16ª Aula - Métodos Numéricos e Optimização (I)

Programação
Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Samuel M. Eleutério
sme@tecnico.ulisboa.pt

Departamento de Física
Instituto Superior Técnico
Universidade de Lisboa

Métodos Numéricos - Introdução

- A **questão central** do estudo de qualquer **sistema** é (ou tende a ser) a **previsão** do seu **comportamento** em instantes posteriores (ou anteriores) àqueles para os quais dispomos de **informação** – **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**).
- Essa **descrição** pode fazer-se por:
  1. **Equações Diferenciais**: equações que relacionam as **funções** com as suas **derivadas**, tendo portanto um **carácter local**. São **classificadas** pela derivada de **maior grau** que incluem.
  2. **Equações Integrais**: equações que relacionam as **funções** com os seus **integrais**, tendo portanto um **carácter não local** (ou **global**).
- Essas duas formulações são **basicamente equivalentes** e a opção por uma ou outra tem essencialmente a ver com o modo como se **adaptam ao problema** em causa.
- Aqui vamos limitarmo-nos às **equações diferenciais**.

Introdução

- Porque **experimentalmente** se verifica que a **força** está directamente relacionada com a **aceleração**, isto é, com a **segunda derivada** do espaço em ordem ao tempo, uma quantidade muito significativa das **equações diferenciais** em Física são de **2ª ordem**.
- Do ponto de vista **prático**, para **cada problema**, temos de responder às seguintes **questões**:
  1. Que **equação** (em geral, diferencial) deveremos usar para **descrever o problema** em causa;
  2. Que **métodos** podemos usar para **resolver** total ou parcialmente essa **equação** e... **aplicá-los**.
- Uma parte muito substancial dos **trabalhos em Física** destina-se a **responder** uma destas questões.

Introdução

- No nosso caso vamos estar mais interessados na **segunda tarefa**, isto é, uma vez **conhecida** uma certa **equação diferencial**, como podemos obter a sua **solução numérica** a partir das **condições iniciais** específicas do **problema**.
- E, qual o **compromisso** que devemos fazer entre a **precisão dos cálculos**, o **tempo de desenvolvimento**, o **tempo de cálculo** e, de um modo geral, com os **recursos disponíveis**.
- Na obtenção de **soluções** existe ainda um **outro problema**: o estabelecimento das **condições fronteiras** (**condições iniciais**). É, em muitos casos, uma questão **bastante difícil** de resolver e **depende**, essencialmente, do **tipo de equação** em causa. Não iremos estudá-la aqui.

Equações Diferenciais

- Seja a **equação diferencial de 1ª ordem**:

  $\frac{dx}{dt} = f(x,t)$

  em que 'f(x,t)' é uma **função** de '**x**' e de '**t**'.
- Um **caso simples** e conhecido de todos é (com '**c**' constante):

  $\frac{dx}{dt} = c \qquad \Rightarrow \qquad dx = c\,dt \qquad \Rightarrow \qquad x = \int c\,dt + c_1$

  em que $\mathbf{c_1}$ é uma **constante de integração** e com **solução**:

  $x(t) = c\,t + c_1$
- A solução aqui obtida chama-se **solução geral** da **equação diferencial** e descreve os **processos físicos** por ela regidos.
- Ao **particularizar**, adaptam-se as **constantes de integração** a um **problema** específico, obtendo-se uma **solução particular**.
- Designa-se por **fixação** das **condições iniciais** (ou **condições fronteiras**), o processo de obtenção dos valores das **constantes de integração**, que satisfazem um determinado **problema**.

Declínio Radioactivo

- Um exemplo simples de uma **equação diferencial** é o problema do **declínio radioactivo**:

  Numa dada amostra, é constante a fracção de núcleos que se desintegram por unidade de tempo.

- Ou seja,

$$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\,\lambda\, N(t) \qquad \Rightarrow \qquad \frac{dN}{dt} = -\,\lambda\, N$$

- **Resolvendo**:

$$\frac{dN}{N} = -\,\lambda\, dt \quad \Rightarrow \quad ln(N) - ln(N_o) = ln(\frac{N}{N_o}) = -\,\lambda\,(t - t_o)$$

  Aplicando a **função exponencial** e fazendo $\mathbf{t_o = 0}$, tem-se:

$$N = N_o\, e^{-\lambda\, t}$$

- Define-se **vida média** (τ) de uma substância radioactiva como o **intervalo de tempo** necessário para que uma dada quantidade de núcleos dessa substância se **reduza a metade**:

$$\frac{N_o}{2} = N_o\, e^{-\lambda\, t_{1/2}} \qquad \Rightarrow \qquad \tau = t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

Declínio Radioactivo - Resolução Numérica ('Prog30_01.c')

- Para se fazer a **resolução numérica** do **declínio radioactivo** vamos recorrer à **expressão inicial** que vimos anteriormente:

  $$\frac{N(t+\delta t)-N(t)}{\delta t} = -\lambda N(t)$$

  e explicitemos o **número de núcleos** no instante '$\mathbf{t} + \delta\mathbf{t}$' em **função** dos valores no instante '**t**':

  $$N(t+\delta t) = N(t) - \lambda\, N(t)\, \delta t$$

- Ou seja, o **número de núcleos** no instante '$\mathbf{t} + \delta\mathbf{t}$' é igual ao número de núcleos no instante '**t**' menos '$\lambda\, \mathbf{N}(\mathbf{t})\, \delta\mathbf{t}$'.
- Assim, a **expressão** da **lei do declínio** fornece-nos a **forma explícita** para fazer a sua **implementação numérica**.

Equação Diferencial de 1ª Ordem - Método de Euler

Generalizando os resultados anteriormente exemplificados para o **declínio radioactivo**:

- Seja uma **equação diferencial de 1ª ordem**:

  $$\frac{dx}{dt} = f(x,t)$$

  podemos **discretizá-la**:

  $$\frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} = f(x(t),t)$$

- **Explicitando** o valor de '**x**' no instante '$\mathbf{t+\delta t}$':

  $$x(t+\delta t) = x(t) + f(x(t),t)\,\delta t$$

- A expressão anterior fornece um **método** para **resolver iterativamente** a **equação diferencial**.
- A este **algoritmo** chama-se **método de Euler**.
- Como já vimos, para outros cálculos, a **escala do acréscimo** '$\boldsymbol{\delta}\mathbf{t}$' é **essencial** para se terem **bons resultados**. Há que obter um **equilíbrio** entre a **precisão** dos cálculos e a sua **eficiência**.