Planteo del problema

Para una partícula cuya posición está dada por el vector $\boldsymbol{r}$ entonces las ecuaciones de Newton son

$$\text{Newton} \rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t) \\ \dot{\boldsymbol{r}}(t) = \dfrac{d\boldsymbol{r}}{dt}(t) \\ \ddot{\boldsymbol{r}}(t) = \dfrac{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}, t)}{m} \end{cases} \tag{1}$$

donde $\boldsymbol{F}$ es la fuerza que siente la partícula producto de sus interacciones. El problema queda completamente definido cuando se especifican las condiciones iniciales

$$\text{Condiciones iniciales} \rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{r}(t=0) = \boldsymbol{r}_0 \\ \dot{\boldsymbol{r}}(t=0) = \dot{\boldsymbol{r}}_0 \end{cases}$$

y la función $\boldsymbol{F}(t)$.

Para resolverlo en forma numérica se propone una discretización de la siguiente forma

$$\text{Discretización} \rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{r}(t = n\Delta_t) \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}(t = n\Delta_t) \stackrel{\text{def}}{=} \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{cases}$$

donde n es el "número de paso" y Δ_t el paso temporal (se asume constante en n) y la obtención de $\boldsymbol{r}_n$ y $\dot{\boldsymbol{r}}_n$ será a partir de un proceso iterativo

$$\text{Iteración} \rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{r}_{n+1} = \text{algo que depende de } \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}_{n+1} = \text{algo que depende de } \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{cases}$$

Método de Euler

El método de Euler (el más básico y directo) consiste en realizar la iteración del siguiente modo

$$\text{Euler} \rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{r}_{n+1} = \boldsymbol{r}_n + \dot{\boldsymbol{r}}_n \Delta_t + \dfrac{1}{2} \ddot{\boldsymbol{r}}_n \Delta_t^2 \\ \dot{\boldsymbol{r}}_{n+1} = \dot{\boldsymbol{r}}_n + \ddot{\boldsymbol{r}}_n \Delta_t \end{cases}$$

donde $\ddot{\boldsymbol{r}}(t) = \frac{\boldsymbol{F}(t)}{m}$ de acuerdo con las ecuaciones de Newton.

Método RK4

El método Runge-Kutta 4[1] se plantea para la resolución de ecuaciones de la forma $\frac{dx}{dt} = f(x, t)$ con $x(t_0) = x_0$. Entonces es necesario plantear las ecuaciones de Newton (1) con este formato. Para ello considérese el siguiente problema

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \dot{\boldsymbol{r}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}} \\ \frac{\boldsymbol{F}}{m} \end{bmatrix} \qquad \equiv \qquad \frac{d\overline{R}}{dt} = \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}, t\right) \tag{2}$$

donde $\overline{R} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \dot{\boldsymbol{r}} \end{bmatrix}$ es un *array* de vectores. El problema así planteado es equivalente a las ecuaciones de Newton (1), que se transcriben aquí para más comodidad en la comparación: $\begin{cases} \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t) \\ \dot{\boldsymbol{r}}(t) = \dfrac{d\boldsymbol{r}}{dt}(t) \\ \ddot{\boldsymbol{r}}(t) = \dfrac{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}, t)}{m} \end{cases}$. Ahora sí el problema está planteado con el formato necesario para aplicar RK4.

La discretización de (2) es

$$\text{Discretización de (2)} \rightarrow \overline{R}_{n+1} = \text{algo que depende de } \overline{R}_n$$

y el método RK4 propone que

[1] Ver `https://es.wikipedia.org/wiki/Método_de_Runge-Kutta`

$$\text{RK4} \rightarrow \overline{R}_{n+1} = \overline{R}_n + \frac{\Delta_t}{6}\left(\overline{k}_1 + 2\overline{k}_2 + 2\overline{k}_3 + \overline{k}_4\right) \qquad \begin{cases} \overline{k}_1 = \overline{\mathscr{F}}\left(t_n, \overline{R}_n\right) \\ \overline{k}_2 = \overline{\mathscr{F}}\left(t_n + \dfrac{\Delta_t}{2}, \overline{R}_n + \dfrac{\Delta_t}{2}\overline{k}_1\right) \\ \overline{k}_3 = \overline{\mathscr{F}}\left(t_n + \dfrac{\Delta_t}{2}, \overline{R}_n + \dfrac{\Delta_t}{2}\overline{k}_2\right) \\ \overline{k}_4 = \overline{\mathscr{F}}\left(t_n + \Delta_t, \overline{R}_n + \Delta_t\overline{k}_3\right) \end{cases} \qquad t_n = t_0 + n\Delta_t$$

En el caso particular de las ecuaciones de Newton se tiene que

$$\overline{\mathscr{F}}\left(t, \overline{R}\right) = \begin{bmatrix} R_2 \\ \frac{\boldsymbol{F}(t,R_1)}{m} \end{bmatrix} \qquad \begin{cases} R_1 = r \\ R_2 = \dot{r} \end{cases}$$

y si $\boldsymbol{F} \neq \boldsymbol{F}(t)$ entonces $\overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}\right) = \begin{bmatrix} R_2 \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}(R_1) \end{bmatrix}$ y el método es

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_{n+1} \\ \dot{\boldsymbol{r}}_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{bmatrix} + \frac{\Delta_t}{6}\left(\overline{k}_1 + 2\overline{k}_2 + 2\overline{k}_3 + \overline{k}_4\right) \qquad \begin{cases} \overline{k}_1 = \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n\right) \\ \overline{k}_2 = \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n + \dfrac{\Delta_t}{2}\overline{k}_1\right) \\ \overline{k}_3 = \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n + \dfrac{\Delta_t}{2}\overline{k}_2\right) \\ \overline{k}_4 = \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n + \Delta_t\overline{k}_3\right) \end{cases}$$

Cada uno de los $\overline{k}$ es

$$\begin{aligned} \overline{k}_1 &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{bmatrix}\right) \\ &= \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}_n) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overline{k}_2 &= \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n + \frac{\Delta_t}{2}\overline{k}_1\right) \\ &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{bmatrix} + \frac{\Delta_t}{2}\begin{bmatrix} k_{11} \\ k_{12} \end{bmatrix}\right) \\ &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{11} \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{12} \end{bmatrix}\right) \\ &= \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{12} \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{11}\right) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overline{k}_3 &= \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n + \frac{\Delta_t}{2}\overline{k}_2\right) \\ &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{bmatrix} + \frac{\Delta_t}{2}\begin{bmatrix} k_{21} \\ k_{22} \end{bmatrix}\right) \\ &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{21} \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{22} \end{bmatrix}\right) \\ &= \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{22} \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{21}\right) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overline{k}_4 &= \overline{\mathscr{F}}\left(\overline{R}_n + \Delta_t\overline{k}_3\right) \\ &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n \end{bmatrix} + \Delta_t\begin{bmatrix} k_{31} \\ k_{32} \end{bmatrix}\right) \\ &= \overline{\mathscr{F}}\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_n + \Delta_t k_{31} \\ \dot{\boldsymbol{r}}_n + \Delta_t k_{32} \end{bmatrix}\right) \\ &= \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n + \Delta_t k_{32} \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n + \Delta_t k_{31}\right) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\begin{cases} \overline{k}_1 = \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n\right) \end{bmatrix} \\ \overline{k}_2 = \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{12} \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{11}\right) \end{bmatrix} \\ \overline{k}_3 = \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{22} \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n + \frac{\Delta_t}{2}k_{21}\right) \end{bmatrix} \\ \overline{k}_4 = \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{r}}_n + \Delta_t k_{32} \\ \frac{1}{m}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{r}_n + \Delta_t k_{31}\right) \end{bmatrix} \end{cases}$$