Física Computacional

Escuela de Física

M.R.Fulla[1]

[1]Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-408

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

November 1, 2023

Un problema de valor inicial P.V.I es una ecuación diferencial con condición inicial de la forma:

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases}$$

solucionarla numéricamente implica la construcción de una tabla de la forma:

t	t_0	t_1	$\dots$	t_i	$\dots$
x	x_0	x_1	$\dots$	x_i	$\dots$

donde $x(t_i) = x_i \qquad t_i = t_0 + i * h$ con $i = 1, 2, ...$

h: tamaño del paso

Los métodos numéricos más sencillos están basados en las series de Taylor (expansión alrededor de t_i):

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(t_i)(t-t_i)^n}{n!} \tag{1}$$

$$x(t) = x(t_i) + x'(t_i)(t-t_i) + \frac{x''(t_i)}{2!}(t-t_i)^2 + ... \tag{2}$$

haciendo $t = h + t_i$ ó $h = t - t_i$

$$x(h+t_i) = x(t_i) + x'(t_i)h + \frac{x''(t_i)}{2!}h^2 + ... \tag{3}$$

Método de Euler

En este método solo tomamos los dos primeros términos de la serie (3):

$$x(h+t_i) = x(t_i) + x'(t_i)h \tag{4}$$

pero como $x'(t) = f(t,x)$, entonces tenemos la **Fórmula de Avance de Euler**:

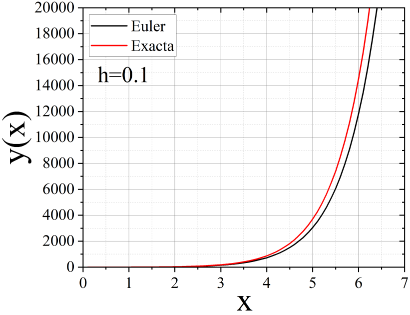
$$\boxed{x(h+t_i) = x(t_i) + f(t_i, x(t_i))h} \tag{5}$$

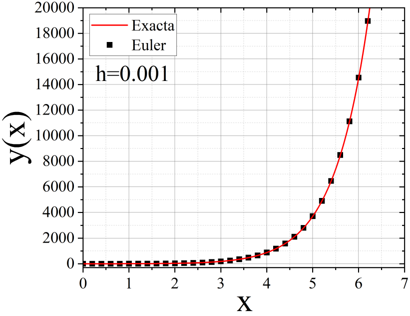
Método de Euler

Ejemplo: resolver el P.V.I. $y' = y + 2xe^x \quad y(0) = 0$
solución exacta: $y = x^2e^x$

```
PROGRAM equdiff
IMPLICIT NONE
REAL::h,xini,xend,xstep,x,yini,ysol,f
INTEGER::nx,i
EXTERNAL f
OPEN(UNIT=1,FILE="res.dat")
xini=0.
xend=8.
xstep=0.001
nx=INT((xend-xini)/xstep)
yini=0

DO i=1,nx
    x=xini+xstep*(i-1)
    CALL euler(f,x,yini,xstep,ysol)
    WRITE(1,*) x+xstep,ysol,(x+xstep)**2*EXP(x+xstep)
    WRITE(*,*) x+xstep,ysol,(x+xstep)**2*EXP(x+xstep)
    yini=ysol
ENDDO
CLOSE(1)
END PROGRAM

SUBROUTINE euler(f,ti,xi,h,eulerress)
IMPLICIT NONE
REAL::f,ti,xi,h,eulerress,g
EXTERNAL f
eulerress=xi+f(ti,xi)*h
END SUBROUTINE

REAL FUNCTION f(t,x)
IMPLICIT NONE
REAL::t,x
f=x+2*t*EXP(t)
END FUNCTION
```

Método de Euler





Método de Euler de Orden 2

Usamos los tres primeros términos de la serie de Taylor (3):

$$x(h+t_i) = x(t_i) + x'(t_i)h + \frac{x''(t_i)}{2}h^2 \tag{6}$$

Calculamos:

$$x''(t) = \frac{d}{dt}[f(t,x)] \rightarrow \quad \begin{tikzcd}[column sep=small] & \mathrm{f} \arrow[dl, no head] \arrow[dr, no head] & \\ \mathrm{x} \arrow[d, no head] & & \mathrm{t} \\ \mathrm{t} & & \end{tikzcd} \tag{7}$$

$$x'' = f_t + f_x x' = f_t + f_x f \tag{8}$$

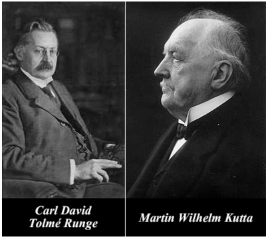
$$x''(t) = f_t(t,x) + f_x(t,x)f(t,x) \tag{9}$$

Método de Euler de Orden 2

evaluando (9) en t_i e introduciendo en la serie de Taylor de tres términos (6) se obtiene la **Fórmula de Avance de Euler de Orden 2**:

$$\begin{aligned} x(h+t_i) =& x(t_i) + hf(t_i, x(t_i)) \\ & + \frac{h^2}{2}[f_t(t_i, x(t_i)) + f_x(t_i, x(t_i))f(t_i, x(t_i))] \end{aligned} \tag{10}$$

Método de Runge-Kutta



Runge y Kutta mejoraron el método de Euler de orden 2 para evitar la diferenciación y sustituir este proceso por uno de evaluación de la función f, tenemos:

$$x(h+t_i) = x(t_i) + hf + \frac{h^2}{2}[f_t + f_x f] \tag{11}$$

Deseamos sustituir los términos f_t y f_x, para ello, usamos la expansión en series de Taylor en varias variables para $f(t,x)$ y tomaremos solo los dos primeros términos:

$$f(t_i+h, x_i+k) = f(t_i, x_i) + f_t(t_i, x_i)h + f_x(t_i, x_i)k \tag{12}$$

donde $h = t - t_i$ y $k = x - x_i$, definamos $k = hf$, entonces:

Método de Runge-Kutta

$$f(t_i+h, x_i+hf) = f(t_i, x_i) + hf_t(t_i, x_i) + hf_x(t_i, x_i) f(t_i, x(t_i)) \quad (13)$$

y de (11):

$$x(h+t_i) = x(t_i) + \frac{hf}{2} + \frac{hf}{2} + \frac{h^2}{2}[f_t + f_x f]$$

$$x(h+t_i) = x(t_i) + \frac{hf}{2} + \frac{h}{2}[f + hf_t + hf_x f] \quad (14)$$

y comparando con (13) concluimos:

$$x(h+t_i) = x(t_i) + \frac{hf}{2} + \frac{h}{2} f(t_i + h, x_i + hf(t_i, x(t_i))) \quad (15)$$

Método de Runge-Kutta

Definamos:

$$F_1 = hf(t_i, x(t_i)) \tag{16}$$

$$F_2 = hf(t_i + h, x(t_i) + hf(t_i, x(t_i))) = hf(t_i + h, x(t_i) + F_1) \tag{17}$$

en (15) se obtiene la **Fórmula de Avance de Runge-Kutta 2**:

$$\boxed{x(t_i + h) = x(t_i) + \frac{F_1 + F_2}{2}} \tag{18}$$

Método de Runge-Kutta 4

Siguiendo un procedimiento similar RK2 se puede obtener la siguiente **Fórmula de avance para RK4**:

$$x(t_i + h) = x(t_i) + \frac{F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4}{6} \tag{19}$$

$$F_1 = hf(t_i, x(t_i)) \tag{20}$$

$$F_2 = hf(t_i + \frac{h}{2}, x(t_i) + \frac{F_1}{2}) \tag{21}$$

$$F_3 = hf(t_i + \frac{h}{2}, x(t_i) + \frac{F_2}{2}) \tag{22}$$

$$F_4 = hf(t_i + h, x(t_i) + F_3) \tag{23}$$

Problema: resolver el sistema de EEDD de primer orden y con condiciones iniciales:

$$(I) \qquad \begin{cases} x'(t) = y(t) + z(t) & x(0) = 1 \\ y'(t) = 1 + t^2 - x(t) & y(0) = 1 \\ z'(t) = 1 - t^2 - sen(t) + x(t) & z(0) = 1 \end{cases}$$

podemos escribir el sistema en forma vectorial:
sea $X : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3 : t \to X(t)$

$$X(t) = \begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{bmatrix} \qquad X'(t) = \begin{bmatrix} x'(t) \\ y'(t) \\ z'(t) \end{bmatrix}$$

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

definamos $F : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^3$

$$\begin{bmatrix} t \\ x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{bmatrix} \to \quad F(t,x,y,z) = \begin{bmatrix} y+z \\ 1+t^2-x \\ 1-t^2-sen(t)+x \end{bmatrix} = F(t,X(t))$$

$$X(0) = \begin{bmatrix} x(0) \\ y(0) \\ z(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

así que el sistema (I) puede escribirse en forma vectorial como el P.V.I:

$$(II) \begin{cases} X'(t) = F(t,X(t)) \\ X(0) = X_0 \end{cases}$$

Representación **no autónoma** de (I)

Sistemas de EEDD y de Orden superior

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Ahora si definimos $X : \mathbb{R}^{\rightarrow}\mathbb{R}^4$:

$$t \rightarrow \begin{bmatrix} t \\ x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{bmatrix} = X(t) \;\; entonces \;\; X'(t) = \begin{bmatrix} 1 \\ x'(t) \\ y'(t) \\ z'(t) \end{bmatrix}$$

sea $F : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$

$$F(t,x,y,z) = \begin{bmatrix} 1 \\ y+z \\ 1+t^2-x \\ 1-t^2-sen(t)+x \end{bmatrix} = F(X(t))$$

de donde $X'(t) = F(X(t))$ también equivalente al P.V.I (I) podemos escribir entonces equivalentemente el P.V.I (I) así:

$$\begin{cases} X'(t) = F(X(t)) \\ X(0) = X_0 \end{cases}$$

Representación **Autónoma** del sistema (I)

$$X(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Esta Métodología permite resolver EEDD de orden superior de la siguiente manera, consideremos el siguiente P.V.I:

Sistemas de EEDD y de Orden superior

$$\begin{cases} x'''(t) + [x''(t)]^2 + [x'(t)]^2 - x(t) + 2cos(t) = 0 \\ x(0) = 3,\ x'(0) = 1, x''(0) = -1 \end{cases}$$

realicemos el cambio de variable:

$$\begin{aligned} y_0 &= t \\ y_1 &= x \\ y_2 &= x' \\ y_3 &= x'' \end{aligned} \quad \text{derivando} \curvearrowright \quad \begin{aligned} y_0' &= 1 \\ y_1' &= x' = y_2 \\ y_2' &= x'' = y_3 \\ y_3' &= x''' = -2cos(y_0) + y_1 - y_2^2 - y_3^2 \end{aligned}$$

$$\text{si } t = 0 \quad \begin{aligned} y_0(0) &= 0 \\ y_1(0) &= 3 \\ y_2(0) &= 1 \\ y_3(0) &= -1 \end{aligned}$$

Así que el P.V.I equivale al sistema de EEDD:

$$
\begin{aligned}
y_0'(t) &= 1 \\
y_1'(t) &= y_2(t) \\
y_2'(t) &= y_3(t) \\
y_3'(t) &= -2cos(y_0(t)) + y_1(t) - [y_2(t)]^2 - [y_3(t)]^2
\end{aligned}
$$

con condiciones iniciales:

$$
\begin{aligned}
y_0(0) &= 0 \\
y_1(0) &= 3 \\
y_2(0) &= 1 \\
y_3(0) &= -1
\end{aligned}
$$

Runge-Kutta 4 para Sistemas Vectoriales

Para estos sistemas de EEDD escritos en forma autónoma, se puede usar el método de Runge-Kutta en forma vectorial, el cual se escribe:

$$\begin{cases} X'(t) = F(X(t)) \\ X(0) = X_0 \end{cases} \qquad \begin{aligned} X(t) &: \textit{función vectorial} \\ F(X(t)) &: \textit{campo vectorial} \end{aligned}$$

con fórmula de avance:

$$\boxed{X(t_i + h) = X(t_i) + \frac{1}{6}[F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4]} \tag{24}$$

$$\begin{aligned} F_1 &= hF(X(t)) \\ F_2 &= hF(X(t) + \tfrac{F_1}{2}) \\ F_3 &= hF(X(t) + \tfrac{F_2}{2}) \\ F_4 &= hF(X(t) + F_3) \end{aligned}$$