

Métodos numéricos para Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Laboratori de Càlcul Numèric (LaCàN)
Departament de Matemàtica Aplicada III
Universitat Politècnica de Catalunya (Barcelona)
<http://www-lacan.upc.es>

Objetivos

- Entender qué es un problema de valor inicial
- Ser capaz de reducir una EDO de orden n a un sistema de n EDOs de primer orden
- Saber resolver problemas de valor inicial de primer orden utilizando diferentes métodos numéricos (Euler, Heun, Runge-Kutta)
- Entender las características de un método de resolución de EDOS: consistencia, orden de convergencia, estabilidad.
- Entender qué es un problema de contorno y ser capaz de plantear el método del disparo

Ecuación Diferencial Ordinaria (EDO)

Gran cantidad de problemas de la física y la ingeniería se pueden modelar con ecuaciones diferenciales ordinarias.

- Ecuación diferencial ordinaria de primer orden:

$$\frac{dy}{dx}(x) = f(x, y) \quad x \in [a, b]$$

el problema se completa con la **condición inicial**

$$y(a) = \alpha$$

(problema de valor inicial)

- Veremos que, bajo ciertas condiciones de regularidad, el problema de valor inicial tienen solución única.
- En ciertos casos, la solución se puede hallar analíticamente. Por ejemplo, la EDO de primer orden lineal

$$\frac{dy}{dx}(x) = cy, \quad y(0) = \alpha$$

tiene solución analítica conocida

$$y(x) = \alpha \exp(cx)$$

- En otros muchos casos la solución analítica no es conocida
 → **técnicas numéricas.**

ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE ORDEN n

- Consideramos EDOs de orden n que se escriben como

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2 y}{dx^2}, \dots, \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}}\right) \quad x \in [a, b]$$

- El problema se completa con:
 - Condiciones iniciales: problema de valor inicial (PVI)

$$y(a) = \alpha_0, \quad \frac{dy}{dx}(a) = \alpha_1, \quad \frac{d^2 y}{dx^2}(a) = \alpha_2, \dots, \quad \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}}(a) = \alpha_{n-1}$$

- Condiciones de contorno (en ambos extremos): problema de contorno

Reducción de una EDO de orden n a un sistema de n EDOs de primer orden

- **Motivación:** las técnicas numéricas que vamos a ver están pensadas para EDOs de orden 1. Queremos escribir la EDO en la forma

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx}(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$$

- **Idea:** las n-1 primeras derivadas de la función y(x) se tratan explícitamente como funciones incógnita (en un vector $\mathbf{y}(x)$)
- **Notación:**

$$y_{(i)} \equiv \frac{d^{i-1} y}{dx^{i-1}} \quad \text{con} \quad i = 1, \dots, n$$

- Así, por definición, tenemos las relaciones

$$y_{(1)} \equiv y$$

$$y_{(2)} \equiv \frac{dy}{dx} = \frac{dy_{(1)}}{dx}$$

$$y_{(3)} \equiv \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{dy_{(2)}}{dx}$$

⋮

$$y_{(n)} \equiv \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} = \frac{dy_{(n-1)}}{dx}$$

Sustituyendo en la EDO, se obtiene la última ecuación:

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}, \dots, \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}\right) \quad x \in [a, b]$$

$$\frac{dy_{(n)}}{dx}(x) = f(x, y_{(1)}, y_{(2)}, y_{(3)}, \dots, y_{(n)}) \quad x \in [a, b]$$

- Sistema de EDOs resultante

$$\frac{dy_{(1)}}{dx} = y_{(2)}$$

$$\frac{dy_{(2)}}{dx} = y_{(3)}$$

⋮

$$\frac{dy_{(n-1)}}{dx} = y_{(n)}$$

$$\frac{dy_{(n)}}{dx} = f(x, y_{(1)}, y_{(2)}, y_{(3)}, \dots, y_{(n)})$$

PVI con notación vectorial

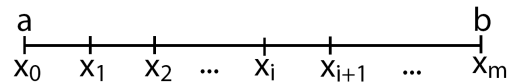
$$\begin{aligned}
 & \boxed{\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}}{dx}(x) &= \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) & x \in [a, b] \\ \mathbf{y}(a) &= \boldsymbol{\alpha} \end{aligned}} & \mathbf{y} &= \begin{Bmatrix} y_{(1)} \\ y_{(2)} \\ \vdots \\ y_{(n-1)} \\ y_{(n)} \end{Bmatrix} \\
 & \mathbf{f} = \begin{Bmatrix} y_{(2)} \\ y_{(3)} \\ \vdots \\ y_{(n)} \\ f(x, y_{(1)}, y_{(2)}, \dots, y_{(n)}) \end{Bmatrix}, & \boldsymbol{\alpha} &= \begin{Bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{(n-1)} \end{Bmatrix}
 \end{aligned}$$

MÉTODOS BASADOS EN LA APROXIMACIÓN DE LA DERIVADA

- Se considera el problema de valor inicial

$$\begin{aligned}
 \frac{dy}{dx}(x) &= f(x, y) & x \in [a, b] \\
 y(a) &= \alpha
 \end{aligned}$$

- El intervalo $[a, b]$ se divide en m subintervalos de longitud $h = (b-a)/m$



- Notación: $y_i \equiv y(x_i)$ valor solución analítica
 $Y_i \simeq y(x_i)$ valor aproximación

Método de Euler

- La EDO debe verificarse en todo $[a,b]$, en particular

$$\frac{dy}{dx}(x_i) = f(x_i, y_i)$$

- La idea básica del método de Euler es aproximar la derivada en x_i mediante un *cociente incremental*

$$y_{i+1} = y_i + h \frac{dy}{dx}(x_i) + \mathcal{O}(h^2) \quad (\text{Taylor})$$



$$\frac{dy}{dx}(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \tau_i(h) \quad (\text{aproximación de la derivada})$$

donde $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h)$ es el error de truncamiento.

- Sustituyendo en la particularización de la EDO en x_i se obtiene

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + h\tau_i(h)$$

(ecuación que verifica la solución analítica)

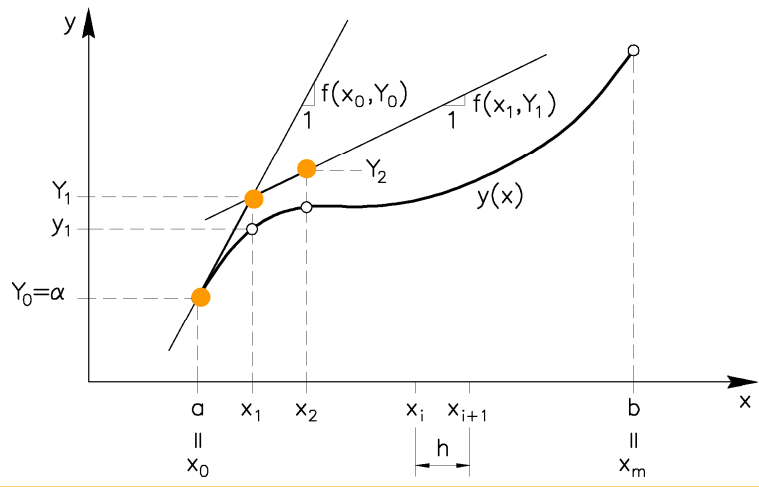
- Despreciando los errores de truncamiento $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h)$ se obtiene el esquema numérico del **método de Euler**

$$Y_{i+1} = Y_i + hf(x_i, Y_i)$$

(ecuación que verifica la solución numérica)

Mètode de Euler

$$\begin{cases} Y_0 = \alpha \\ Y_{i+1} = Y_i + hf(x_i, Y_i) \quad i = 0, \dots, m-1 \end{cases}$$



Mètode de diferències centradas

- Se considera una aproximación centrada de la derivada

(Taylor)

$$y_{i+1} = y_i + h \frac{dy}{dx}(x_i) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2y}{dx^2}(x_i) + \mathcal{O}(h^3)$$

$$y_{i-1} = y_i - h \frac{dy}{dx}(x_i) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2y}{dx^2}(x_i) + \mathcal{O}(h^3)$$

restando

$$y_{i+1} - y_{i-1} = 2h \frac{dy}{dx}(x_i) + \mathcal{O}(h^3)$$

$$\frac{dy}{dx}(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - \tau_i(h) \quad \text{(aproximación de la derivada)}$$

con error de truncamiento $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^2)$

- Sustituyendo en la EDO

$$\frac{dy}{dx}(x_i) = f(x_i, y_i)$$

se obtiene

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i) + 2h\tau_i(h)$$

- Despreciando los errores de truncamiento $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^2)$ se obtiene el esquema del **método de diferencias centradas**

$$Y_{i+1} = Y_{i-1} + 2hf(x_i, Y_i)$$

Método de diferencias centradas

$$\begin{cases} Y_0 & = \alpha \\ Y_1 & = Y_0 + hf(x_0, Y_0) \\ Y_{i+1} & = Y_{i-1} + 2hf(x_i, Y_i) \quad i = 1, \dots, m-1 \end{cases}$$

- El cálculo de Y_{i+1} requiere Y_i e Y_{i-1}
- El primer paso se hace con el método de Euler, u otro método que sólo requiera Y_0 , manteniendo el orden del método

Método de Euler hacia atrás

- Se considera una aproximación hacia atrás de la derivada

(Taylor)
$$y_i = y_{i+1} - h \frac{dy}{dx}(x_{i+1}) + \mathcal{O}(h^2)$$



$$\frac{dy}{dx}(x_{i+1}) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + \tau_i(h) \quad (\text{aproximación de la derivada})$$

con error de truncamiento $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h)$

- Sustituyendo en la EDO

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}) + h\tau_i(h)$$

- Despreciando los errores de truncamiento $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h)$ se obtiene el esquema del método de Euler hacia atrás

$$Y_{i+1} = Y_i + hf(x_{i+1}, Y_{i+1})$$

Método de Euler hacia atrás

$$\begin{cases} Y_0 = \alpha \\ Y_{i+1} = Y_i + hf(x_{i+1}, Y_{i+1}) \end{cases} \quad i = 0, \dots, m - 1$$

- Hay que resolver una ecuación (o un sistema) en general **no lineal** para calcular Y_{i+1} a partir de Y_i . En esta situación se dice que es un **método implícito**.

Ejemplo

$$f(x, y) = x \sin(y)$$

- Método **explícito**: método de Euler

$$Y_{i+1} = Y_i + hx_i \sin(Y_i) \quad \text{fórmula explícita para calcular } Y_{i+1}$$

- Método **implícito**: método de Euler hacia atrás

$$Y_{i+1} = Y_i + hx_i \sin(Y_{i+1})$$



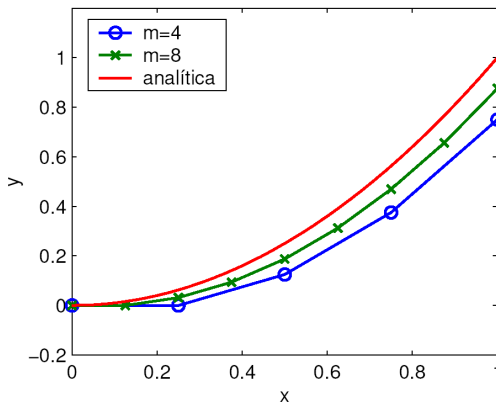
$$Y_{i+1} - hx_i \sin(Y_{i+1}) - Y_i = 0 \quad \text{ecuación no lineal para calcular } Y_{i+1} \text{ (ceros de funciones)}$$

CONVERGENCIA

Definición

Un método es **convergente** si para cualquier problema de valor inicial bien planteado verifica

$$\max_{0 \leq i \leq m} |y_i - Y_i| \longrightarrow 0 \quad \text{cuando } m \longrightarrow \infty$$



La solución numérica se acerca tanto como se desee a la solución analítica al aumentar m (reducir h)

Residuo (error local)

- Se define el **residuo** como lo que le falta al esquema numérico para que la solución analítica lo verifique exactamente.

- Por ejemplo, para el método de Euler el residuo es

$$\mathcal{R}_i(h) = y_{i+1} - y_i - hf(x_i, y_i) = h\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^2)$$

donde $y_i = y(x_i)$, $y_{i+1} = y(x_{i+1})$, con $y(x)$ la solución analítica

- El residuo $\mathcal{R}_i(h)$ en cada paso se puede interpretar como el error debido al cálculo de Y_{i+1} a partir de Y_i (sin tener en cuenta el error ya acumulado en Y_i), es decir, el **error local**.

CONSISTENCIA

- Se llama **error global** al error acumulado en la solución numérica $Y_m \simeq y(b)$ (después de los m pasos).
- El error global es de orden $\mathcal{O}(m\mathcal{R}_i(h))$, el mismo que el **error de truncamiento**

$$\tau_i(h) = \frac{1}{h}\mathcal{R}_i(h)$$

Definición

Un método es **consistente** si para cualquier problema de valor inicial bien planteado verifica

$$\max_{0 \leq i \leq m} \tau_i(h) \longrightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad h \longrightarrow 0$$

Orden de un esquema

- Los métodos basados en la aproximación de la derivada son consistentes, puesto que
 - $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h)$ para el método de Euler y el método de Euler hacia atrás y
 - $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^2)$ para el método de diferencias centradas.

Definición

Se dice que un método es de **orden q** si el error de truncamiento es

$$\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^q)$$

Si el método es de orden q el **error global** es

$$|Y_m - y(b)| = \mathcal{O}(\tau_i(h)) = \mathcal{O}(h^q) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{m^q}\right)$$

ESTABILIDAD

- El PVI es **estable** si pequeñas perturbaciones de la función $f(x,y)$ o de las condiciones iniciales afectan poco a la solución.
- Las perturbaciones pueden corresponder, por ejemplo, a pequeños errores en las condiciones iniciales o en la definición de $f(x,y)$.
- Evidentemente, sólo se plantea la resolución numérica de PVI que sean estables.
- Análogamente, se dice que un esquema numérico es **estable punto a punto** (*pointwise stable*) o **cero-estable** si pequeñas perturbaciones del esquema o de las condiciones iniciales afectan poco a la solución.

Teorema de Lax

- En realidad, no es necesario comprobar la convergencia y la estabilidad del esquema. Gracias al siguiente teorema, es suficiente comprobar sólo una de las dos.

Teorema

(Teorema de equivalencia de Lax) Para un PVI bien planteado, si el esquema es consistente entonces
 es cero-estable \Leftrightarrow es convergente

Estabilidad absoluta

- Se estudia el comportamiento de la solución numérica al resolver el problema lineal

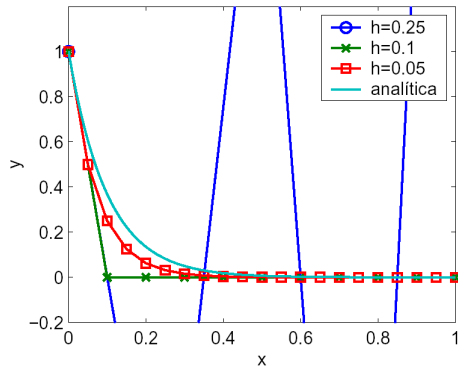
$$\frac{dy}{dx} = \lambda y, \quad y(a) = \alpha$$

si $\text{Re}(\lambda) < 0$ la solución analítica tiende a cero (cuando x tiende a infinito).

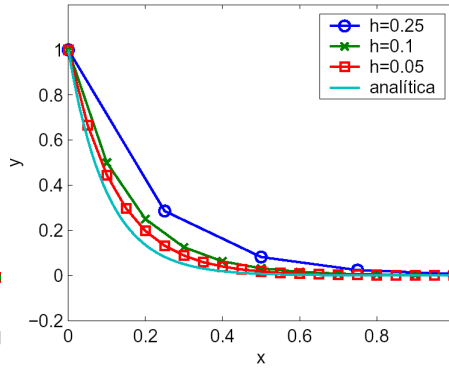
- Para λ y h fijados, se dice que el esquema es **absolutamente estable** si la solución numérica tiende a cero.
- En general (EDO no lineal) linealizar la EDO (Taylor) para ver el comportamiento en el entorno de un punto de interés.

Ejemplo numérico con $\lambda = -10$

Método de Euler



Método de Euler hacia atrás



La estabilidad absoluta del esquema depende de λh

Análisis de estabilidad del método de Euler

- Método de Euler para $f(x, y) = \lambda y$

$$Y_{i+1} = Y_i + h\lambda Y_i$$

equivalentemente $Y_{i+1} = GY_i$ con $G = 1 + h\lambda$

G es el **factor de amplificación**.

- El esquema es absolutamente estable si $|G| < 1$, es decir,

$$|1 + h\lambda| < 1$$

- Para λ real la condición de estabilidad es

$$-2 < \lambda h < 0 \quad (\text{condicionalmente estable})$$

Análisis de estabilidad del método de Euler hacia atrás

- Método de Euler hacia atrás para $f(x, y) = \lambda y$

$$Y_{i+1} = Y_i + h\lambda Y_{i+1} \longrightarrow (1 - h\lambda)Y_{i+1} = Y_i$$

equivalentemente

$$Y_{i+1} = GY_i \text{ con } G = \frac{1}{1 - h\lambda}$$

- Condición de estabilidad: $|1 - h\lambda| > 1$

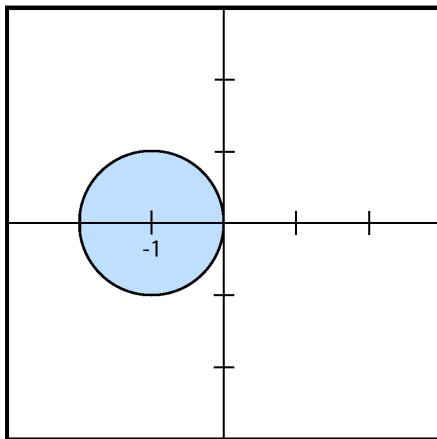
- Condición de estabilidad para λ real

$\lambda h < 0 \text{ o } \lambda h > 2$

(incondicionalmente estable para $\lambda < 0$)

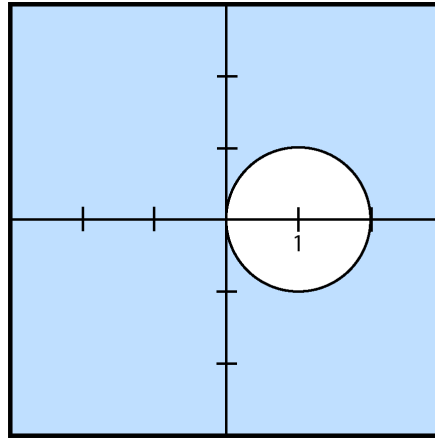
Regiones de estabilidad absoluta

Euler



$$|1 + \bar{h}| < 1$$

Euler hacia atrás



$$|1 - \bar{h}| > 1$$

Análisis de estabilidad del método de diferencias centradas

- Mediante un proceso similar, pero un poco más elaborado, se llega a la condición de estabilidad

$$\left| \lambda h \pm \sqrt{(\lambda h)^2 + 1} \right| < 1$$

- El método es **inestable para λ real**:

$$\lambda h > 0 \Rightarrow \left| \lambda h + \sqrt{(\lambda h)^2 + 1} \right| > 1$$

$$\lambda h < 0 \Rightarrow \left| \lambda h - \sqrt{(\lambda h)^2 + 1} \right| > 1$$



MÉTODOS RUNGE-KUTTA: métodos de paso simple

- Se considera la EDO

$$\frac{dy}{dx}(x) = f(x, y)$$

- Integrando en el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dy}{dx} dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx$$



$$y_{i+1} - y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx$$

- La idea de los métodos de Runge-Kutta es utilizar una **cuadratura numérica para aproximar la integral**.

- Usando la regla del trapecio para aproximar la integral

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, Y_i) + f(x_{i+1}, Y_{i+1})]$$

método del trapecio (implícito)

- Método de Heun (Runge-Kutta explícito de segundo orden):

$$Y_{i+1}^* = Y_i + hf(x_i, Y_i)$$

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, Y_i) + f(x_{i+1}, Y_{i+1}^*)]$$

- El método de Heun también puede escribirse

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{2} [k_1 + k_2] \quad \text{con} \quad \begin{cases} k_1 = f(x_i, Y_i) \\ k_2 = f(x_i + h, Y_i + hk_1) \end{cases}$$

- Existen numerosos métodos Runge-Kutta, que pueden ser explícitos, implícitos o semi-implícitos...
- Por ejemplo, el Runge-Kutta explícito de cuarto orden más común es:

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$$

$$\begin{cases} k_1 = f(x_i, Y_i) \\ k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 = f(x_i + h, Y_i + hk_3) \end{cases}$$

Observación:
 los RK explícitos de orden $s > 5$ requieren más de s evaluaciones de la función f

Forma general de los métodos de Runge-Kutta

$$Y_{i+1} = Y_i + h [b_1 k_1 + b_2 k_2 + \dots + b_s k_s]$$

$$k_1 = f(x_i + c_1 h, Y_i + h(a_{11} k_1 + a_{12} k_2 + \dots + a_{1s} k_s))$$

$$k_2 = f(x_i + c_2 h, Y_i + h(a_{21} k_1 + a_{22} k_2 + \dots + a_{2s} k_s))$$

$$\vdots$$

$$k_s = f(x_i + c_s h, Y_i + h(a_{s1} k_1 + a_{s2} k_2 + \dots + a_{ss} k_s)).$$

- Las constantes a_{kj} , b_k y c_k dependen del método y deben cumplir

(cuadraturas de orden 0 o superior)

$$c_k = \sum_{j=1}^s a_{kj} \qquad \sum_{k=1}^s b_k = 1$$

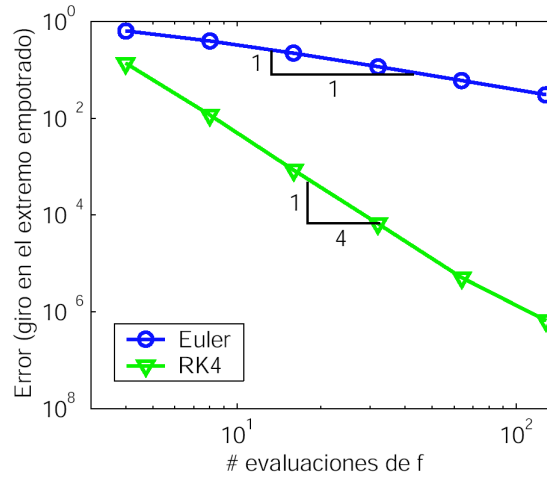
- Es usual representar el método con la llamada **tabla de Butcher**

c_1	a_{11}	a_{12}	\dots	a_{1s}	\equiv	\mathbf{c}	\mathbf{A}
c_2	a_{21}	a_{22}	\dots	a_{2s}			
\vdots	\vdots			\vdots			
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss}			
	b_1	b_2	\dots	b_s			\mathbf{b}^T

- Convergencia (medida del error: $|(Y_m)_{(1)}| \simeq |\Psi(1)| = 0$)

$$E_{\text{Euler}} \approx C h^{-1}$$

$$E_{\text{RK4}} \approx C h^{-4}$$



CONTROL DEL ERROR Y PASO VARIABLE

- Método de paso simple de orden p: error local

$$E_h = C h^{p+1}$$

- Calculada la solución en x_i , el objetivo es determinar h^* para que el error en x_{i+1} sea menor que una tolerancia dada

$$E_{h^*} \leq t_{ol}$$

Control del error y paso variable

1. Cálculo de Y_{i+1} con h cualquiera (h del paso anterior)
2. Estimar/aproximar el error E_h cometido comparando con otro resultado con mayor precisión:
 - (a) con el mismo método y longitud de paso h menor o
 - (b) con un método de orden $p+1$ o mayor
3. Calcular h^* utilizando la expresión del error

$$\left. \begin{aligned} E_h &= Ch^{p+1} \\ E_h^* &= C(h^*)^{p+1} \end{aligned} \right\} \xrightarrow{t_{ol}} \frac{E_h^*}{E_h} = \frac{C(h^*)^{p+1}}{Ch^{p+1}}$$

$$h^* = \left(\frac{t_{ol}}{E_h} \right)^{1/(p+1)} h$$

RKF45 (Runge-Kutta-Fehlberg 45)

$$k_1 = f(x_i, Y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{4}h, Y_i + h\left(\frac{1}{4}k_1\right)\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{3}{8}h, Y_i + h\left(\frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right)\right)$$

$$k_4 = f\left(x_i + \frac{12}{13}h, Y_i + h\left(\frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right)\right)$$

$$k_5 = f\left(x_i + h, Y_i + h\left(\frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right)\right)$$

$$k_6 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, Y_i + h\left(-\frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right)\right)$$

6 evaluaciones de f

$$Y_{i+1} = Y_i + h \left[\frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4101}k_4 - \frac{1}{5}k_5 \right]$$

$$E_h \simeq h \left[\frac{1}{360}k_1 - \frac{128}{4275}k_3 - \frac{2197}{75240}k_4 + \frac{1}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6 \right]$$