

Capítulo 7

Algoritmos para integrar ecuaciones diferenciales ordinarias

En este capítulo se entrega una primera visión de un par de algoritmos sencillos, muy conocidos y fáciles de codificar: los de Runge-Kutta y los del tipo Verlet incluido *leapfrog*.

7.1. Reducción a ecuaciones de primer orden

El problema de resolver

$$\frac{d^2g}{dt^2} = F(t, g, g') \quad (7.1.1)$$

puede ser replanteado en la forma

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{y}) + \text{alguna condición inicial} \quad (7.1.2)$$

donde

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} g \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f} = \begin{pmatrix} y_2 \\ F \end{pmatrix} \quad (7.1.3)$$

es decir

$$\frac{dg}{dt} = y_2, \quad \frac{dy_2}{dt} = F(t; (g, y_2)) \quad (7.1.4)$$

Se puede adivinar de lo anterior que siempre se puede reducir un problema de ecuaciones diferenciales ordinarias a un sistema de ecuaciones de primer orden.

Por ejemplo $\ddot{\vec{x}} = \frac{1}{m}\vec{F}$ puede plantearse definiendo

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{v} \end{pmatrix} \quad \vec{f} = \begin{pmatrix} \vec{v} \\ \frac{1}{m}\vec{F} \end{pmatrix} \quad (7.1.5)$$

con lo que el problema consiste en resolver

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}, \quad \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m}\vec{F} \quad (7.1.6)$$

A continuación se verá métodos para atacar (7.1.2).

En lo que sigue se supondrá que el “eje tiempo”, t , está segmentado en intervalos de tamaño h y se usa la notación:

$$t_1 = h, \quad t_2 = 2h, \quad \dots \quad t_n = nh$$

El valor de una función $f(t)$ evaluada en t_n se designa f_n .

7.1.1. Algoritmos Runge-Kutta

Esta vez (7.1.2) se plantea en la forma

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{y}}{dt} &= \vec{f}(t, \vec{y}) \\ \vec{y}(0) &= \vec{y}_0 \end{aligned}$$

Y se usa dos expansiones de Taylor,

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h\vec{y}_n' + \frac{h^2}{2}\vec{y}_n'' + \mathcal{O}(h^3) \quad (7.1.7)$$

$$\vec{y}_{n+\frac{1}{2}}' = \vec{y}_n' + \frac{h}{2}\vec{y}_n'' + \mathcal{O}(h^2) \quad (7.1.8)$$

De la última, multiplicada por h , se obtiene

$$\frac{h^2}{2}\vec{y}_n'' = \left(\vec{y}_{n+\frac{1}{2}}' - \vec{y}_n'\right) h + \mathcal{O}(h^3) \quad (7.1.9)$$

Que se reescribe escribiendo $f_{n+\frac{1}{2}}$ en lugar de $y_{n+\frac{1}{2}}'$

$$\frac{h^2}{2} \ddot{y}_n = \left(\vec{f}_{n+\frac{1}{2}} - \vec{y}_n' \right) h + \mathcal{O}(h^3) \quad (7.1.10)$$

Al reemplazar esta expresión en (7.1.7) se cancelan las primeras derivadas y se obtiene

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h \vec{f}(t_n + \frac{h}{2}, \vec{y}_n + \frac{h}{2} \vec{f}_n) \quad (7.1.11)$$

Este resultado final conocido como **RK2**, tradicionalmente se reescribe en la forma

$$\mathbf{RK2} \begin{cases} \vec{k}_1 &= h \vec{f}(t_n, \vec{y}_n) \\ \vec{k}_2 &= h \vec{f}(t_n + \frac{h}{2}, \vec{y}_n + \frac{1}{2} \vec{k}_1) \\ \vec{y}_{n+1} &= \vec{y}_n + \vec{k}_2 + \mathcal{O}(h^3) \end{cases} \quad (7.1.12)$$

Se trata de un método explícito, el error es orden h^3 y puede ser inestable. Otra desventaja es que la función f debe ser llamada dos veces en cada iteración. Una ventaja es que, puesto que avanza paso a paso y no requiere de información anterior, se puede ir ajustando el tamaño del paso h a medida que se avanza en la integración.

Siguiendo un camino semejante se obtiene algoritmos de más alto orden.

$$\mathbf{RK3} \begin{cases} \vec{k}_1 &= h \vec{f}(t_n, \vec{y}_n) \\ \vec{k}_2 &= h \vec{f}(t_n + \frac{h}{2}, \vec{y}_n + \frac{1}{2} \vec{k}_1) \\ \vec{k}_3 &= h \vec{f}(t_n + h, \vec{y}_n - \vec{k}_1 + 2\vec{k}_2) \\ \vec{y}_{n+1} &= \vec{y}_n + \frac{1}{6} (\vec{k}_1 + 4\vec{k}_2 + \vec{k}_3) + \mathcal{O}(h^4) \end{cases} \quad (7.1.13)$$

$$\mathbf{RK4} \begin{cases} \vec{k}_1 &= h \vec{f}(t_n, \vec{y}_n) \\ \vec{k}_2 &= h \vec{f}(t_n + \frac{h}{2}, \vec{y}_n + \frac{1}{2} \vec{k}_1) \\ \vec{k}_3 &= h \vec{f}(t_n + \frac{h}{2}, \vec{y}_n + \frac{1}{2} \vec{k}_2) \\ \vec{k}_4 &= h \vec{f}(t_n + h, \vec{y}_n + \vec{k}_3) \\ \vec{y}_{n+1} &= \vec{y}_n + \frac{1}{6} (\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4) + \mathcal{O}(h^5) \end{cases} \quad (7.1.14)$$

Ventajas de RK4: es h^5 , es estable, permite adaptar el paso. Tiene amplia aplicabilidad.

Desventajas: se debe calcular f cuatro veces en cada iteración.

Sobre el paso variable. Para que el método sea preciso las magnitudes de los $\vec{k}_a$ deben ser mucho menores que $\delta \equiv \|\vec{y}_{n+1} - \vec{y}_n\|$.

7.2. Método de Verlet y variaciones

Se trata de resolver ecuaciones de Newton

$$\ddot{x} = a(x, t) \quad (7.2.1)$$

sin convertir el problema en otro con ecuaciones de primer orden como se hizo antes. Estos métodos se definen cuando $a(x, t)$ no depende de las velocidades.

L. Verlet presentó su algoritmo por primera vez en su trabajo *Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules*, Phys. Rev. **159**, 98-103 (1967).

7.2.1. Propiamente Verlet

La primera definición de derivada que a menudo ve un estudiante es un límite del tipo

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon) - f(x)}{\varepsilon}$$

Si se borra el proceso de límite la expresión anterior puede conectarse con una expansión de Taylor:

$$f(x \pm \varepsilon) = f(x) \pm \varepsilon f'(x) + \frac{\varepsilon^2}{2} f''(x) \pm \frac{\varepsilon^3}{6} f'''(x) + \frac{\varepsilon^4}{24} f^{iv}(x) + \dots \quad (7.2.2)$$

y de esta última se puede despejar que

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

que puede escribirse

$$\frac{f(x + \varepsilon) - f(x)}{\varepsilon} = f'(x) + \mathcal{O}(\varepsilon)$$

Sin embargo de 7.2.2 también se obtiene que

$$\frac{f(x+\varepsilon) - f(x-\varepsilon)}{2\varepsilon} = f'(x) + \frac{\varepsilon^2}{3} f'''(x) + \frac{\varepsilon^4}{60} f^{(5)}(x) \dots = f'(x) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Comparando las dos formas anteriores vemos que si la derivada se expresa en forma simétrica ($f(x+\varepsilon) - f(x-\varepsilon)$) se gana en precisión.

También se obtiene que

$$f(x+\varepsilon) + f(x-\varepsilon) = 2f(x) + \varepsilon^2 f''(x) + \frac{\varepsilon^4}{12} f^{(4)}(x) + \dots$$

por lo cual

$$f''(x) = \frac{f(x+\varepsilon) - 2f(x) + f(x-\varepsilon)}{\varepsilon^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

La segunda derivada que contiene (7.2.1) se puede escribir en forma discretizada como derivada de una derivada

$$\ddot{x} \approx \frac{\frac{x_{n+1}-x_n}{h} - \frac{x_n-x_{n-1}}{h}}{h} + \mathcal{O}(h^2) = \frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

En el numerador de la izquierda se ha escrito, en forma aproximada, la derivada de x centrada en $x_{n+\frac{1}{2}}$ menos la derivada de x centrada en $x_{n-\frac{1}{2}}$

La ecuación (7.2.1) discretizada queda

$$\frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) = a_n$$

con lo cual,

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 a_n + \mathcal{O}(h^4) \quad \leftarrow \textbf{Verlet} \quad (7.2.3)$$

En cada iteración se evalúa a una sola vez y el error es orden h^4 . La velocidad no aparece.

En cada iteración se obtiene un x_{n+1} a partir de los dos puntos anteriores: $(x_{n-1}, x_n) \rightarrow x_{n+1}$, pero si las condiciones iniciales son x_0 y v_0 se puede integrar con RK4 desde x_0 hasta x_1 y luego se procede con (7.2.3) o bien usando

$$x(h) = x(0) + h v(0) + \frac{h^2}{2} a(0) + \frac{h^3}{6} a'(0)$$

El algoritmo de Varlet (7.2.3) también se puede escribir para x_{n-1}

$$x_{n-1} = 2x_n - x_{n+1} + h^2 a_n + \mathcal{O}(h^4)$$

y la ecuación es la misma, es decir, el algoritmo es reversible en el tiempo. Para evaluar la velocidad conviene usar

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (7.2.4)$$

que tiene un error dos órdenes de magnitud menos que el algoritmo de Verlet para los x_n .

Si bien (7.2.3) aparece con un error de truncamiento pequeño, suele tener error de redondeo grande porque a una diferencia de dos números grandes (orden 1), $2x_n - x_{n+1}$, se le suma una cantidad de segundo orden, $h^2 a_n$. Para evitar esta fuente de error existe el método *leapfrog*.

7.2.2. Estabilidad del método de Verlet

Sea $\bar{x}$ la solución exacta de (7.2.3) con h fijo y definamos

$$x_n = \bar{x}_n + \varepsilon_n$$

donde los ε representan desviaciones que se han introducido. La sustitución de esta definición en la ecuación de Verlet da

$$\varepsilon_{n+1} - (2 + h^2 a'_n) \varepsilon_n + \varepsilon_{n-1} = 0 \quad (7.2.5)$$

donde a_n se escribió como $a(\bar{x}_n + \varepsilon_n) \approx a(\bar{x}_n) + \varepsilon_n a'_n$.

7.2.2.1. Caso de fuerza armónica:

A continuación se analiza el caso de una fuerza armónica,

$$a(x) = -\omega^2 x \quad a'(x) = -\omega^2$$

entonces

$$\varepsilon_{n+1} - 2(1 - R) \varepsilon_n + \varepsilon_{n-1} = 0 \quad (7.2.6)$$

donde $2R = h^2 \omega^2$. Se reemplaza $\varepsilon_n = \varepsilon_0 \lambda^n$ lo que inmediatamente conduce a

$$\lambda^2 - 2(1-R)\lambda + 1 = 0 \quad (7.2.7)$$

cuyas raíces son

$$\lambda_{\pm} = 1 - R \pm \sqrt{R^2 - 2R} \quad (7.2.8)$$

por lo que λ puede ser complejo.

Si $R = 0$ entonces $\lambda_{\pm} = 1$.

Si $R = 1$ entonces $\lambda_{\pm} = \pm i$.

Si $R = 2$ entonces $\lambda_{\pm} = -1$.

Si $R \rightarrow \infty$ entonces $\lambda_{\pm} = 1 - R \pm R \sqrt{1 - \frac{2}{R}}$ concluyéndose que $\lambda_+ = 0$ y que $\lambda_- = -\infty$.

En resumen, cuando R crece desde cero hasta infinito, λ_+ recorre primero la semicircunferencia $\text{Im } \lambda > 0$ unitaria del plano complejo y luego avanza desde $\lambda_+ = -1$ hasta $\lambda_+ = 0$ mientras que λ_- recorre primero la semicircunferencia $\text{Im } \lambda < 0$ unitaria del plano complejo y luego avanza desde $\lambda_- = -1$ hasta $\lambda_- = -\infty$.

Si $R \leq 2$ se tiene $|\lambda_{\pm}| = 1$ que garantiza estabilidad, mientras que $R > 2$ implica $|\lambda_-| > 1$ que garantiza inestabilidad.

Puesto que $R = \frac{h^2 \omega^2}{2}$, la condición $R \leq 2$ corresponde a

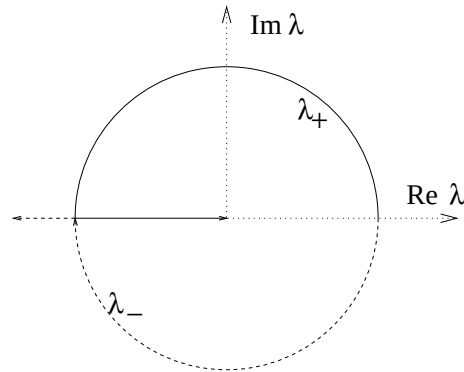
$$h \leq \frac{2}{\omega}$$

y si se reemplaza $\omega = \frac{2\pi}{T}$ entonces la condición es

$$h \leq \frac{T}{\pi} \quad (7.2.9)$$

7.2.2.2. Otros casos:

Si se trata de otras fuerzas que provienen de un potencial $U(x)$, la cota máxima para h está dada por el período mínimo, es decir, por la frecuencia máxima, que es proporcional a $\sqrt{U''(x_{\min})}$.



Si bien de esta manera se obtiene estabilidad, eso no quiere decir que se tenga confiabilidad, es decir, precisión aceptable. Normalmente se debe usar un h bastante menor que el que garantiza estabilidad.

7.2.3. Leapfrog

Puesto que

$$\frac{v_{n+\frac{1}{2}} - v_{n-\frac{1}{2}}}{h} + \mathcal{O}(h^2) = a_n$$

se obtiene que

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} + h a_n + \mathcal{O}(h^3)$$

Además

$$\frac{x_{n+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} - x_{n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{h} + \mathcal{O}(h^2) = v_{n+\frac{1}{2}}$$

que conduce a

$$x_{n+1} = x_{n-1} + h v_{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^3)$$

En resumen las ecuaciones que siguen deben usarse en el orden indicado

$$\begin{aligned} v_{n+\frac{1}{2}} &= v_{n-\frac{1}{2}} + h a_n + \mathcal{O}(h^3) \\ x_{n+1} &= x_n + h v_{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \tag{7.2.10}$$

Las posiciones se determinan con n entero y las velocidades con índice semientero.

7.3. Problemas

1. Considere la ecuación de un oscilador armónico forzado

$$\ddot{x} + \omega^2 x = A \sin(kx - \Omega t) \tag{7.3.1}$$

Ella proviene de la ecuación de una partícula cargada moviéndose en un campo magnético uniforme a lo largo del eje Z al que se superpone una electrostática plana que se propaga a lo largo del eje X .

Ver Physcis Today de noviembre 1988, p27. Esencialmente la misma ecuación es mencionada también en Physics Today, marzo 1987, p9.

2. Integrar la evolución de la ecuación de van der Pol

$$\ddot{x} = (1 - x^2)\dot{x} - x \quad (7.3.2)$$

Representa a un oscilador armónico más un término que podría representar un freno viscoso, pero para $|x| < 1$ ese término acelera en lugar de frenar.

3. Obtener la evolución del oscilador de Duffing

$$\ddot{x} = x - x^3 - a\dot{x} + b \cos \omega t \quad (7.3.3)$$

4. Se trata de calcular, usando RK4, el comportamiento de un péndulo amortiguado por un roce viscoso (coeficiente η) y forzado. Este sistema consiste en una vara ideal rígida de largo L , de masa despreciable, en cuyo extremo hay una masa m . El punto de apoyo $\mathcal{O}$ no está fijo sino que oscila verticalmente con amplitud A y frecuencia ν . Se puede demostrar que la ecuación para el ángulo φ es

$$\ddot{\varphi} + \eta \dot{\varphi} + \omega_0^2 \sin \varphi = -\frac{(2\pi\nu)^2 A}{L} \cos(2\pi\nu t)$$

donde $\omega_0^2 = \frac{g}{L}$, $g = 9,81$ y $L = 1\text{m}$.

- a) Tome $A = 0,07\text{m}$, $\gamma = 0,1\text{seg}^{-1}$, $\varphi(0) = 10^\circ$ y $\dot{\varphi}(0) = 0$ y estudie la amplitud angular asintótica ($t \rightarrow \infty$) como función de la frecuencia en el rango: $0,9 \leq \nu \leq 1,1$ con $\delta\nu = 0,001$. (*Amplitud angular* es el valor máximo que toma $\varphi(t)$).
 - b) Tome $A = 0,3\text{m}$, $\gamma = 0,4\text{seg}^{-1}$, $\dot{\varphi}(0) = 0$ y $\nu = 3\text{seg}^{-1}$. Obtenga la evolución de φ tanto cuando $\varphi(0)$ está alrededor de 10° como cuando está alrededor de 170° .
5. Estudie el movimiento de un péndulo plano, que en lugar de hilo tiene un resorte de constante elástica k y largo natural R . La masa del

punto material es $m = 1$. Use coordenadas cartesianas para integrar usando el algoritmo de Verlet. Las ecuaciones son

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -k \frac{(r-R)x}{r} \\ \ddot{y} &= -k \frac{(r-R)y}{r} - g\end{aligned}$$

Use: $k = 5$, $R = 4$, $g = 1$, tome condiciones iniciales: $(x = 0, y = -R - g/k, v_x = 0, v_y = 0)$ e integre hasta $t = 20$. Calcule la evolución del punto material con RK4 y con Verlet usando el mismo $dt = \varepsilon$. Escoja este incremento de modo que ambos algoritmos den soluciones parecidas pero distinguibles (al menos en la parte final). Para hacer esta comparación dibuje $x(t)$, $y(t)$ y $y(x)$. Compruebe que usando un dt varias veces más chico ambos algoritmos dan esencialmente la misma solución. ¿Cual de las dos soluciones originales estaba más cerca de la solución más precisa?

6. Integre la ecuación

$$\ddot{\vec{r}}(t) = -\frac{\vec{r}}{r^3}$$

directamente en coordenadas cartesianas $(x(t), y(t))$ usando como condiciones iniciales:

$$\vec{r}(0) = 2\hat{i} \quad \vec{v}(0) = 0,1\hat{j}$$

En todos los casos integre hasta poco más allá de completar una vuelta y dibujando la órbita en el plano (x, y) usando $N \leq 5000$ aun cuando el resultado sea insatisfactorio.

Convierta las ecuaciones a un sistema de primer orden e integre usando RK4.