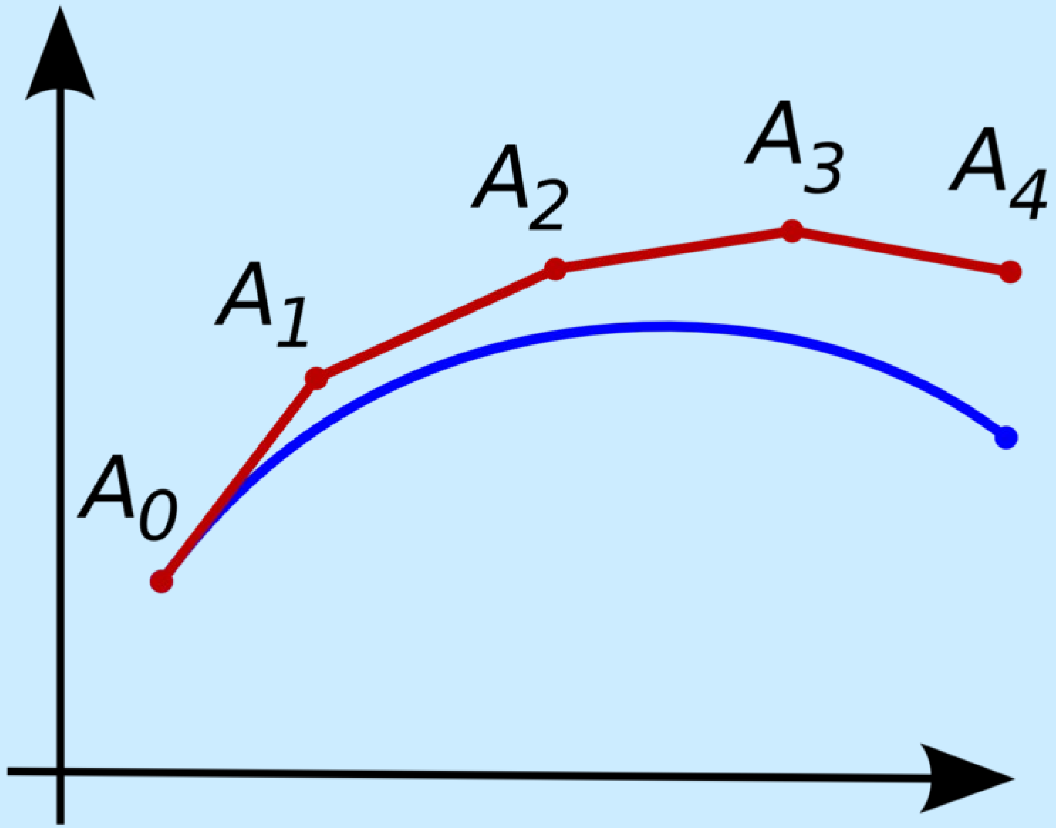
$$f_{n+1} = f_n + h k_1$$

onde os declive é dado pela EDO no ponto de índice n,

$$k_1 = f'(f_n, x_n)$$

Derivadas e EDOs

- Gráficamente, utilizamos o a tangente, dada pela derivada, como declive de um segmento de recta para calcular aproximadamente o ponto seguinte



Derivadas e EDOs

- No entanto o método de euler é pouco preciso, pois se utilizarmos a série de Taylor,

$$f(x+h)=f(x)+h\,f'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\frac{h^3}{6}f'''(x)+\dots$$

- vemos que fazemos um erro de ordem h^2 o que é pouco eficiente, pelo que é conveniente encontrarmos algoritmos com uma maior precisão numérica

Derivadas e EDOs

- O melhoramento de Runge-Kutta.
  - http://en.wikipedia.org/wiki/Runge-Kutta_methods

Pretendemos resolver a EDO com a condição inicial

$$f' = f'(f, x), \quad f(x_0) = f_0$$

o Algoritmo de Runge-Kutta, dá um erro da ordem de k^5 (no total da ordem de k^4)
partindo em dois o passo h na variável x, e calculando o passo de f com 4 declives,

$$x_{n+1} = x_n + h$$

$$f_{n+1} = f_n + \tfrac{1}{6} h \left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4 \right)$$

onde os declives sao: no início k_1, dois declives centrais k_2 e k_3, e no fim k_4,

$$k_1 = f'(f_n, x_n)$$

$$k_2 = f'\left(f_n + \tfrac{1}{2} h k_1, x_n + \tfrac{1}{2} h\right)$$

$$k_3 = f'\left(f_n + \tfrac{1}{2} h k_2, x_n + \tfrac{1}{2} h\right)$$

$$k_4 = f'\left(f_n + h k_3, x_n + h\right)$$

Derivadas e EDOs

Derivadas e EDOs

- Uma EDO de 2ª ordem, mesmo não linear, equivale a duas de 1ª,

consideremos de novo uma EDO de ordem 2, agora escrita na forma,

$$f'' = f''(f', f, x)$$

o truque consiste em usar uma função auxiliar g afim de rescrevermos a nossa EDO de 2a ordem na forma de duas EDO de 1a ordem,

$$f' = g\,,$$

então a função g' equivale à função f'',

$$\begin{aligned} g' &= f''(f', f, x) \\ &= g'(f', f, x) \\ &= g'(g, f, x) \end{aligned}$$

pelo que, se juntarmos as duas equações, ficamos não com uma EDO de 2a ordem mas sim com um sistema de duas EDO de 1a ordem,

$$\begin{aligned} f' &= g \\ g' &= g'(g, f, x) \end{aligned}$$

Notamos ainda que este truque da separação num sistema de equações de 1a ordem é válido para EDOs de qualquer ordem.

Derivadas e EDOs

- O algoritmo de Numerov para EDOs estritamente de 2ª ordem
  - Na verdade usamos aqui uma versão simplificada do algoritmo de Numerov,
  - http://en.wikipedia.org/wiki/Numerov's_method

Podemos resolver directamente uma EDO estritamente de 2a ordem

$f''=f''(f,x)$, de cond. front. $f(x_0)=f_0$, $f'(x_0)=f'_0$

usando a diferença finita para a 2a derivada,

$$f''(x)=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2},$$

resolvendo-a podemos calcular o ponto seguinte,

$$f(x+h)=2f(x)-f(x-h)+h^2 f''(f,x)$$

o que resulta no algoritmo,

$$x_{n+1}=x_n+h$$

$$f_{n+1}=2f_n-f_{n-1}+h^2 f''_n$$

onde precisamos de duas condições iniciais f_o e f_1.