

# Física Computacional

## Tarefa 7 - Questão 3

Alex Enrique Crispim

O método de Runge-Kutta de quarta ordem segue uma ideia semelhante ao caso feito para a questão 2, porém tomando a expansão até quarta ordem.

Seguindo o mesmo procedimento, com um pouco mais de álgebra, chegamos às seguintes equações:

$$x(t+h) = x(t) + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4). \quad (1)$$

$$\begin{cases} K_1 = hf(t, x), \\ K_2 = hf(t + \frac{1}{2}h, x + \frac{1}{2}K_1), \\ K_3 = hf(t + \frac{1}{2}h, x + \frac{1}{2}K_2), \\ K_4 = hf(t + h, x + K_3). \end{cases} \quad (2)$$

O algoritmo para o método Runge-Kutta-4 é praticamente o mesmo para o Runge-Kutta-2, como mostrado abaixo.

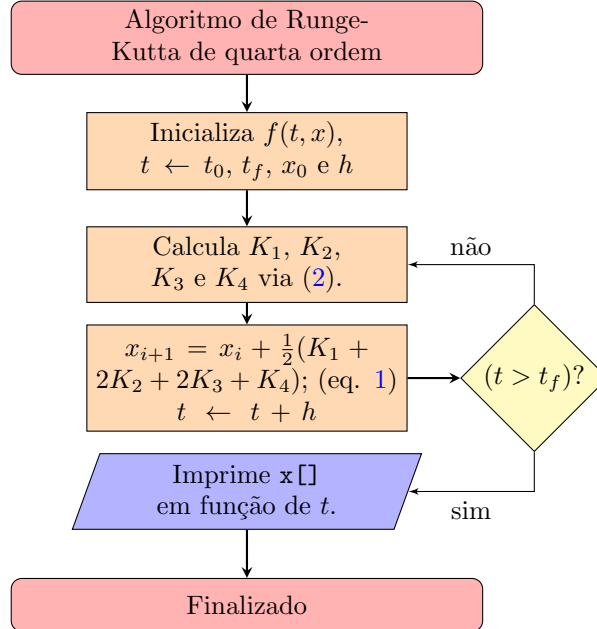


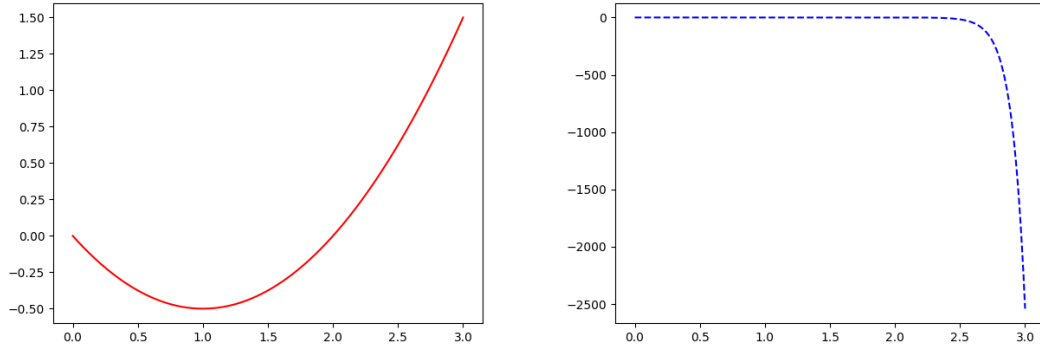
Figura 1: Algoritmo de RK4 para a solução de EDO's

Uma implementação do algoritmo RK4 pode ser encontrado na pasta *question 3* do endereço: <https://github.com/AlexEnrique/comp-physics-practice7>.

É importante mencionar que, como o próprio nome do método sugere, o algoritmo RK4 tem seu erro de quinta ordem em  $h$  (a série é truncada em quarta ordem). Isso significa uma convergência

muito mais rápida em comparação com RK2 (Runge-Kutta de segunda ordem). Como exemplo, considere  $h = 10^{-2}$ . Para RK2 temos um erro de ordem  $\mathcal{O}(10^{-6})$ , enquanto que para RK4 o erro é  $\mathcal{O}(10^{-10})$ .

O grande problema com o algoritmo RK4 se dá quando a EDO envolvida é tal que as soluções se distanciam entre si conforme a variável  $t$  cresce. Por exemplo, para a EDO  $x' = 10x + 11t - 5t^2 - 1$ , com  $x(0) = 0$ , o método RK4 nos dá um resultado errado. As figuras abaixo mostram as soluções exatas (vermelho) e via RK4 para a EDO acima.



O problema se deve ao fato de que, uma variação  $h$  nas condições iniciais leva a uma variação muito grande dos valores esperados para a função. Considere por exemplo a EDO dada por

$$x' = f(t, x), x(0) = s.$$

Se trocamos  $s$  por  $s + h$  (o que é induzido, por exemplo, por um erro de arredondamento), devemos considerar a função  $x(t)$  como a depender do parâmetro  $s$  da forma de uma variável, escrevendo  $x(t, s)$  no lugar. Podemos expandir  $x(t, s + h)$  em Taylor da seguinte forma

$$x(t, s + h) = x(t, s) + h \frac{\partial}{\partial s} x(t, s) + \mathcal{O}(h^2).$$

A divergência entre a função esperada  $x(t, s)$  e  $x(t, s + h)$  pode ser escrita como

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x(t, s + h) - x(t, s)| = \infty \Leftrightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \left| \frac{\partial}{\partial s} x(t, s) \right| = \infty$$

Para calcular a derivada parcial de  $x$  com relação a  $s$ , usamos o seguinte procedimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial s} x(t, s) = \frac{\partial}{\partial s} \frac{\partial}{\partial t} x(t, s) = f_x(t, x(t, s)) \frac{\partial}{\partial s} x(t, s) + f_t(t, x(t, s)) \frac{\partial t}{\partial s},$$

como uma variação em  $t$  não depende de uma variação em  $s$ ,  $\frac{\partial t}{\partial s} = 0$  e fazendo  $u(t) = \frac{\partial}{\partial s} x(t, s)$  e  $q(t) = f_x(t, x(t, s))$ , obtemos a seguinte EDO, da relação anterior:

$$u' = qu,$$

Cont.

cujas solução é  $u = ce^{Q(t)}$ , com

$$Q(t) = \int_a^t d\theta q(\theta).$$

A divergência do limite de  $|\partial x / \partial s|$  se dá então pela divergência de  $Q(t)$  (pois leva a divergir  $(u)$ ).

Se  $Q$  for uma função positiva e limitada inferiormente por um valor maior do que zero, é fácil ver que a função diverge:

$$Q(t) = \int_a^t d\theta q(\theta) > \int_a^t \delta d\theta = \delta(t-a) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \infty.$$

A conclusão final é: a solução diverge se  $f_x > \delta$  e converge quando  $f_x < -\delta$ , com  $\delta > 0$ .

Para a EDO fornecida para as questões 1, 2 e 3,  $f(t, x) = -x^3 + \sin(t)$  e, logo,  $f_x = -x^2 \leq 0, \forall x$ , enquanto que a EDO mal-comportada acima leva à  $f_x = 10 > 0$ , divergindo do valor real.