Laboratorio 2 - Problema de valores iniciales

Pablo Chehade pablo.chehade@ib.edu.ar

Métodos Numéricos en Fluidos I, Instituto Balseiro, CNEA-UNCuyo, Bariloche, Argentina, 2022

Se estudiaron métodos numéricos para resolver problemas de valores iniciales. En particular, se aplicaron los métodos de Euler implícito, Crank-Nicholson, Runge Kutta 4 y Leap-Frog al problema del péndulo simple y el método de Runge Kutta 4 al del péndulo doble. Para todos los casos se estudió el orden de convergencia global del error de fase y el error de amplitud, obteniendo resultados similares a los teóricos?. También se estudió la sensibilidad del péndulo doble a perturbaciones.

I. INTRODUCCIÓN

1 [¿Por qué es importante estudiar numéricamente PVI?]

En ciencias físicas es de gran interés conocer la dinámica de un sistema a partir de sus condiciones iniciales. Sin embargo, dadas las ecuaciones de movimiento, no siempre es posible obtener la dinámica exactamente y es necesario recurrir a métodos numéricos.

2 [En este trabajo se analizaron dos problemas de valores iniciales]

En este trabajo se analizaron dos problemas de valores iniciales: la evolución del péndulo simple y del péndulo doble. Se resolvieron numéricamente a través de distintos métodos numéricos implícitos y explícitos y se estudió la convergencia de los mismos.

A. Péndulo simple

3 [Presentar ecuaciones de la dinámica]

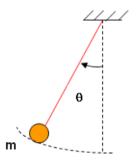


Figura 1: Esquema del péndulo simple. Una partícula puntual de masa m está suspendida de un punto fijo mediante un hilo de longitud l. El ángulo θ es el ángulo que forma el hilo con la vertical. Figura extraída de Referencia

El péndulo simple consta de una partícula puntual de masa m suspendida de un punto fijo mediante un hilo de longitud l (ver esquema en figura $\ref{eq:long}$). La partícula se mueve en un plano y el ángulo θ que forma el hilo con la

vertical se describe mediante la ecuación diferencial

$$\begin{cases} \theta'' = -\frac{g}{l}\sin(\theta) \\ \theta(0) = \theta_0, \theta'(0) = \theta'_0 \end{cases}$$
 (1)

donde g es la aceleración de la gravedad y θ_0 y θ_0' corresponden a las condiciones iniciales. Algunos parámetros importantes de la evolución del péndulo simple son el período de oscilación τ dado por

$$\tau(\theta) = T_0 \left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{(2n)!}{2^{2n} (n!)^2} \right)^2 \sin^{2n} \left(\frac{\theta}{2} \right) \right], T_0 = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}},$$
(2)

la fase ϕ dada por

$$\phi(\theta) = \tan^{-1}(\theta'/\theta) \tag{3}$$

ESTO ES LA FASE O EL ERROR DE FASE? LA FASE NO ES θ ?? y la energía por unidad de masa o amplitud A_S dada por

$$A^{S}(\theta) = 1/2l^{2}\theta'^{2} - ql\cos(\theta). \tag{4}$$

Debido a que en el sistema actúan solo fuerzas conservativas, la amplitud A_S se mantiene constante durante la evolución.

4 [Ecuación vectorial del péndulo simple]

La ecuación diferencial de orden 2 de ?? se puede convertir en dos ecuaciones diferenciales de ordeen 1 mediante el cambio de variable $\vec{y_S} = (y_1, y_2) = (\theta, \theta')$. De este modo, el problema ?? se convierte en

$$\begin{cases} \frac{d\vec{y_S}}{dt} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\frac{g}{l} \sin y_1 \end{pmatrix} = \vec{f_S}(\vec{y_S}, t), \\ \vec{y_S}(0) = (\theta_0, \theta_0'). \end{cases}$$
 (5)

B. Péndulo doble

5 [Presentar ecuaciones de la dinámica]

La extraje del pdf Double Pendumlum de la página de la materia

El péndulo doble es un sistema más complejo que el anterior. Consta básicamente de un péndulo simple con masa m_1 , longitud l_1 y ángulo θ_1 sobre el que se suspende otro péndulo simple con masa m_2 , longitud l_2 y ángulo

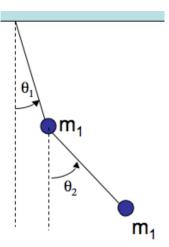


Figura 2: Esquema del péndulo doble. Una partícula puntual de masa m_1 está suspendida de un punto fijo mediante un hilo de longitud l_1 . El ángulo θ_1 es el ángulo que forma el hilo con la vertical. Sobre esta partícula se encuentra suspendida otra de masa m_2 mediante un hilo de longitud l_2 . El ángulo θ_2 es el ángulo que forma este último hilo con la vertical. Figura extraída de referencia

 θ_2 (ver esquema en la figura ??). Empleando $l_1=l_2=1$, $m_1=m_2=1$ y g=10, las ecuaciones de la evolución de los ángulos involucrados son

$$\begin{cases} 2\theta_{1}'' + \theta_{2}'' \cos \Delta \theta = \theta_{2}'^{2} \sin \Delta \theta - 20 \sin (\theta_{1}), \\ \theta_{1}'' \cos \Delta \theta + \theta_{2}'' = -\theta_{1}'^{2} \sin \Delta \theta - 10 \sin (\theta_{2}), \\ \theta_{1}(0) = \theta_{10}, \theta_{1}'(0) = \theta_{10}', \\ \theta_{2}(0) = \theta_{20}, \theta_{2}'(0) = \theta_{20}', \end{cases}$$
(6)

donde $\Delta \theta = (\theta_2 - \theta_1)$.

Al igual que en el péndulo simple, la energía se conserva y la amplitud A_D se mantiene constante durante la evolución. En este caso, tal amplitud está dada por

$$A_D = \theta_1'^2 + \frac{1}{2}\theta_2'^2 + \theta_1'\theta_2'\cos(\theta_2 - \theta_1) - 20\cos\theta_1 - 10\cos\theta_2$$
(7)

6 [Ecuación vectorial del péndulo doble] Haciendo el cambio de variables $\vec{y_D} = (y_1, y_2, y_3, y_4) = (\theta_1, \theta_2, \theta_1', \theta_2')$, el problema ?? se convierte en

$$\begin{cases} \frac{d\vec{y_D}}{dt} &= \begin{pmatrix} y_3 \\ y_4 \\ \frac{y_4^2 \sin \Delta - 20 \sin y_1 + y_3^2 \sin \Delta \cos \Delta + 10 \sin y_2 \cos \Delta}{2 - \cos^2 \Delta} \\ -2y_3^2 \sin \Delta - 20 \sin y_2 - y_4^2 \sin \Delta \cos \Delta + 20 \sin y_1 \cos \Delta} \\ &= f_D(\vec{y_D}, t), \\ \vec{y}_S^T(0) &= (\theta_{10}, \theta_{20}, \theta_{10}', \theta_{20}') \end{cases}$$

II. MÉTODO NUMÉRICO

Para resolver estos problemas se usaron mé-

todos numéricos. De cada método se analizó el error de fase y el error de amplitud]

Para resolver numéricamente ambos problemas de valores iniciales es necesario discretizar la variable temporal y proponer un esquema numérico que permita obtener la solución aproximada. En cuanto a lo primero, el dominio se discretizó con puntos equiespaciados $t_n=nh$ donde n=0, N y h=1/N. En cuanto a lo segundo, se utilizaron en total cuatro métodos numéricos, algunos explícitos y otros implícitos. Su objetivo radica en, dado $\vec{y}_n=\vec{y}(t_n)$, aproximar \vec{y}_{n+1} .

Además, es necesario evaluar de alguna manera la convergencia de los métodos numéricos. Para esto se podría emplear el error respecto a la solución exacta a todo tiempo o bien evaluar el error en un tiempo específico sobre cantidades conocidas. En este trabajo se optó por lo segundo. Se evaluó para el péndulo simple el error de fase en $t=\tau$ dado por

$$e_{fase}(t=\tau) = \phi_{aprox}(\tau) - \phi_{teo}(\tau) = \phi_{aprox}(\tau)$$
 (8)

pues por definición $\theta'(\tau)=0,$ y el error de amplificación en $t=\tau$ dado por

$$e_{amp}^{S}(t=\tau) = A_{aprox}^{S}(\tau) - A_{teo}^{S}(\tau), \tag{9}$$

donde A_t^S es constante. En ambos casos, para determinar τ se empleó la expresión ?? calculada con un error menor a todos los errores obtenidos en este trabajo. Mientras que para el péndulo doble se evaluó sólo el error de amplitud para todo tiempo

$$e_{amp}^{D}(t) = A_{aprox}^{D}(t) - A_{teo}^{D}(t),$$
 (10)

donde A_t^D también es constante en el tiempo.

Cabe preguntarse, ¿qué errores deberían obtenerse teóricamente? Se esperaría obtener el error de fase y el factor de amplificación de cada método numérico. Estos valores se encuentran tabulados y se obtienen al analizar la ecuación diferencial $y'=\lambda y$ con λ constante con cada método en particular.

En base a lo anterior, a continuación se desarrollan los métodos numéricos utilizados, junto con el orden global de convergencia del factor de amplificación y del error de fase. referencia?. Es necesario aclarar que en el caso de los métodos implícitos se utilizó el método de bisección para resolver el sistema de ecuaciones resultantes, con un error menor a todos los errores obtenidos en este trabajo.

■ Euler implícito (EI): este método es implícito, el factor de amplificación converge con orden $O(h^1)$ y el error de fase, con orden $O(h^2)$. Su fórmula es

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h\vec{f}(\vec{y}_{n+1}, t_{n+1}) + O_{local}(h^2)$$
 (11)

■ Crank-Nicholson (CN): este método es implícito, el factor de amplificación es 1, por lo que se esperaría $e_{amp} = 0$ y el error de fase converge con orden $O(h^2)$. Su fórmula es

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + \frac{h}{2} [\vec{f}(\vec{y}_{n+1}, t_{n+1}) + \vec{f}(\vec{y}_n, t_n)] + O_{local}(h^3)$$
(12)

■ Runge Kutta 4 (RK4): este método es explícito, el factor de amplificación converge con orden $O(h^5)$ y el error de fase, con orden $O(h^4)$. Su fórmula es

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + \frac{1}{6}\vec{k}_1 + \frac{1}{3}(\vec{k}_2 + \vec{k}_3) + \frac{1}{6}\vec{k}_4 + O_{local}(h^5)$$
 (13)

donde

$$\begin{cases} \vec{k}_1 = h\vec{f}(\vec{y}_n, t_n), \\ \vec{k}_2 = h\vec{f}\left(\vec{y}_n + \frac{1}{2}\vec{k}_1, t_n + \frac{h}{2}\right), \\ \vec{k}_3 = h\vec{f}\left(\vec{y}_n + \frac{1}{2}\vec{k}_2, t_n + \frac{h}{2}\right), \\ \vec{k}_4 = h\vec{f}(\vec{y}_n + \vec{k}_3, t_n + h) \end{cases}$$

2 pasos con Crank-Nicholson y uno con Leap Frog (CN + LF). Este último método es explícito, el factor de amplificación es unitario y el error de fase converge con orden O(h²). Su fórmula es

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_{n-1} + 2h\vec{f}(\vec{y}_n, t_n) + O_{local}(h^3)$$
 (14)

El objetivo de combinar ambos métodos de esta forma en particular es que los errores de fase se compensan para dar un orden de convergencia mayor, de al menos $O(h^3)$. Está bien esta afirmación? Sí. Aún más, el factor de amplificación se mantiene unitario.

8 [Resumen de lo que se hará. Qué se resuelve con qué] Se resolvió el péndulo simple con los cuatro esquemas numéricos mencionados. Se evaluó el orden de convergencia de e_{fase} y e_{amp} y se comparó con los valores teóricos. Además, se resolvió el péndulo doble con COMPLETAR

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A. Péndulo simple

Se resolvió el péndulo simple con los cuatro esquemas numéricos mencionados para las condiciones iniciales $\theta_0 = \pi/2$ y $\theta_0' = 0$ con h = 0,1. La evolución de $\theta(t)$ se grafica en la figura ??. Por un lado, se observa que la amplitud de variación de $\theta(t)$, relacionada con la amplitud A^S , no es constante para algunos métodos, siendo el caso más notable el de Euler implícito. Por otro lado, para algunos méotodos se observa un cambio en la fase, es decir, el tiempo en el que $\theta(t)$ alcanza su valor máximo no es idéntico para todos. Esto implica que existe un error de fase, como se esperaría a partir del análisis realizado en la sección anterior.

Para todos los métodos se calculó e_{fase} para distintos valores de h y se determinó el orden de convergencia.

- La dependencia del error con el tamaño de la discretización para todos los esquemas se grafica en la figura ?? en escala log-log.
- En todos los casos se obtuvo un comportamiento lineal a partir de un valor de h suficientemente pequeño. En base a esto, se ajustó una recta para cada caso, obteniendo el orden de convergencia de cada método.

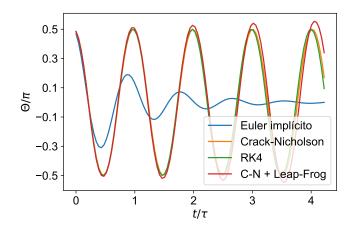


Figura 3: Evolución de $\theta(t)$ para los cuatro esquemas numéricos para las condiciones iniciales $\theta_0 = \pi/2$ y $\theta'_0 = 0$ con h = 0,1. Ambos ejes se encuentran normalizados: el eje vertical por π y el horizontal por el período τ .

- Los resultados se resumen en la tabla ??
- Análisis de resultados.
- Se observa que en todos los métodos los órdenes de convergencia teóricos y numéricos son distinguibles a más de 3 desviaciones estándar, siendo los más cercanos los de CN y RK4.

Análogamente, se calculó e_{amp} en función de h y se determinó el orden de convergencia. Tal dependencia se grafica en la figura $\ref{grafica}$. A diferencia del caso anterior, si bien se observa un comportamiento lineal, para h suficientemente pequeño, los métodos RK4 y CN alcanzan un valor constante, lo cual puede deberse a errores de punto flotante? En el caso de ángulo pequeño alcanza errores menores. De todos modos, se realiza un ajuste lineal sobre la zona con compotamiento lineal. La pendiente del ajuste corresponde al orden de convergencia del error y se resumen en la tabla $\ref{grafica}$?

- Al igual que en e_{fase}, los órdenes de convergencia teóricos y numéricos son distinguibles a más de 3 desviaciones estándar. Los casos más extremos corresponden a CN y CN + LF en los que se hubiera esperado un error de amplitud nulo. Aún así, el orden de convergencia de CN es relativamente alto respecto a los demás.
- Para ambos errores no se obtuvieron los órdenes de convergencia teóricos. Esto pudo deberse a que los valores teóricos se calculan en base a un problema lineal y' = λy. En el caso de la ecuación de movimiento, el problema es no lineal y por lo tanto no se puede esperar que los órdenes de convergencia sean los mismos. Sin embargo, sí se esperaría obtener los mismos valores para θ₀ → 0 debido a que en este caso la ecuación de movimiento se reduce a un problema lineal.
- En base a esto se calculó la dependencia de e_{fase} y e_{amp} en función de h para $\theta_0 = 0.01$. Los resultados se grafican en las figuras ?? y ??, respectivamente.
- Cualitativamente se encuentran tendencias similares

Método	Orden de convergencia de					
	e_{fase}			e_{amp}		
	teórico	$\cos\theta_0 = \pi/2$	$con \theta_0 = 0.01$	teórico	$con \theta_0 = \pi/2$	$\cos \theta_0 = 0.01$
EI	2	0.91 ± 0.03	$1,\!97 \pm 0,\!03$	1	0.94 ± 0.02	0.91 ± 0.03
CN	2	$1,96 \pm 0,02$	$1,93 \pm 0,04$	0	$5,\!79 \pm 0,\!09$	0
RK4	4	$3,92 \pm 0,02$	$4,02 \pm 0,02$	5	$4,87 \pm 0,04$	$4,94 \pm 0,03$
CN + LF	3	$1,86 \pm 0,05$	$1,96 \pm 0,02$	0	$2,96 \pm 0,05$	$3,010 \pm 0,005$

Cuadro I: Orden de convergencial del error de fase e_{fase} y del error de amplitud e_{amp} para los cuatro esquemas numéricos bajo las condiciones iniciales $\theta'_0 = 0$ y distintos valores de θ_0 . 'EI': Euler implícito, 'C-N': Crank-Nicholson, 'RK4': Runge-Kutta 4 y 'C-N + L-F': dos pasos con Crank Nicholson y uno con Leap-Frog.

respecto al caso $\theta_0 = \pi/2$. La diferencia más notable se encuentra en e_{amp} para el método de CN. Existe un valor de h a partir del cual $e_{amp} = 0$. Esto implica que el método conserva la amplitud, como se esperaría a partir del análisis teórico. Es necesario aclarar que existe un valor de h aún más pequeño con el cual $e_{amp} \neq 0$. Esto podría deberse a errores de punto flotante.

- En base al comportamiento lineal se realizó un ajuste lineal y se obtuvieron los órdenes de convergencia. Los resultados se resumen en la tabla ??.
- En cuanto a e_{fase} , los órdenes teóricos y numéricos son indistinguibles considerando dos desviaciones estándard para EI, CN y RK4. Esto es acorde a la hipótesis sobre θ_0 planteada. Sin embargo, no se obtiene el valor esperado para el método CN + LF. Esto se podría deber a que el error de fase en el problema no lineal no resulta de orden 3, sino que se mantiene en orden 2. Esto se podría justificar en el hecho de que para ser válido el orden 3 es necesario que el error de

B. Péndulo doble

Se resolvió el sistema ?? empleando RK4 y se estudió la sensibilidad del sistema frente a perturbaciones, la posibilidad de identificar patrones y la conservación de la energía

En primer lugar, se evaluó la sensibilidad del sistema frente a perturbaciones de las condiciones iniciales.

- Se calculó la dinámica del péndulo doble para tres condiciones iniciales ligeramente distintas: $\theta_{10} = \pi/2$, $\theta_{20} = a$ y $\theta'_{10} = \theta'_{20} = 0$ con $a^A = \pi/2$, $a^B = 1,00001\pi/2$ y $a^C = 0,99999\pi/2$.
- $h = \pi/100 \approx 0.0314$
- Se grafica en la figura ?? la evolución de $\theta_1(t)$
- Se observa que el comportamiento de $\theta_1(t)$ es muy distinto al de $\theta(t)$ del péndulo simple presentado en la figura ??. Además, la evolución es muy similar para las tres condiciones iniciales hasta $t \approx 5\pi$ cuando comienzan a diferir considerablemente.
- Esta diferencia se podría justificar en errores del método numérico utilizado. En base a esto se calcularon las diferencias angulares entre las soluciones para θ_1 y θ_2 , en función del tamaño de la discretización h a $t=5\pi$. Los resultados se grafican en la figura ??. Se

- fase no dependa del paso de integración, lo cual podría no ser cierto para el problema no lineal.
- En el problema lineal el error de fase cometido en cada paso no depende del paso, entonces tiene sentido hacer sumar y restar errores con CN y LF. Pero en el problema no lineal el error de fase depende del punto en el que estoy mirando y por lo tanto no se cancelan. Aún así, el orden aumenta a menor tita inicial
- En cuanto a e_{amp} , los órdenes teóricos y numéricos son indistinguibles considerando dos desviaciones estándard para CN y RK4. Sin embargo, este no es el caso de EI y CN + LF. En el primer caso, el orden es menor al teórico. Mientras que en el segundo, si bien no se alcanza el valor teórico, al menos el orden es mayor. No es claro a qué se deben ambos comportamientos. Debería estudiarse este problema con mayor detalle. Una opción posible sería considerar θ_0 menor al utilizado. Sin embargo, esto no es posible debido a un problema de representación decimal en el lenguaje de programación empleado.

observa que la diferencia entre las soluciones se mantiene constante a partir de un valor de h suficientemente pequeño.

 Por lo tanto, las diferencias no se deben al método numérico y el sistema es sensible a las perturbaciones

En segundo lugar, se calculó la trayectoria de las partículas que conforman el péndulo doble para las condiciones iniciales $\theta_{10} = \theta_{20} = \pi/2$ y $\theta'_{10} = \theta'_{20} = 0$, discretización $h = \pi/1000$ e intervalo de tiempo $t \in [0, 10\pi]$.

- Tales trayectorias se grafican en la figura ??
- La trayectoria de la partícula 1 está restringida a una circunferencia de radio 1 alrededor del origen. Mientras que la de la partícula 2 tiene mayor libertad de movimiento.
- Además, no se observan patrones claros en el comportamiento del péndulo.

En tercer lugar, se calculó la energía del sistema para las mismas condiciones iniciales y discretización que en el caso anterior. Se calculó el error de amplitud e^D_{amp} a partir de la expresión ?? y se graficó en la figura ??

- Se observa que la amplitud no se converva, aunque el error es relativamente pequeño.
- En base a esto, se buscó determinar el error de convergencia. Para esto se calculo e^D_{amp} en función de h. Los

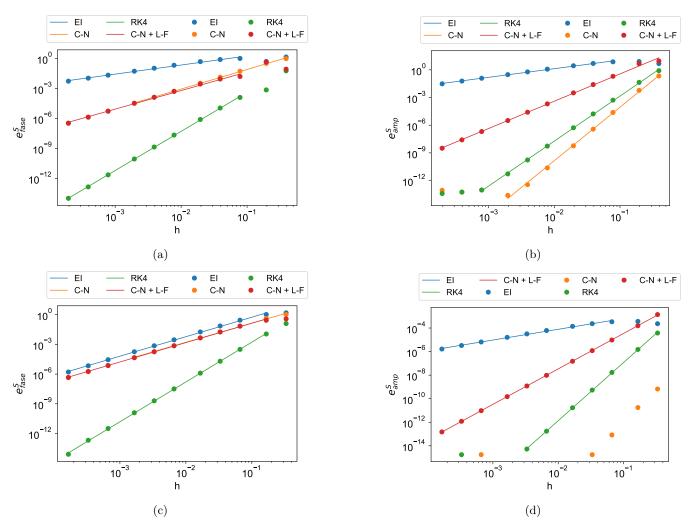


Figura 4: Error de fase e_{fase} y error de amplitud e_{amp} en función del tamaño de la discretización h para los cuatro esquemas numéricos bajo las condiciones iniciales ?? y ??, $\theta_0 = \pi/2$ y $\theta_0' = 0$, ?? y ??, $\theta_0 = 0.01$ y $\theta_0' = 0$. Los puntos corresponden a los valores calculados y las líneas a los ajustes lineales. 'EI': Euler implícito, 'C-N': Crank-Nicholson, 'RK4': Runge-Kutta 4 y 'C-N + L-F': dos pasos con Crank Nicholson y uno con Leap-Frog. En la figura ?? los valores correspondientes a CN y CN + LF se encuentran superpuestos.

resultados se grafican en la figura ??

- Se distinguen tres regiones Esto lo escribí lindo en la guía 1
- En base al comportamiento en la región central se realiza un ajuste lineal cuya pendiente corresponde al orden

de convergencia. Se obtuvo qué?

IV. CONCLUSIÓN

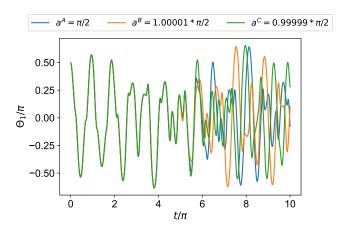


Figura 5: Evolución de $\theta_1(t)$ para los cuatro esquemas numéricos para las condiciones iniciales $\theta_{10}=\pi/2$, $\theta_{20}=a$ y $\theta_{10}'=\theta_{20}'=0$ con $h=\pi/100$. Ambos ejes se encuentran normalizados por π .

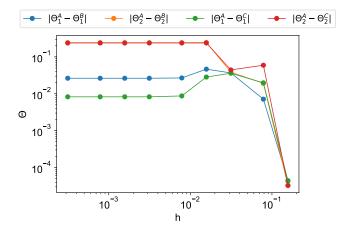


Figura 6: Diferencias angulares entre soluciones numéricas con distintas condiciones iniciales a tiempo $t=5\pi,$ en función de h. Las condiciones iniciales corresponden a $\theta_{10}=\pi/2,$ $\theta_{20}=a$ y $\theta'_{10}=\theta'_{20}=0$ con $a^A=\pi/2,$ $a^B=1,00001\pi/2$ y $a^C=0,99999\pi/2$.

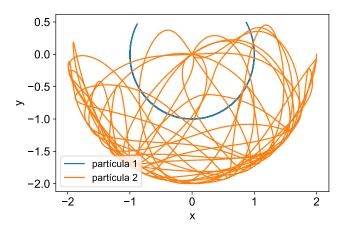


Figura 7: Trayectorias de las dos partículas de un péndulo doble para las condiciones iniciales $\theta_{10}=\theta_{20}=\pi/2 \text{ y } \theta_{10}'=\theta_{20}'=0, \text{ bajo la discretización } h=\pi/1000 \text{ e intervalo de tiempo } t \in [0,10\pi].$

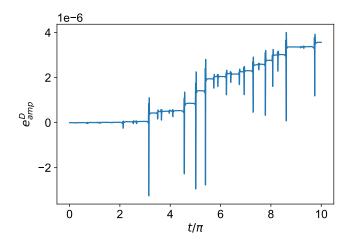


Figura 8: Error de amplitud para todo tiempo

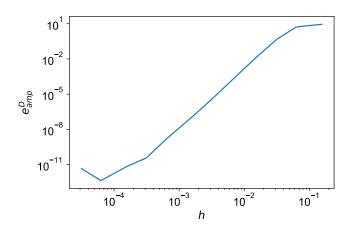


Figura 9: Orden del error de amplitud