Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Métodos Avanzados

basado en el libro “**Numerical Methods for Physics**”, de Alejandro L. García

Introducción

Hemos tratado de resolver un problema simple de dos cuerpos, y descubrimos que los métodos utilizados no eran apropiados.
Esto es algo general en la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias, y muchas veces, se requiere de métodos sofisticados, aún para resolver problemas relativamente simples.

Método de Runge–Kutta

Este es el método más popular para resolver ODE's del tipo

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = f(\mathbf{u}(t), t) \tag{1}$$

donde el vector de estado $\mathbf{u}(t) = [u_1(t), u_2(t), \ldots, u_N(t)]$ es la solución buscada.
En el problema de Kepler visto anteriormente

$$\mathbf{u}(t) = [x(t), y(t), v_x(t), v_y(t)] \tag{2}$$

Método de Runge–Kutta

Considerando un ejemplo de 1-dimensión, la expansión de Taylor se puede escribir:

$$x(t+\tau) = x(t) + \tau \frac{dx(\xi)}{dt} = x(t) + \tau f(x(\xi), \xi). \qquad (3)$$

En el método de Euler se usa $\xi = t$; en el de Euler-Cromer $\xi = t$ para la ecuación de la velocidad, pero $\xi = t + \tau$ para la posición. En el método de Runge–Kutta se usa $\xi = t + \frac{1}{2}\tau$. Sin embargo, como $x(t + \frac{1}{2}\tau)$ no se sabe, se puede hacer un paso simple de Euler para calcular $x^*(t + \frac{1}{2}\tau) = x(t) + \frac{1}{2} f(x(t), t)$

Método de Runge–Kutta

Como ejemplo, veamos la ecuación

$$\frac{dx}{dt} = -x; \qquad x(t=0) = 1 \tag{4}$$

cuya solución es $x(t) = e^{-t}$.
El método de Euler con un paso de $\tau = 0.1$ da

$$\begin{aligned}
x(0.1) &= 1 + 0.1(-1) = 0.9 \\
x(0.2) &= 0.9 + 0.1(-0.9) = 0.81 \\
x(0.3) &= 0.81 + 0.1(-0.81) = 0.729 \\
x(0.4) &= 0.729 + 0.1(-0.729) = 0.6561
\end{aligned}$$

comparado con la solución exacta $x(0.4) = e^{-0.4} \approx 0.6703$.

Método de Runge–Kutta

Si ahora vemos cómo funciona Runge–Kutta con un paso de $\tau = 0.2$:

$$\begin{aligned} x^*(0.1) &= 1 + 0.1(-1) = 0.9 \\ x(0.2) &= x(0) + \tau f(x^*(0.1), 0.1) = 1 + 0.2(-0.9) = 0.82 \\ x^*(0.3) &= 0.82 + 0.1(-0.82) = 0.738 \\ x(0.4) &= 0.82 + 0.2(-0.738) = 0.6724 \end{aligned}$$

comparado con la solución dada por Euler $x(0.4) =\approx 0.6561$ y la exacta $x(0.4) = e^{-0.4} \approx 0.6703$.

Método de Runge–Kutta

En forma general, el método de Runge–Kutta de segundo orden se escribe

$$\mathbf{u}(t+\tau) = \mathbf{u}(t) + \tau \mathbf{f}(\mathbf{u}^*(t + \frac{1}{2}\tau), t + \frac{1}{2}\tau). \tag{5}$$

o sea:

$$\mathbf{u}(t+\tau) = \mathbf{u}(t) + \tau \mathbf{f}(\mathbf{u}(t) + \frac{1}{2}\tau \mathbf{f}(\mathbf{u}(t), t), t + \frac{1}{2}\tau). \tag{6}$$

Método de Runge–Kutta

El método de Runge–Kutta de cuarto orden se escribe

$$\mathbf{u}(t+\tau) = \mathbf{u}(t) + \frac{1}{2}\tau[\mathbf{f}(\mathbf{u}(t), t) + \mathbf{f}(\mathbf{u}^*(t+\tau), t+\tau)] \qquad (7)$$

donde

$$\mathbf{u}^*(t+\tau) \equiv \mathbf{u}(t) + \tau\mathbf{f}(\mathbf{u}(t), t). \qquad (8)$$

Método de Runge–Kutta

Reemplazando, se puede construir el método de cuarto orden:

$$\mathbf{u}(t+\tau) = \mathbf{u}(t) + \frac{1}{6}\tau[\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_3 + \mathbf{F}_4] \tag{9}$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{F}_2 &= \mathbf{f}(\mathbf{x} + \frac{1}{2}\tau\mathbf{F}_1, t + \frac{1}{2}\tau) \\ \mathbf{F}_3 &= \mathbf{f}(\mathbf{x} + \frac{1}{2}\tau\mathbf{F}_2, t + \frac{1}{2}\tau) \\ \mathbf{F}_4 &= \mathbf{f}(\mathbf{x} + \tau\mathbf{F}_3, t + \tau) \end{aligned} \tag{10}$$

Ejercicios

1. Utilizar el programa orbit.f para calcular la órbita de un cometa, utilizando el método de Runge–Kutta. La masa del cometa es $m = 1$, su distancia radial inicial es 1 AU, la velocidad tangencial inicial es π AU/año, un paso temporal de $\tau = 0.005$ años y un tiempo total de cálculo de 1 año. Comparar las órbitas obtenidas en los diferentes métodos.
2. Qué test utilizaría para evaluar las soluciones?
3. Modificar orbit.f para agregarle una fuerza de atracción de un objeto muy distante. Suponer que la órbita (no perturbada) es circular y la magnitud de la fuerza es 1% de la fuerza gravitacional inicial. Graficar el momento angular en función del tiempo.

Ejercicios

1. Cuánto tardaría la Tierra en estrellarse contra el Sol si perdiera súbitamente su velocidad orbital?
2. Repetir el primer problema, pero ahora la velocidad inicial es $\frac{\pi}{2}$ AU/año.
3. Escribir un programa para simular una dispersión de Rutherford, en la cual una partícula α de 5 MeV y con un parámetro de impacto de 10 fm, se deflecta por un núcleo de oro. Encontrar el ángulo de deflección.

Métodos adaptativos

Como vimos en el ejemplo anterior, un cálculo decente de la trayectoria de un cometa con órbita excentrica exige pasos temporales de horas, o minutos.
El problema es que es probable que eso sólo sea necesario en una pequeña parte de la órbita (cerca al perihelio), pero no en el aphelio.
La idea entonces es seleccionar algún $\tau_{\min}$ y $\tau_{\max}$, e ir cambiando entre uno y otro.
Si tenemos que hacer esto por ensayo y error, sería peor que jugarse directamente con el cálculo mas extenso.

Métodos adaptativos

El algoritmo de Runge–Kutta adaptativo sería entonces

- Hacer 2 pasos temporales chicos, o sea pasar de $x(t)$ a $x(t + \tau/2)$ y de allí a $x(t + \tau) \equiv x_s(t + \tau)$.
- Hacer un sólo paso temporal equivalente a los 2 anteriores, o sea de $x(t)$ a $x_b(t + \tau)$.
- Calcular el error de truncamiento estimado $\Delta_c = |x_b - x_s|$
- Calcular el nuevo valor de τ_{new}, en base al error obtenido y el esperado inicialmente (Δ_i)

Métodos adaptativos

Como el error de truncamiento en el esquema de Runge–Kutta es $\Delta\alpha\tau^5$,

$$\tau_{\rm est} = \tau \left| \frac{\Delta_i}{\Delta_c} \right|^{1/5} . \tag{11}$$

Como esto es sólo una estimación, se elige un $\tau_{\rm new} = S_1 \tau_{\rm est}$, donde $S_1 < 1$. Para evitar que esto sea muy exagerado, se agrega un factor de seguridad $S_2 > 1$ y se calcula el $\tau_{\rm new}$ de la siguiente manera:

- Si $S_1 \tau_{\rm est} > S_2 \tau_{\rm old}$: $\tau_{\rm new} = S_2 \tau_{\rm old}$
- Si $S_1 \tau_{\rm est} < \tau_{\rm old}/S_2$: $\tau_{\rm new} = \tau_{\rm old}/S_2$
- otros casos : $\tau_{\rm new} = S_1 \tau_{\rm old}$