LISTA 04: FIS670 - Métodos Computacionais da Física. (Prof. Leandro Rizzi)

Exercício 1. Considere o modelo de Verhulst (1838), o qual descreve a evolução do número de indivíduos em uma população através da expressão:

$$\bar{y}(t) = \frac{\kappa y_0}{y_0 + (\kappa - y_0)\, e^{-rt}} \quad ,$$

onde r e κ são parâmetros que representam, respectivamente, a taxa de crescimento da população e a capacidade de suporte do meio que estão inseridos os indivíduos. Sabe-se que expressão acima é a solução de um *problema de valor inicial* (PVI), *i.e.* onde a condição inicial $y_0 = y(t_0)$ é conhecida, o qual é definido pela seguinte equação diferencial ordinária (EDO):

$$\frac{dy}{dt} = r\, y \left(1 - \frac{y}{\kappa}\right) \quad .$$

Se o PVI é *bem posto*, isto é, possui uma única solução no intervalo $t \in [a, b]$, a estimativa numérica w para a solução $\bar{y}(t)$ pode ser obtida através de diversos métodos utilizando diferenças finitas. Tais métodos requerem a discretização do intervalo em $N + 1$ pontos igualmente espaçados e fornecem $w_i \simeq \bar{y}(t_i)$, com $t_i = t_0 + ih$, $t_0 = a$, $t_N = b$ e $h = (b - a)/N$. Dentre os métodos mais comuns estão os *métodos de Taylor*, os quais são baseados nas expansões em série de Taylor. Por exemplo, assumindo $f(t_i, y(t_i)) = dy/dt \simeq (w_{i+1} - w_i)/h = f(t_i, w_i)$ obtemos o *método de Euler* (página 217 de [1]), onde:

$$\bar{y}(t_{i+1}) \simeq w_{i+1} = w_i + hf(t_i, w_i) \quad ,$$

com $w_0 = y_0 = y(t_0)$ e $i = 1, \ldots, N - 1$.

a) Considerando $y_0 = 198$, $r = 0.03\,\text{dias}^{-1}$ e $\kappa = 4300$, implemente o método de Euler para obter w_i no intervalo $t_0 = 0\,\text{dias}$ e $t_N = 365\,\text{dias}$. Compare os resultados utilizando $N = 365$ e $N = 730$ intervalos. Além de graficar as soluções exata ($\bar{y}(t_i)$) e estimada (w_i), calcule e grafique o erro absoluto $\varepsilon_i = |\bar{y}(t_i) - w_i|$.

b) Repita o item (a) utilizando o método *preditor-corretor* de Euler (pág. 231 de [1]), onde uma estimativa preliminar $\tilde{w}_{i+1} = w_i + hf(t_i, w_i)$ é utilizada para fornecer a estimativa de fato: $w_{i+1} = w_i + (h/2)[f(t_i, w_i) + f(t_{i+1}, \tilde{w}_{i+1})]$.

c) Um método mais preciso para obter w_i é o *método de Runge-Kutta de quarta ordem* (veja página 232 de [1]). Escreva uma subrotina que implemente esse método e refaça as análises do item (a).

d) Considerando $\kappa = 4300$ e $N = 730$, utilize o método do item (c) para obter as estimativas w_i durante os mesmos 365 dias com os seguinte parâmetros: (i) $y_0 = 6600$ e $r = 0.01\,\text{dias}^{-1}$; e (ii) $y_0 = 4200$, $r = -0.03\,\text{dias}^{-1}$. Grafique os resultados no mesmo gráfico, inclusive aqueles obtidos no item (c) com $N = 730$, e comente a influência dos parâmetros na dinâmica da população do sistema.

Exercício 2. Considere o modelo epidêmico SIRS da Ref. [2], o qual é descrito pelo conjunto de EDOs:

$$\frac{dS}{dt} = mR(t) - b'[S(t)]^2 I(t) \quad , \qquad \frac{dI}{dt} = b'[S(t)]^2 I(t) - aI(t) \quad , \qquad \frac{dR}{dt} = aI(t) - mR(t) \quad ,$$

onde $S(t)$, $I(t)$ e $R(t)$ representam, respectivamente, o número de indivíduos *susceptíveis* (S), *infectados* (I) e *recuperados* (R) de uma população em um dado tempo t. Os parâmetros $a > 0$, $b' = b/N_T^2 > 0$ e $m > 0$ denotam as taxas de recuperação, infecção e renovação (indivíduo volta a ser susceptível à doença), respectivamente. O modelo descreve a dinâmica de conversão da população de indíviduos entre os estados SIRS dada as condições iniciais e o número total de indivíduos constante $N_T = S(t) + I(t) + R(t)$.

a) Dados os parâmetros $a = 0.2$, $b = 0.8$, $m = 0.01$, $N_T = 40.10^3$ e as condições iniciais, $I_0 = I(0) = 10$, $R_0 = 0$ e $S_0 = S(0) = N_T - I_0 - R_0$, calcule as estimativas numéricas para $S(t)$, $I(t)$ e $R(t)$ no intervalo $t_0 = 0$ e $t_N = 700$ (com $N = 7000$) considerando o procedimento descrito na página 265 da Ref. [1] e utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Plote os gráficos de evolução das populações e compare os resultados com as soluções estacionárias [2]: $S^* = N_T(a/b)^{1/2}$, $I^* = N_T[1 - (a/b)^{1/2}]/[1 + (a/m)]$ e $R^* = N_T[1 - (a/b)^{1/2}]/[1 + (m/a)]$.

Exercício 3. Considere uma partícula de massa m submetida ao potencial de Morse [3]:

$$V(r) = -D\left[1 - \left(1 - e^{-a(r - r_e)}\right)^2\right] \quad ,$$

onde D define a escala de energia (ou "profundidade do poço"), r_e denota o mínimo do potencial e a pode ser associado à "constante de força" do potencial. Pela segunda lei de Newton temos

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = \frac{F(r)}{m} \quad ,$$

onde $F(r) = -dV(r)/dr$ é a força que atua na partícula localizada em r. Considere os parâmetros $E = -0.8$, $D = 1.0$, $a = 1.0$, $m = 1.0$ e $r_e = 0.0$.

a) Calcule a expressão analítica para a força $F(r)$ e plote os gráficos de $V(r)$ e $F(r)$ no intervalo $r \in [-1, 5]$.

b) Como esse PVI envolve uma equação de segunda ordem, além da posição inicial $r_0 = r(0)$, é preciso definir o valor da derivada primeira $v(t) = dr/dt$, também no instante inicial. EDOs de segunda ordem podem ser reescritas como um conjunto de duas EDOs de primeira ordem, por exemplo,

$$\frac{dr}{dt} = v(t, r(t)) \quad ,$$

$$\frac{dv}{dt} = f(t, v(t), r(t)) \quad ,$$

onde o PVI é bem posto se conhecemos as duas condições iniciais: $r_0 = r(t_0)$ e $v_0 = v(t_0) = \pm\sqrt{(2/m)|E - V(r_0)|}$. Considerando $r_0 = 0$, utilize o método de Runge-Kutta de quarta ordem, descrito na páginas 265 e 266 da Ref. [1], para obter as estimativas numéricas para $r(t)$ e $v(t)$ no intervalo $t_0 = 0$ e $t_N = 10$ com $N = 200$ intervalos. Compare $r(t)$ obtido com a solução exata [3], $\bar{r}(t) = r_0 + a^{-1}\ln[s(t)]$, onde

$$s(t) = -\frac{D}{E}\left[1 - \sqrt{\frac{E+D}{D}}\cos(\omega_0 t - \delta)\right] \quad ,$$

com $\omega_0 = \sqrt{-2Ea^2/m}$ e δ é uma fase que pode ser obtida considerando $s(t_0) = 1$, isto é, $\ln[s(t_0)] = 0$. Inclua o gráfico do erro absoluto $\varepsilon(t_i) = |r(t_i) - \bar{r}(t_i)|$.

Exercício 4. Problemas importantes na Física (*e.g.* gravitação newtoniana e equação de Schrödinger independente do tempo) requerem a solução da equação de Poisson, que é dada pela seguinte EDO de segunda ordem:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x) \quad .$$

Considerando diferenças finitas podemos discretizar as derivadas segunda e primera como:

$$\left.\frac{d^2u}{dx^2}\right|_{x=x_i} \simeq \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} = f(x_i) \qquad \text{e} \qquad \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=x_i} \simeq \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = g(x_i) \quad ,$$

onde $u_i = u(x_i)$, com $x_i = ih + a$ no intervalo $x \in [a, b]$ discretizado em $N+1$ subintervalos igualmente espaçados de tamanho $h = (b-a)/(N+1)$. Estimativas numéricas para a solução u_i podem ser encontradas de acordo com o *problema de valor de contorno* (PVC), *i.e.* onde as condições de fronteira são conhecidas.

a) Considere o caso da equação de calor estacionária, $\nabla^2 u = 0$, para obter a temperatura $u(x)$ em uma barra delgada de comprimento L cujas extremidades possuem temperaturas fixas, isto é, $u_0 = T_0$ e $u_{N+1} = T_{N+1}$. Esse PVC possui uma condição de fronteira conhecida como de *Dirichlet* e estimativas de $\mathbf{u}^T = (u_1, u_2, \ldots, u_N)$ podem ser obtidas a partir da resolução do sistema linear $\mathbf{M}\cdot\mathbf{u} = \mathbf{w}$, com

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \text{e} \qquad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} f(x_1)h^2 - u_0 \\ f(x_2)h^2 \\ \vdots \\ f(x_N)h^2 - u_{N+1} \end{pmatrix} \quad .$$

Considerando $L = 30\,\text{cm}$, $T_0 = 305\,\text{K}$, $T_{N+1} = 390\,\text{K}$ e $N = 99$, obtenha estimativas numéricas para $u(x)$ utilizando o método de decomposição LU (vide Lista 03) e compare com o resultado exato esperado (inclua na análise o cálculo e o gráfico do erro absoluto entre as soluções exata e estimada em função de x_i).

b) Assuma que essa mesma barra, feita de um material com condutividade térmica $\kappa = 1.04\,\text{cal/(cm.K.s)}$, esteja agora em contato com um aquecedor que fornece calor à todos os pontos da barra igualmente a uma taxa de $q = 1.5\,\text{cal/(cm.s)}$. Para essa nova situação temos a seguinte EDO: $\nabla^2 u = -q/\kappa$. Sabendo que a temperatura em x_0 é mantida constante em $T_0 = 305\,\text{K}$ e considerando que calor seja perdido pela extremidade x_{N+1} a uma taxa de

$$g(x_{N+1}) = \left.\frac{du}{dx}\right|_{x=x_{N+1}} = -4\ \text{K/cm} \quad ,$$

que é também conhecida como condição de fronteira de *Neumann*, utilize um procedimento similar ao descrito na Ref. [4] (condições de contorno mistas) para obter estimativas da temperatura $u(x)$ nos pontos x_i indeterminados. Compare a estimativa obtida e a expressão analítica exata incluindo o cálculo e o gráfico do erro absoluto em função de x_i.

Referências:

[1] J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3rd ed.)
[2] O. E. Aiello *et al.*, Physica A 282 (2000) 546.
[3] F. L. Moraes Barboza *et al.*, Rev. Bras. Ens. Fís. 29 (2007) 543.
[4] `http://farside.ph.utexas.edu/teaching/329/lectures/node64.html`
(veja notação em: `http://farside.ph.utexas.edu/teaching/329/lectures/node62.html`)