Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Métodos Básicos

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

Derivada para Adelante

La expansión de Taylor de una función f alrededor de t es *para un físico*:

$$f(t+\tau) = f(t) + \tau f'(t) + \frac{\tau^2}{2} f''(t) + \ldots$$

que *en cálculo numérico* se traduce en:

$$f(t+\tau) = f(t) + \tau f'(t) + \frac{\tau^2}{2} f''(\xi)$$

donde el ξ es un valor entre t y $t+\tau$. De aquí podemos hallar $f'(t)$:

$$f'(t) = \frac{f(t+\tau) - f(t)}{\tau} - \frac{1}{2}\tau f''(\xi)$$

Derivada para Adelante

Esta fórmula se conoce como “forward derivative formula"

$$f'(t) = \frac{f(t+\tau) - f(t)}{\tau} - \frac{1}{2}\tau f''(\xi)$$

Recordemos que hay que distinguir entre dos tipos de errores:

- error de redondeo (round–off) (depende de la máquina)

Derivada para Adelante

Esta fórmula se conoce como “forward derivative formula"

$$f'(t) = \frac{f(t+\tau) - f(t)}{\tau} - \frac{1}{2}\tau f''(\xi)$$

Recordemos que hay que distinguir entre dos tipos de errores:

- error de redondeo (round–off)
  (depende de la máquina)
- error de truncamiento
  (depende del algoritmo)

Derivada para Adelante

A veces, escribimos esta misma ecuación (3) como:

$$f'(t) = \frac{f(t+\tau) - f(t)}{\tau} + O(\tau)$$

donde el error de truncamiento está especificado con su orden en τ (en este caso es lineal en τ).

En el ejercicio que hicieron derivando con distintos h, el error en la estimación de la derivada para $h < 10^{-8}$ era de round-off, mientras que para $h > 10^{-8}$ obtuvieron una dependencia lineal (truncamiento).

Método de Euler

Supongamos que queremos resolver numéricamente una ecuación del tipo:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{a}(\mathbf{r}, \mathbf{v}); \qquad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(t) \tag{1}$$

donde $\mathbf{a}$ es la aceleración.

Método de Euler

Supongamos que queremos resolver numéricamente una ecuación del tipo:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{a}(\mathbf{r}, \mathbf{v}); \qquad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(t) \tag{3}$$

donde $\mathbf{a}$ es la aceleración.
Utilizando la derivada para adelante nuestra ecuación de movimiento queda:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{v}(t+\tau) - \mathbf{v}(t)}{\tau} + O(\tau) &= \mathbf{a}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \\ \frac{\mathbf{r}(t+\tau) - \mathbf{r}(t)}{\tau} + O(\tau) &= \mathbf{v}(t) \end{aligned} \tag{4}$$

Método de Euler

tenemos entonces:

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathbf{v}(t+\tau)-\mathbf{v}(t)}{\tau}+O(\tau) &= \mathbf{a}(\mathbf{r},\mathbf{v}) \\
\frac{\mathbf{r}(t+\tau)-\mathbf{r}(t)}{\tau}+O(\tau) &= \mathbf{v}(t)
\end{aligned}
$$

y si agrupamos de un solo lado los términos de $(t+\tau)$:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{v}(t+\tau) &= \mathbf{v}(t)+\tau\mathbf{a}(\mathbf{r},\mathbf{v})+O(\tau^2) \\
\mathbf{r}(t+\tau) &= \mathbf{r}(t)+\tau\mathbf{v}(t)+O(\tau^2)
\end{aligned}
$$

(notar que $\tau O(\tau)=O(\tau^2)$)

Método de Taylor en órdenes superiores

Si queremos solucionar la ecuación

$$y'(t) = f(t, y); \qquad a \leq t \leq b; \qquad y(a) = \alpha$$

escribimos la expansión de Taylor con órdenes superiores

$$y(t+\tau) = y(t) + \tau y'(t) + \frac{\tau^2}{2} y''(t) + \ldots + \frac{\tau^n}{n!} y^{(n)}(t) + \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)!} y^{(n+1)}(\xi)$$

y reemplazamos cada derivada $y^{(n)}$ por la correspondiente derivada $f^{(n)}$.

Ejemplo

Sea

$$y'(t) = -y + t + 1; \qquad 0 \leq t \leq 1; \qquad y(0) = 1$$

Resolver la ecuación utilizando el método de Taylor de orden 1, 2 y 4. Graficar las soluciones junto con la solución exacta.

notación

Para que quede mas claro, volamos los vectores y trabajamos en una dimensión.
También introducimos la notación:

$$f_n = f(t_n); \qquad t_n = (n-1)\tau; \qquad n = 1, 2, \ldots$$

de manera que ahora nos queda:

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n + \tau a_n \\ r_{n+1} &= r_n + \tau v_n \end{aligned} \tag{5}$$

Método del punto medio

Al sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n + \tau a_n \\ r_{n+1} &= r_n + \tau v_n \end{aligned}$$

le hacemos una pequeña modificación:

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n + \tau a_n \\ r_{n+1} &= r_n + \tau v_{n+1} \end{aligned}$$

Esto se conoce como el método de Euler–Cromer.
Como los errores de truncamiento siguen siendo del orden de τ^2, no hemos ganado mucho.

Método del punto medio

Sin embargo, si ahora usamos el promedio de las dos velocidades:

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n + \tau a_n \\ r_{n+1} &= r_n + \tau \frac{v_{n+1} + v_n}{2} \end{aligned}$$

reemplazando el v_{n+1} queda la misma velocidad (con $O(\tau^2)$), pero

$$r_{n+1} = r_n + \tau v_n + \frac{1}{2} a_n \tau^2$$

o sea, r se calcula con $O(\tau^3)$

Fórmulas de Derivada Central

Hagamos la expansión de Taylor en los siguientes 2 casos:

$$
\begin{aligned}
f(t+\tau) &= f(t) + \tau f'(t) + \frac{1}{2}\tau^2 f''(t) + \frac{1}{6}\tau^3 f^{(3)}(\xi_+) \\
f(t-\tau) &= f(t) - \tau f'(t) + \frac{1}{2}\tau^2 f''(t) - \frac{1}{6}\tau^3 f^{(3)}(\xi_-)
\end{aligned}
$$

donde $\xi_\pm$ es un valor entre t y $t \pm \tau$.

Fórmulas de Derivada Central

Restando las ecuaciones anteriores obtenemos

$$f'(t) = \frac{f(t+\tau) - f(t-\tau)}{2\tau} + \frac{1}{6}\tau^2 f^{(3)}(\xi)$$

con $t - \tau \leq \xi \leq t + \tau$.

Esta es la aproximación centrada de la derivada.

Notar que el error ahora es cuadrático en τ

Método de Leap–Frog

Supongamos que ahora modificamos las ecuaciones (5) haciéndolas

$$
\begin{aligned}
\frac{v_{n+1} - v_{n-1}}{2\tau} + O(\tau^2) &= a(r_n) \\
\frac{r_{n+2} - r_n}{2\tau} + O(\tau^2) &= v_{n+1}
\end{aligned}
$$

reagrupando:

$$
\begin{aligned}
v_{n+1} &= v_{n-1} + 2\tau a(r_n) + O(\tau^3) \\
r_{n+2} &= r_n + 2\tau v_{n+1} + O(\tau^3)
\end{aligned}
$$

Método de Leap–Frog

y esto usualmente se escribe:

$$
\begin{aligned}
v_{n+\frac{1}{2}} &= v_{n-\frac{1}{2}} + \tau a(r_n) \\
r_{n+1} &= r_n + 2\tau v_{n+\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
$$

Este es el Leap–Frog method.

Se llama así porque la solución avanza en pasos de 2τ, con la posición evaluada en en los valores impares ($r_1, r_3, r_5, \ldots$), mientras que la velocidad se evalúa en los pares ($v_2, v_4, v_6, \ldots$).

Método de Verlet

Si combinamos apropiadamente las expansiones de Taylor para $f(t+\tau)$ y $f(t-\tau)$ (hacerlo como ejercicio!), podemos obtener la formula centrada para la derivada segunda

$$f''(t) = \frac{f(t+\tau) + f(t-\tau) - 2f(t)}{\tau^2} - \frac{1}{12}\tau^2 f^{(4)}(\xi).$$

Operando directamente con la derivada segunda obtenemos:

$$\begin{aligned} v_n &= \frac{r_{n+1} - r_{n-1}}{2\tau} + O(\tau^2) \\ r_{n+1} &= 2r_n - r_{n-1} + \tau^2 a_n + O(\tau^4) \end{aligned}$$

Este es el método de Verlet.

Método de Numerov

El algoritmo de Verlet, se puede mejorar, haciendo:

$$r_{n+1} = \frac{2r_n - r_{n-1} + \tau^2 a_n + \frac{1}{12}\tau^2(a_{n-1} - 2a_n)}{1 - \frac{1}{12}\tau^2 a_{n+1}} + O(\tau^6).$$

Este es el método de Numerov.

Errores locales y globales

Hasta ahora, los errores de truncamiento se referían a un solo paso de cálculo. En general, vamos a evaluar una trayectoria desde un $t = 0$ hasta un $t = T$. El número de pasos a usar es $N_\tau = \frac{T}{\tau}$. Si el error local es $O(\tau^n)$, entonces el error global es:

$$
\begin{aligned}
\text{error global} &= N_\tau \times \text{error local} = N_\tau O(\tau^n) \\
&= \frac{T}{\tau} O(\tau^n) = T O(\tau^{n-1})
\end{aligned}
$$

Por ejemplo, el método de Euler da un error de truncamiento local de $O(\tau^2)$, pero el error global es $O(\tau)$.

ejemplo: caída libre

Qué valor tomamos de τ?
En general, contestamos: un valor cualquiera tipo 10^{-8}.
Nosotros sabemos que el error de truncamiento es aproximadamente

$$\tau^2 r'' = \tau^2 a,$$

si tomamos $\tau = 10^{-1}$ s y $a \approx 10\ \mathrm{m/s}^2$, tenemos un error local de 10^{-1} m.
Si el tiempo de caída es 1 s, entonces tendríamos un error global de 1 metro.
OJO: en este cálculo linealizamos todo.

Ejercicio: Péndulo simple

La ecuación de movimiento de un péndulo simple es:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{L}\sin\theta.$$

si aproximamos $\sin\theta \approx \theta$, la ecuación se simplifica y tiene como solución a

$$\theta(t) = C_1 \cos(\frac{2\pi t}{T_s} + C_2)$$

donde el período T_s es

$$T_s = 2\pi\sqrt{\frac{L}{g}}.$$

Ejercicio: Péndulo simple

Si quisieramos calcular el movimiento del péndulo para ángulos mayores a 20^0, entonces el problema es mucho más complejo.
Aproximadamente:

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{L}{g}}(1 + \frac{1}{16}\theta_m^2 + \ldots)$$

donde θ_m es el ángulo (máximo) inicial, desde el que se suelta el péndulo.

Ejercicio: Péndulo simple

Ejercicios:

1. Utilizar el programa pendul.f para calcular la trayectoria de un péndulo cuya posición inicial es $\theta = 10^0$ y $\omega = 0$. Calcular el período, tomando el promedio entre las primeras 5 oscilaciones.
2. Comparar los resultados utilizando el método de Euler y el de Verlet.
3. Partir de ángulos iniciales más grandes y verificar los resultados.
4. Modificar el programa, agregándole el método de Leap–Frog, y el de Numerov. Comparar los resultados.

Ejercicio: Orbita de Cometas

Consideremos el problema de Kepler, en el cual un cometa orbita alrededor del Sol. Considerando sólo la fuerza gravitacional, esta se escribe:

$$\mathbf{F} = -\frac{GmM}{|r|^3}\mathbf{r}$$

donde $\mathbf{r}$ es la posición inicial del cometa, m es su masa, $M = 1.99 \times 10^{30}$ kg es la masa del Sol, y $G = 6.67 \times 10^{-11}$ m^3/kg s^2 es la constante gravitacional.
Las unidades naturales de espacio y tiempo para este problema, son las astronómicas: 1 AU = 1.496×10^{11} m (la distancia Tierra-Sol), y 1 AU de tiempo es 1 año. En estas unidades, el producto $GM = 4\pi^2$ AU^3/año^2. Tomaremos la masa del cometa como $m = 10^{15}$ kg.

Ejercicio: Orbita de Cometas

La energía total del satélite es

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{GMm}{r}$$

Si la órbita es elíptica, definimos la excentricidad, como

$$e = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}$$

donde a es el semieje mayor y b el menor. En este caso, la energía es

$$E = -\frac{GMm}{2a}$$

Ejercicio: Orbita de Cometas

la velocidad está dada por

$$v = \sqrt{GM(\frac{2}{r} - \frac{1}{a})}$$

y por conservación del momento angular, se puede derivar la 3^{era} Ley de Kepler:

$$T^2 = \frac{4\pi^2}{GM}a^3$$

donde T es el período de la órbita.

Ejercicio: Orbita de Cometas

Ejercicios:

1. Utilizar el programa orbit.f para calcular la trayectoria de un cometa, utilizando los métodos de Euler y de Euler–Cromer.
2. Graficar la trayectoria en la cual la distancia inicial es 1 AU, y la velocidad tangencial inicial es 2π AU/año. El intervalo temporal es τ=1 semana, y el tiempo total de cálculo es 4 años. Comparar ambos métodos.
3. Graficar las energías cinéticas, potenciales y totales.
4. Disminuir el intervalo temporal y comparar nuevamente los resultados.
5. Repetir el cálculo, pero ahora la velocidad tangencial inicial es π AU/año.

Ejercicio: Orbita de Cometas

Ejercicios:

1. Por qué no se puede imprimir correctamente la energía total en la línea 108 del programa orbit.f?
2. Modificar el programa y utilizar algún otro método para calcular las órbitas (Verlet, Numerov, etc.).
3. El cometa Halley tiene un período de 76.03 años, una excentricidad $e = 0.967$ y la distancia de perihelio es $q = 0.587$ AU. Partiendo de una distancia inicial de 35 AU, y con distintos valores de velocidades de aphelio, encontrar el mayor valor de τ con el cual la energía se conserva en al menos 1%. Graficar $\tau_{max}(v_i)$, y estimar el paso temporal que se necesita para calcular correctamente la órbita de este cometa. Graficarla.