SOLUCION NUMERICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

CI71D MODELACION NUMERICA EN INGENIERIA HIDRAULICA Y AMBIENTAL

Prof. Y. Niño Sem. Primavera 2004

Sea y una función de una variable independiente, t (que representa, por ejemplo, el tiempo), y sea $y' = f(y,t)$ una ecuación diferencial ordinaria (EDO) con condición inicial, en $t = 0$, $y(0) = y_0$. La solución de esta EDO es $y(t)$. Un ejemplo de tal solución se grafica en la Fig. 1.

Supongamos que conocemos la solución en un tiempo t_1 cualquiera: $y(t_1) = y_1$. Una estimación de la solución en $t_2 = t_1 + \Delta t$, donde Δt representa un intervalo de tiempo relativamente pequeño, es:

$$y(t_2) = y_2 = y_1 + y_1' \ \Delta t$$

donde

$$y_1' = \frac{\partial y}{\partial t}(t_1) = f(y_1, t_1)$$

es conocido dado que se conoce la EDO. Gráficamente este resultado se muestra en la Fig. 2. Aplicando este procedimiento secuencialmente para avanzar el cálculo en el tiempo se encuentra que la solución numérica siempre tendrá un error con respecto a la solución real de la EDO.

Podría mejorarse este método de cálculo si se corrige la pendiente y_1' con la que se calcula y_2, de modo de conseguir una estimación más adecuada de ella. Una forma de hacerlo es yendo un paso Δt adelante de modo de estimar un nuevo valor de la derivada (o pendiente en el ejemplo de la Fig. 2) y usar este valor para corregir la pendiente a usar en el cálculo definitivo. Esto da lugar a un método *Predictor-Corrector*.

Por ejemplo, para estimar el valor de y en el tiempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, y_{n+1}, se recurre al *predictor* siguiente (Fig. 3):

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\ \Delta t\ y_n'$$

Con este valor conocido de y_{n+1} se estima el valor de la derivada $y_{n+1}' = f(y_{n+1}, t_{n+1})$. A partir de este resultado es posible mejorar la estimación de la derivada en el intervalo $t_n < t < t_{n+1}$ usando el promedio entre y_n' e y_{n+1}'. Así con el *corrector* siguiente se obtiene un valor mejorado de y_{n+1}:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{(y_n' + y_{n+1}')}{2}\ \Delta t$$

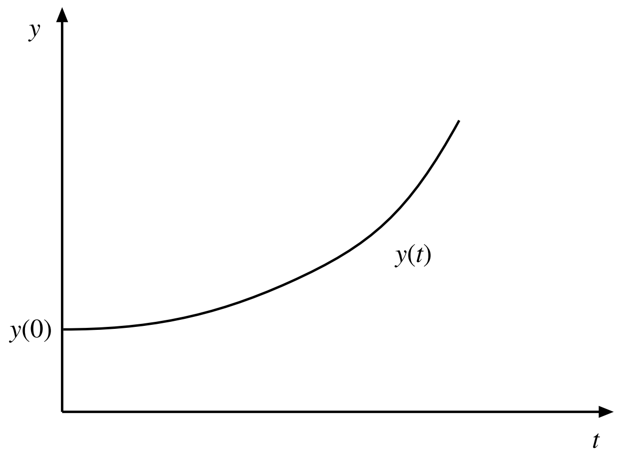

Figura 1: Solución de la EDO $y' = f(y,t)$.

En este método de cálculo se aplican secuencialmente predictor y corrector, partiendo de las condiciones iniciales del problema. Sin embargo, para $n = 2$, el cálculo de y_3 requiere conocer y_1 e y_2, donde solo y_1 es una condición inicial conocida. Para estimar y_2 puede hacerse una aproximación simple: $y_2 = y_1 + y_1' \, \Delta t$, con $y_1' = f(y_1, t_1)$. A partir de los *puntos de partida*, y_1 e y_2, el método predictor-corrector se puede aplicar sin problemas para obtener la solución numérica $y(t)$ con un paso de tiempo Δt.

Se puede estimar el error asociado al predictor haciendo la siguiente expansión en serie de Taylor:

$$y_{n+1} = y_n + y_n' \, \Delta t + y_n'' \, \frac{(\Delta t)^2}{2!} + y_n''' \, \frac{(\Delta t)^3}{3!} + ...$$

$$y_{n-1} = y_n - y_n' \, \Delta t + y_n'' \, \frac{(\Delta t)^2}{2!} - y_n''' \, \frac{(\Delta t)^3}{3!} + ...$$

y por lo tanto:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2 \, y_n' \, \Delta t + 2 \, y_n''' \, \frac{(\Delta t)^3}{3!} + ...$$

Definiendo el error del predictor como $e_p = y_{n+1} - y_{n+1}^p$, donde y^p denota el valor dado por el predictor, el que de acuerdo al análisis anterior es:

$$y_{n+1}^p = y_{n-1} + 2 \, y_n' \, \Delta t$$

entonces se tiene:

$$e_p = 2 \, y_n''' \, \frac{(\Delta t)^3}{3!} + O(\Delta t)^4$$

de donde se deduce que el error del predictor es de orden $O(\Delta t)^3$.

De manera similar, el error asociado al corrector se obtiene como $e_c = y_{n+1} - y_{n+1}^c$, donde y^c denota el valor dado por el corrector:

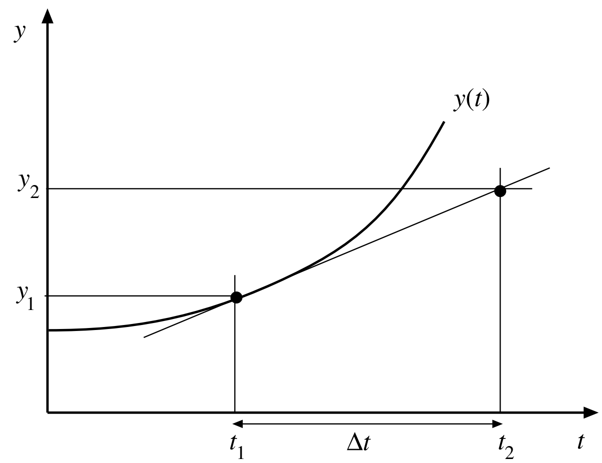

Figura 2: Solución numérica de la EDO $y' = f(y,t)$.

$$y_{n+1}^c = y_n + \frac{(y_n' + y_{n+1}')}{2}\,\Delta t$$

Introduciendo la expansión anterior para y_{n+1} permite obtener:

$$e_c = -y_n'''\,\frac{(\Delta t)^3}{12} + O(\Delta t)^4$$

de donde se deduce que el error del predictor es también de orden $O(\Delta t)^3$.

Al sumar los errores de predictor y corrector, dado que tienen signos contrarios, se obtiene un error inferior al del predictor por si solo:

$$e_p + e_c = y_n'''\,\frac{(\Delta t)^3}{4} + O(\Delta t)^4$$

Otra característica que es necesario estudiar del método predictor-corrector es su estabilidad. Esto implica analizar la posibilidad de que las sucesivas iteraciones del método no converjan a la solución real de la EDO, sino que, por el contrario, ellas diverjan. Consideremos con este fin y en primer lugar, la estabilidad del predictor definido por:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\,\Delta t\,y_n' \quad , \quad y_n' = f(y_n, t_n)$$

Sea y_{n+1}^* la solución exacta de la EDO en el instante t_{n+1}. Esta solución no satisface la ecuación del predictor porque esta última tiene un error asociado:

$$y_{n+1}^* = y_{n-1}^* + 2\,\Delta t\,y_n^{*\prime} + e_n$$

donde e_n representa un error o residuo que varía en cada instante de tiempo y $y_n^{*\prime} = f(y_n^*, t_n)$. La diferencia entre la solución exacta y el predictor está dada por:

$$\epsilon_n = y_n^* - y_n \quad , \quad \epsilon_n' = y_n^{*\prime} - y_n'$$

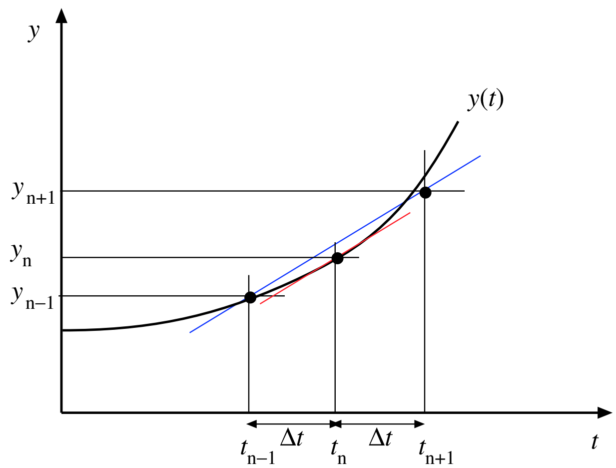

Figura 3: Solución numérica generada por el Predictor: $y_{n+1} = y_{n-1} + 2\ \Delta t\ y'_n$.

Con este resultado se puede obtener una ecuación recursiva para esta diferencia, similar a la de la solución exacta, dada por:

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_{n-1} + 2\ \Delta t\ \epsilon'_n + e_n$$

pero:

$$\epsilon'_n = y^{*\prime}_n - y'_n = f(y^*_n, t_n) - f(y_n, t_n)$$

Haciendo una expansión en serie de Taylor de $f(y^*_n, t_n)$ en torno a $f(y_n, t_n)$ se obtiene:

$$f(y^*_n, t_n) = f(y_n, t_n) + \frac{\partial f}{\partial y}\ (y^*_n - y_n) + ...$$

de donde se deduce que :

$$\epsilon'_n \approx \frac{\partial f}{\partial y}\ \epsilon_n$$

resultado que permite escribir:

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_{n-1} + 2\ \Delta t\ \frac{\partial f}{\partial y}\ \epsilon_n + e_n$$

o bien:

$$\epsilon_{n+1} - 2\ \Delta t\ \frac{\partial f}{\partial y}\ \epsilon_n - \epsilon_{n-1} = e_n$$

Es posible encontrar una solución analítica para esta ecuación recursiva. Para la parte homogénea se puede plantear la ecuación característica:

$$m^2 - 2\ \Delta t\ \frac{\partial f}{\partial y}\ m - 1 = 0$$

cuya solución es:

$$m_1 = \frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t + \sqrt{(\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)^2 + 1}$$

$$m_2 = \frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t - \sqrt{(\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)^2 + 1}$$

La solución homogénea para la diferencia ϵ_n es por lo tanto:

$$\epsilon_n = C_1\ m_1^n + C_2\ m_2^n$$

donde C_1 y C_2 son constantes.

Revisando los signos de m_1 y m_2, se concluye que si $\partial f/\partial y > 0$, entonces $m_1 > 1$ y $m_2 < 0$; si, por el contrario, $\partial f/\partial y < 0$, entonces $m_1 < 1$ y $m_2 < -1$. En cualquier caso se obtiene que ϵ, es decir la diferencia entre la solución exacta y la del predictor, crece exponencialmente en el tiempo (la única forma de que ello no ocurra es cuando las soluciones de la ecuación característica tienen un valor absoluto inferior a 1) y, por lo tanto, es posible concluir que el predictor es *inestable*. Es decir, la aplicación recursiva del predictor no necesariamente conduce a una solución adecuada de la EDO original.

Estudiemos ahora la estabilidad del corrector dado por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2}\ y'_n + \frac{\Delta t}{2}\ y'_{n+1} \quad , \quad y'_n = f(y_n, t_n) \quad , \quad y'_{n+1} = f(y_{n+1}, t_{n+1})$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en el caso anterior, es posible llegar a la ecuación recursiva siguiente para la diferencia ϵ entre la solución exacta y la del corrector:

$$(1 - \frac{\Delta t}{2}\ \frac{\partial f}{\partial y})\ \epsilon_{n+1} - (1 + \frac{\Delta t}{2}\ \frac{\partial f}{\partial y})\ \epsilon_n = e_n$$

La ecuación característica en este caso es:

$$m^2 - \frac{1 + \frac{\Delta t}{2}\ \frac{\partial f}{\partial y}}{1 - \frac{\Delta t}{2}\ \frac{\partial f}{\partial y}}\ m = 0$$

y la solución correspondiente es:

$$m_1 = 0$$

$$m_2 = \frac{1 + \frac{\Delta t}{2}\ \frac{\partial f}{\partial y}}{1 - \frac{\Delta t}{2}\ \frac{\partial f}{\partial y}}$$

El valor de m_2 se puede expresar en forma de la siguiente serie, en el caso $|\frac{\partial f}{\partial y}\ \frac{\Delta t}{2}| < 1$:

$$m_2 = 1 + \frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t + (\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)^2\ \frac{1}{2} + (\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)^3\ \frac{1}{4} + ...$$

y este valor resulta bastante cercano a:

$$\exp(\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t) = 1 + \frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t + (\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)^2\ \frac{1}{2!} + (\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)^3\ \frac{1}{3!} + ...$$

de donde es posible deducir:

$$m_2 \approx \exp(\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)$$

de modo que, dado que $m_1 = 0$, para que el corrector sea *estable* basta que $|\exp(\frac{\partial f}{\partial y}\ \Delta t)| < 1$, lo cual se puede lograr con una selección adecuada del valor de Δt.

Es necesario mencionar que el hecho de que el error ϵ del predictor crezca exponencialmente, no necesariamente implica que la solución numérica es inservible, particularmente en el caso frecuente en el que las EDOs tienen asociadas un crecimiento exponencial de su solución.

En cualquier caso, es posible deducir que la aplicación alternada de predictor y corrector puede conducir a un comportamiento estable de la solución numérica de la EDO, para un valor adecuado del paso de tiempo Δt.

Otros predictores que han sido propuestos por distintos investigadores, son los siguientes:

- Milne:

  $$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4\Delta t}{3}\ (2\ y'_n - y'_{n-1} + 2\ y'_{n-2}) + \frac{14(\Delta t)^5}{45}\ y_n^V$$

  Despreciando el último término se obtiene un método de orden $O(\Delta t)^4$.

- Adams - Bashforth:

  $$y_{n+1} = A_0\ y_n + A_1\ y_{n-1} + A_2\ y_{n-2} + \Delta t\ (B_0\ y'_n + B_1\ y'_{n-1} + B_2\ y'_{n-2} + B_3\ y'_{n-3}) + E_5\ \frac{(\Delta t)^5}{5!}\ y_n^V$$

  Despreciando el último término se obtiene, al igual que en el caso de Milne, un método de orden $O(\Delta t)^4$. Los valores de las constantes son: $A_0 = 1$, $A_1 = 0$, $A_2 = 0$, $B_0 = 35/24$, $B_1 = -39/24$, $B_2 = 37/24$, $B_3 = -9/24$, $E_5 = 251/6$,

En el caso de métodos de orden superior a los de predictor-corrector, la solución numérica requiere una mayor cantidad de puntos de partida. Estos puntos de partida se pueden generar a partir de la condición inicial, aplicando esquemas de orden inferior.

Un método de cálculo numérico de EDOs alternativo es el conocido como *método de Runge-Kutta*. En su versión de *cuarto orden*, la ecuación: $y' = f(y,t)$ se resuelve con el método secuencial siguiente, donde $y_n = y(t_n)$ y $t_{n+1} = t_n + \Delta t$:

$$k_1 = f(y_n, t_n)\ \Delta t$$

$$k_2 = f(y_n + \frac{k_1}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2})\ \Delta t$$

$$k_3 = f(y_n + \frac{k_2}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2})\ \Delta t$$

$$k_4 = f(y_n + k_3, t_n + \Delta t)\ \Delta t$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\ (k_1 + 2\ k_2 + 2\ k_3 + k_4)$$

El error del método es $O(\Delta t)^5$. Si $y' = f(t)$, esta aproximación corresponde al método de integración de Simpson.

El método de Runge-Kutta hace muchos cálculos para avanzar un paso de tiempo, comparado, por ejemplo, al método Predictor-corrector, y por lo tanto resulta más demandante computacionalmente que esos otros métodos. A pesar de ello, y dada la capacidad de cálculo actual, este método es muy utilizado. Incluso, viene programado en paquetes como *Mathematica* o *Matlab*. Dado que el método de Runge-Kutta requiere información solo de un instante de tiempo para avanzar el cálculo al instante de tiempo posterior, se puede utilizar para generar los puntos de partida de métodos Predictor-corrector que utilizan más de un nivel de tiempo en el cálculo.

Para la resolución numérica de sistemas de EDOs se procede de manera similar a lo señalado para una única EDO. Por ejemplo, para resolver el sistema de ecuaciones:

$$x' = f(x, y, z, t)$$

$$y' = g(x, y, z, t)$$

$$z' = h(x, y, z, t)$$

utilizando el método Predictor-corrector, partiendo de valores conocidos x_{n-1}, y_{n-1}, z_{n-1} y x'_n, y'_n, z'_n, se calcula:

$$x_{n+1} = x_{n-1} + 2\ \Delta t\ x'_n$$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\ \Delta t\ y'_n$$

$$z_{n+1} = z_{n-1} + 2\ \Delta t\ z'_n$$

y con estos valores se estima x'_{n+1}, y'_{n+1} y z'_{n+1} para finalmente determinar:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t\ \frac{(x'_n + x'_{n+1})}{2}$$

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t\ \frac{(y'_n + y'_{n+1})}{2}$$

$$z_{n+1} = z_n + \Delta t\ \frac{(z'_n + z'_{n+1})}{2}$$

La mayor dificultad para aplicar este método ocurre en el caso de ecuaciones muy no lineales, para las que no sea posible expresar las derivadas explícitamente de la forma mostrada en el sistema de EDOs anterior. Sin embargo, ese caso no ocurre muy frecuentemente para las típicas ecuaciones que gobiernan procesos físicos, químicos o biológicos de interés para el curso.

Otro tema de interés corresponde al de ODEs de orden superior a 1. Para aplicar los métodos revisados anteriormente se recurre a la generación de variables auxiliares de cálculo, con sus respectivas ecuaciones que las rigen, de modo de reducir la ODE original a un sistema de ODEs de primer orden. Un par de ejemplos se presenta a continuación.

- Sea la ODE de segundo orden para $y(x)$:

$$y'' + 3\,y' + y^2 = x^2$$

Para resolver esta ecuación se define la variable auxiliar: $z(x) = y'$, de modo que se genera el siguiente sistema de ODEs de primer orden:

$$z' = f(x, y, z) = x^2 - 3\,z - y^2$$

$$y' = g(x, y, z) = z$$

el cual puede resolverse fácilmente tanto por métodos Predictor-Corrector o Runge-Kutta.

- Sea la ODE de tercer orden para $y(x)$:

$$y''' - y'^2 + 4y = 0$$

Para resolver esta ecuación se definen las variables auxiliares: $z(x) = y'$ y $w(x) = z'$, de modo que se genera el siguiente sistema de ODEs de primer orden:

$$w' = f(x, y, z, w) = z^2 - 4\,y$$

$$z' = g(x, y, z, w) = w$$

$$y' = h(x, y, z, w) = z$$

el cual, de nuevo, puede resolverse fácilmente tanto por métodos Predictor-Corrector o Runge-Kutta.