Método de Verlet

Semillero de Programación en Python

Fundación Universitaria Konrad Lorenz

Existe un método sencillo para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias que puede resultar muy útil para simular ciertos fenómenos, como por ejemplo el rebote de una pelota, el potencial en cierto punto de una distribución de cargas y el comportamiento de una epidemia.

Primero analizaremos un caso sencillo, mas muy efectivo, como es la dinámica de una pelota bajo acción de la gravedad y con límites. Para ello escribamos la ecuación del movimiento de dicha pelota por la segunda ley de Newton (supóngase que la partícula se mueve en una sola dimensión).

Dinámica de partículas no puntuales

$$m\ddot{y} = mg \tag{1}$$

Donde g es la aceleración gravitacional. Es clara la posibilidad de resolver la ecuación (1) por métodos sencillos, como lo es la integración. La simulación puede realizarse integrando, mas se considera una buena alternativa hacerlo por el método de Verlet para empezar, así que a ello.

Expresemos las coordenadas x e y mediante expansiones de Taylor alrededor de t. Se hará el procedimiento para x; en y es idéntico. Entonces, si deseamos calcular $x(t+\delta t)$ y $x(t-\delta t)$:

$$x(t+\delta t) = x(t) + \dot{x}(t)\delta t + \frac{1}{2}\ddot{x}(t)\delta t^2 + O(\delta t^3) \tag{2}$$

$$x(t-\delta t) = x(t) - \dot{x}(t)\delta t + \frac{1}{2}\ddot{x}(t)\delta t^2 + O(\delta t^3) \tag{3}$$

Podemos asumir con tranquilidad que $O(\delta t^3) \sim 0$, pues de ello nos encargaremos al programar nuestro código. Sumando (2) y (3)

$$x(t+\delta t) + x(t-\delta t) = 2x(t) + \ddot{x}(t)\delta t^2 \tag{4}$$

Restando (2)-(3)

$$x(t+\delta t) - x(t-\delta t) = 2\dot{x}(t)\delta t \tag{5}$$

A partir de (4) se obtiene

$$x(t+\delta t) = 2x(t) - x(t-\delta t) + \ddot{x}\delta t^2 \tag{6}$$

La ecuación (6) será nuestro caballito de batalla; con ella simularemos el movimiento de varias partículas. Es notable la ventaja que existe respecto a la integración, pues para calcular la posición de una partícula no es necesaria la velocidad de la misma. Sin embargo, si se desea obtener la velocidad, se la puede despejar de la ecuación (5). Si hacemos $t = 0$ en (6) y despejamos $x(-\delta)$

$$x(-\delta t) = 2x(0) - x(\delta t) + \ddot{x}(0)\delta t^2 \tag{7}$$

Haciendo $t = 0$ en (5) y despejando $x(\delta t)$

$$x(\delta t) = x(-\delta t) + 2\dot{x}(0)\delta t \tag{8}$$

Reemplazando (8) en (7) y despejando $x(-\delta)$

$$x(-\delta t) = x(0) - \dot{x}(0)\delta t + \frac{1}{2}\ddot{x}(0)\delta t^2 \tag{9}$$

El lector atento habrá notado en la ecuación (6) una inconsistencia; pues si se desea calcular con ella la posición un instante δt después del tiempo inicial, se requiere la posición de un tiempo anterior ("negativo"$-\delta t$). Por ello deducimos la ecuación (9), para solventar este lío, aproximando la posición anterior.

I. Método de Relajación

i. Ecuación de Poisson-Laplace en 2D

$$\nabla^2 U = \begin{cases} 0 \;\; \text{Laplace} \\ \\ -\dfrac{\rho}{\epsilon_0} \;\; \text{Poisson} \end{cases} \tag{10}$$

Aproximando mediante Taylor:

$$U(x+\Delta x,y) = U(x,y) + \frac{\delta U}{\delta x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\delta^2 U}{\delta x^2}(\Delta x)^2 + \cdots \tag{11}$$

$$U(x-\Delta x,y) = U(x,y) - \frac{\delta U}{\delta x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\delta^2 U}{\delta x^2}(\Delta x)^2 + \cdots \tag{12}$$

Sumando (11)+(12) y despejando $\frac{\delta^2 U}{\delta x^2}$:

$$\frac{\delta^2 U(x,y)}{\delta x^2} = \frac{U(x+\Delta x,y) + U(x-\Delta x,y) - 2U(x,y)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^4) \tag{13}$$

De manera análoga a (13):

$$\frac{\delta^2 U(x,y)}{\delta y^2} = \frac{U(x,y+\Delta y) + U(x,y-\Delta y) - 2U(x,y)}{(\Delta y)^2} + O(\Delta y^4) \tag{14}$$

Con (13) y (14) podemos reescribir (10) como:

$$\frac{U(x+\Delta x,y) + U(x-\Delta x,y) - 2U(x,y)}{(\Delta x)^2} + \frac{U(x,y+\Delta y) + U(x,y-\Delta y) - 2U(x,y)}{(\Delta y)^2} = \begin{cases} 0 & \text{Laplace} \\ -\frac{\rho}{\epsilon_0} & \text{Poisson} \end{cases} \tag{15}$$

Si se hace $\Delta x = \Delta y = \Delta$ (puntos equispaciados), y se despeja $U(x,y)$ de (15), se obtiene

$$U(x,y) = \frac{1}{4}[U(x+\Delta,y) + U(x-\Delta,y) + U(x,y+\Delta) + U(x,y-\Delta) + \frac{\boldsymbol{\rho}}{\boldsymbol{\epsilon_0}}\Delta^2] \tag{16}$$

La idea del algoritmo es aproximar el potencial de un punto determinado, promediando su valor con los potenciales de los puntos que están alrededor de él; en la figura 1 se puede apreciar una ilustración de este método.

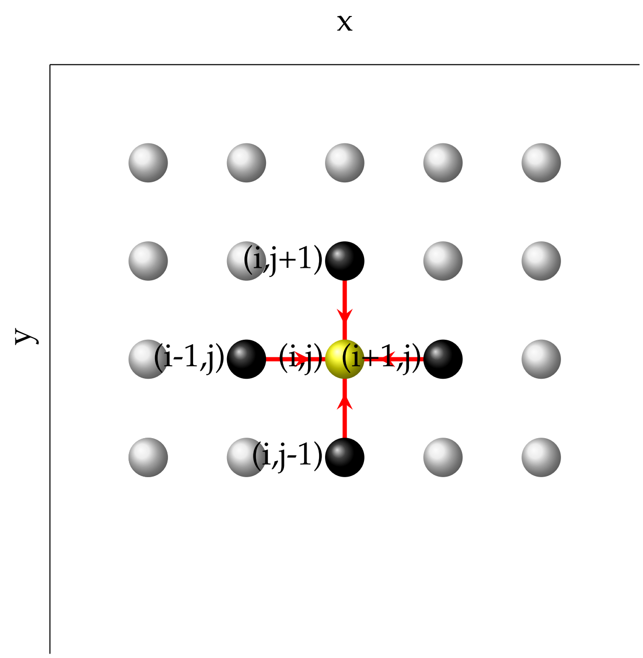

Figura 1: *Ilustración del Método de Relajación.*