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:

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

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

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

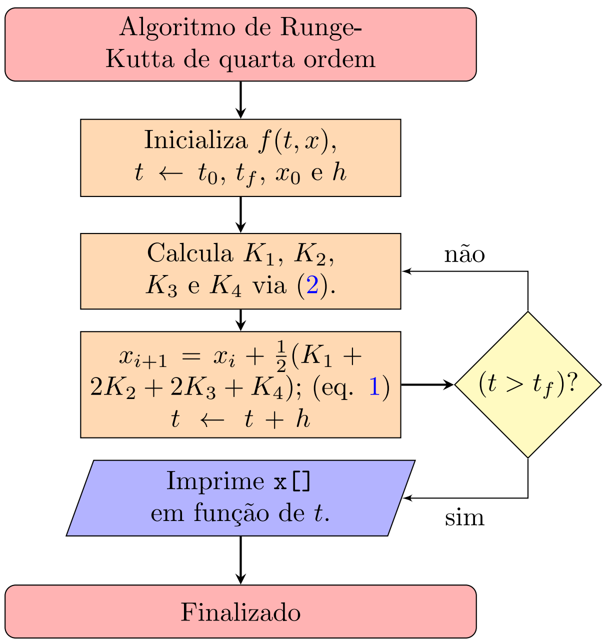
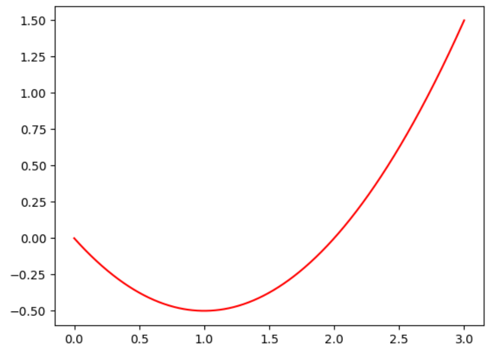


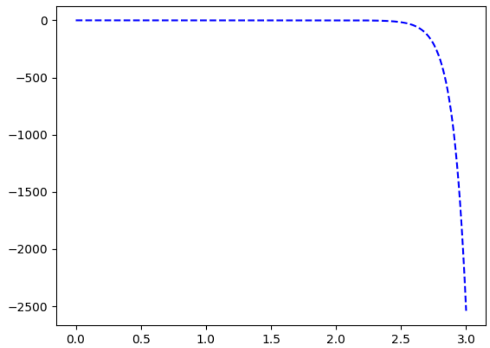
Figura 1: Algoritmo de RK4 para a solução de EDO's

Uma implementação do algoritmo RK4 pode ser encontrado na pasta *question 3* do endereço: https://github.com/AlexEnrique/comp-physics-pratice7.

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

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

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.

cuja solução é $u = ce^{Q(t)}$, com

$$Q(t) = \int_a^t \mathrm{d}\theta\, q(\theta).$$

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

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

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

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, $f_x = -x^2 \leq 0, \forall x$, enquando que a EDO mal-comportada acima leva à $f_x = 10 > 0$, divergindo do valor real.

The End.