Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Problemas de Valor Frontera

Cristopher Arenas
cristopher.arenas@usm.cl

Universidad Técnica Federico Santa María
Computación Científica II - ILI286

v1.1

Considerar la siguiente Ecuación Diferencial Ordinaria:

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} = f\left(x, y(x), y'(x)\right)$$
$$y(a) = y_a$$
$$y(b) = y_b$$

- Esta ecuación es un **problema de valor frontera** (BVP).
- Se conocen los valores de $y(x)$ en la frontera de x, esto es, $x = a$ y $x = b$.
- ¿Por qué son necesarias dos condiciones de frontera?

Introducción

Ejemplo: Considerar el siguiente BVP:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} &= 1 \\ y(0) &= a \\ y(1) &= b \end{aligned}$$

Para encontrar una solución analítica es necesario integrar dos veces, resultando:

$$y(x) = \frac{x^2}{2} + C_1\, x + C_2$$

¿Qué se puede hacer para encontrar los valores de C_1 y C_2?

Introducción

Usando las condiciones de frontera, se debe resolver un sistema lineal para determinar C_1 y C_2:

$$
\begin{aligned}
y(0) &= \frac{0^2}{2} + C_1 \cdot 0 + C_2 = a \\
y(1) &= \frac{1^2}{2} + C_1 \cdot 1 + C_2 = \frac{1}{2} + C_1 + C_2 = b
\end{aligned}
$$

Donde se obtiene:

$$
\begin{aligned}
C_1 &= b - \frac{1}{2} - a \\
C_2 &= a
\end{aligned}
$$

Introducción

Numéricamente, se resolverán los Problemas de Valor Frontera utilizando dos métodos:

1. Método del Disparo.
2. Método de las Diferencias Finitas.

Método del Disparo

Resolver un BVP como si fuera un IVP.

Considerar el problema de valor frontera:

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} = f\left(x, y(x), y'(x)\right)$$
$$y(a) = k_1$$
$$y(b) = k_2$$

Al tratar el BVP como un IVP, considerar $x \to t$, entonces se tiene el siguiente IVP:

$$y''(t) = f\left(t, y(t), y'(t)\right)$$
$$y(a) = k_1$$
$$y'(a) = \ ?$$

Método del Disparo

El IVP anterior puede convertirse en un sistema dinámico:

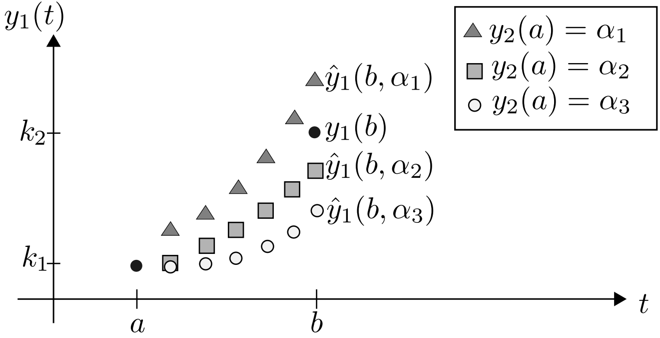
$$\begin{aligned} y_1'(t) &= y_2(t) \\ y_2'(t) &= f\left(t, y_1(t), y_2(t)\right) \\ y_1(a) &= k_1 \\ y_2(a) &= \ ? \end{aligned}$$

Preguntas:

- ¿Qué ocurrió con $y(b)$?
- ¿Se conoce toda la información del IVP?
- ¿Qué consideraciones deben tenerse en cuenta para resolver el IVP?

Método del Disparo

Considerar $y_2(a) = \alpha_k$, un valor arbitrario. Resolviendo el IVP, se obtendrán valores numéricos para $y_1(t)$ y para $y_2(t)$ con $a \leq t \leq b$.



¿Qué debería ocurrir con el valor de $y_1(b)$ al comparar el valor numérico con el valor exacto?

Método del Disparo

Considerar $F(\alpha) = \hat{y}_1(b, \alpha) - y_1(b)$ la diferencia entre:

- $\hat{y}_1(b, \alpha)$, el valor numérico de la función $y_1(t)$ en $t = b$ obtenido al resolver el IVP suponiendo que $y_2(a) = \alpha$, y
- el valor conocido $y_1(b)$.

El método del disparo, se reduce al problema de encontrar una raíz de $F(\alpha)$, es decir, encontrar un α tal que $F(\alpha) = 0$. ¿Cómo se puede encontrar la raíz de esta función?

Método del Disparo

Ejemplo: Considerar el BVP:

$$\begin{aligned} y''(x) &= -5\,y'(x) - 6\,y(x) \\ y(0) &= 1 \\ y(1) &= 3 \end{aligned}$$

Resolver, usando el Método del Disparo.

Método del Disparo

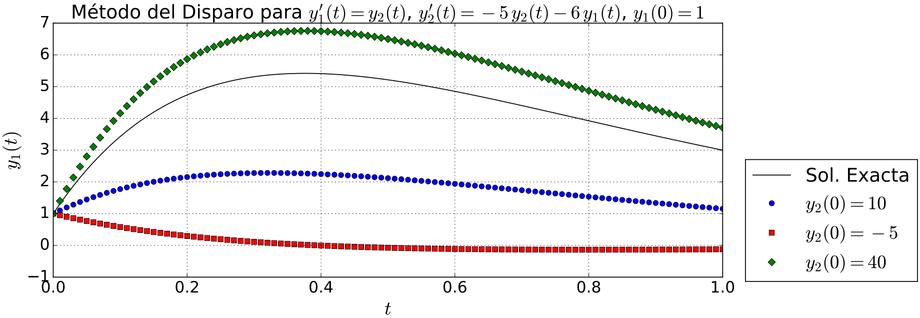
El BVP se transforma en el sistema dinámico:

$$
\begin{aligned}
y_1'(t) &= y_2 \\
y_2(t) &= -5\, y_2(t) - 6\, y_1(t) \\
y_1(0) &= 1 \\
y_2(0) &= \alpha
\end{aligned}
$$

Se debe resolver el IVP $\mathbf{y}'(t) = J\,\mathbf{y}(t)$, con condición inicial $\mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ \alpha \end{bmatrix}$.

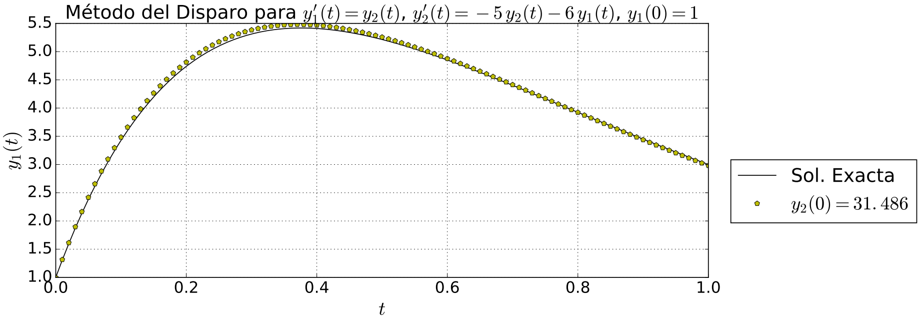
Se debe escoger un ODE Solver estable.

Método del Disparo



- Usando un método de búsqueda de ceros, se encontrará α_k, tal que $F(\alpha_k) = 0$.
- Considerar el método de la bisección con intervalo inicial $[a, b] = [-5, 40]$. ¿Por qué?

Método del Disparo



- Se ha determinado que $F(31.486) = 0$.
- Al encontrar una condición correcta para $y_2(0)$ se puede reconstruir numéricamente la función $y(x)$.

Diferencias Finitas

Reconstruir $y(x)$ desde valores puntuales $y(x_i)$, donde en general lo único que se tiene es una estimación de $y(x_i)$, llamada y_i y valores conocidos en los bordes $y(a) = y_1 = k_1$ y $y(b) = y_2 = k_2$.

¿Cómo se puede usar y_i si es lo que se quiere encontrar?

Considerar una función $f(x)$. Por definición, la derivada de $f(x)$ en el valor x es:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

siempre que el límite exista.

Según el Teorema de Taylor, si una función es de clase C^2, entonces:

$$f(x+h) = f(x) + h\, f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(c)$$

donde c está entre x y $x+h$. Reordenando términos, se deduce la primera fórmula de diferencias finitas.

Fórmula de Diferencias Adelantadas de dos puntos (Forward Difference)

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(c)$$

donde c está entre x y $x+h$.

- Se usará la aproximación $f'(x) \approx \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$
- Forward Difference es un método de primer orden para aproximar la derivada de una función, debido a que el término de error es $\mathcal{O}(h)$.

Análogamente, usando el Teorema de Taylor sobre una función de clase C^2 se tiene:

$$f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(c)$$

Reordenando términos, se obtiene otra fórmula de diferencias finitas:

Fórmula de Diferencias Atrasadas de dos puntos (Backward Difference)

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2} f''(c)$$

donde c está entre $x-h$ y x.

- Se usará la aproximación $f'(x) \approx \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h}$
- Backward Difference es un método de primer orden. El término de error es $\mathcal{O}(h)$.

Una aproximación de segundo orden puede obtenerse usando el Teorema de Taylor. Considerar $f(x)$, función de clase C^3, entonces se tienen las ecuaciones:

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(c_1)$$
$$f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(c_2)$$

con $x-h < c_2 < x < c_1 < x+h$.

Restando ambas ecuaciones y reordenando se obtiene una fórmula de tres puntos para la primera derivada con un término de error explícito:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h} - \frac{h^2}{12}f'''(c_1) - \frac{h^2}{12}f'''(c_2)$$

El **Teorema Generalizado del Valor Intermedio** permite juntar los términos de error.

Fórmula de Diferencias Centradas de tres puntos (Central Difference)

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h} - \frac{h^2}{6} f'''(c)$$

donde c está entre $x-h$ y $x+h$.

- Se usará la aproximación $f'(x) \approx \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h}$
- Central Difference es un método de segundo orden. El término de error es $\mathcal{O}(h^2)$.

Una fórmula para la segunda derivada puede obtenerse usando las expansiones de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(c_1)$$
$$f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(c_2)$$

donde $f(x)$ es de clase C^4 y $x-h < c_2 < x < c_1 < x+h$.

Sumando ambos términos, se elimina el término de la primera derivada y se obtiene:

$$f(x+h) + f(x-h) - 2\,f(x) = h^2\,f''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(c_1) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(c_2)$$

Usando el **Teorema Generalizado del Valor Intermedio** para combinar errores y reordenando se obtiene una fórmula para la segunda derivada.

Fórmula de Diferencias Centradas de tres puntos para la segunda derivada

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(c)$$

donde c está entre $x-h$ y $x+h$.

- Se usará la aproximación $f''(x) \approx \dfrac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2}$
- Esta aproximación es de segundo orden. El término de error es $\mathcal{O}(h^2)$.

En resumen, se tiene las siguientes aproximaciones para calcular las derivadas:

$f'(x) \approx \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$	Forward Difference	$\mathcal{O}(h)$
$f'(x) \approx \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h}$	Backward Difference	$\mathcal{O}(h)$
$f'(x) \approx \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2\,h}$	Central Difference	$\mathcal{O}(h^2)$
$f''(x) \approx \dfrac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2}$		$\mathcal{O}(h^2)$

El Método de Diferencias Finitas establece condiciones que deben cumplir los puntos y_i, al usar estas aproximaciones.

Ejemplo: Considerar el BVP:

$$\begin{aligned} y''(x) &= -5\,y'(x) - 6\,y(x) \\ y(0) &= 1 \\ y(1) &= 3 \end{aligned}$$

Resolver, usando el Método de Diferencias Finitas.

Diferencias Finitas

- Considerar $y_i \approx y(x_i)$, con $x_i = \frac{i}{n}(1-0) = \frac{i}{n}$.
- Se conocen los valores en la frontera, por lo tanto: $y_0 = 1$ y $y_n = 3$.
- Para $0 < i < n$, se satisface la Ecuación Diferencial Ordinaria, esto es:

$$y''(x_i) = -5\, y'(x_i) - 6\, y(x_i)$$

Se usarán las siguientes aproximaciones para la primera y segunda derivada:

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_i+h) - y(x_i)}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$
$$y''(x_i) \approx \frac{y(x_i+h) - 2\, y(x_i) + y(x_i-h)}{h^2} = \frac{y_{i+1} - 2\, y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

con $h = x_{i+1} - x_i$.

Usando las consideraciones anteriores, se tienen las ecuaciones:

$$i = 0 \qquad y_0 = 1$$

$$i = 1 \qquad \frac{y_2 - 2\,y_1 + y_0}{h^2} = -5\frac{y_2 - y_1}{h} - 6\,y_1$$

$$i = 2 \qquad \frac{y_3 - 2\,y_2 + y_1}{h^2} = -5\frac{y_3 - y_2}{h} - 6\,y_2$$

$$\vdots$$

$$i = n-1 \qquad \frac{y_n - 2\,y_{n-1} + y_n}{h^2} = -5\frac{y_n - y_{n-1}}{h} - 6\,y_{n-1}$$

$$i = n \qquad y_n = 3$$

Considerar las $n-1$ ecuaciones de los casos $i = 1, 2, \ldots, n-1$.
Multiplicando por h^2 y agrupando términos, se tiene:

$$
\begin{array}{ll}
i = 1 & y_0 + (-2 - 5\,h + 6\,h^2)y_1 + (1 + 5h)y_2 = 0 \\
i = 2 & y_1 + (-2 - 5\,h + 6\,h^2)y_2 + (1 + 5h)y_3 = 0 \\
i = 3 & y_2 + (-2 - 5\,h + 6\,h^2)y_3 + (1 + 5h)y_4 = 0 \\
\vdots & \\
i = n-1 & y_{n-2} + (-2 - 5\,h + 6\,h^2)y_{n-1} + (1 + 5h)y_n = 0
\end{array}
$$

¿Cómo se pueden determinar los valores de las $n-1$ incógnitas?

Diferencias Finitas

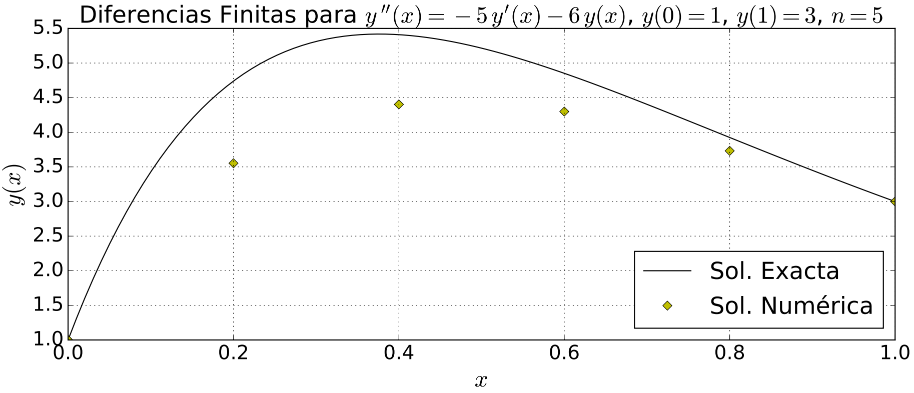
Considerar $\gamma = -2 - 5\,h + 6\,h^2$ y $\delta = 1 + 5h$. Las $n-1$ ecuaciones pueden expresarse matricialmente de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} \gamma & \delta & & & & \\ 1 & \gamma & \delta & & & \\ & 1 & \gamma & \delta & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & \gamma & \delta \\ & & & & 1 & \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y_0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -\delta\, y_n \end{bmatrix}$$

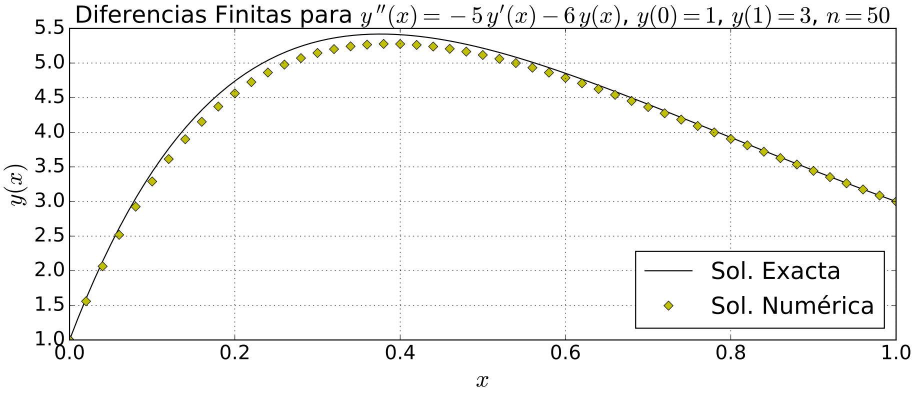
Preguntas:

- ¿Cómo se pueden encontrar los valores $y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}$?
- ¿Qué representan los valores $y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}$ encontrados?

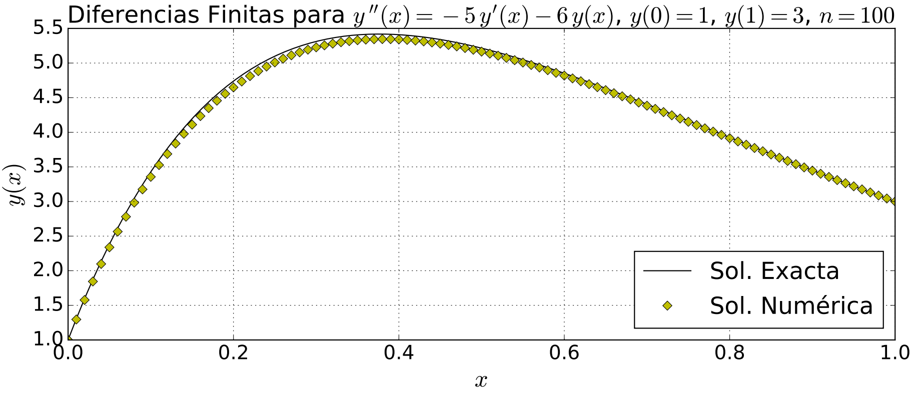
Diferencias Finitas



Diferencias Finitas



Diferencias Finitas



Considerar el BVP no lineal:

$$y''(x) = y^2$$
$$y(0) = 1$$
$$y(1) = 2$$

¿Cómo pueden utilizarse las fórmulas de Diferencias Finitas para encontrar numéricamente la función $y(x)$?

Usando la fórmula de segundo orden, para la segunda derivada se tienen las siguientes $n-1$ ecuaciones, expresadas matricialmente como:

$$\begin{bmatrix} y_0 - 2\,y_1 + y_2 - h^2\,y_1^2 \\ y_1 - 2\,y_2 + y_3 - h^2\,y_2^2 \\ y_2 - 2\,y_3 + y_4 - h^2\,y_3^2 \\ \vdots \\ y_{n-2} - 2\,y_{n-1} + y_n - h^2\,y_{n-1}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

¿Cómo pueden encontrarse los valores $y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}$ en este caso?

Preguntas:

- ¿Podría usarse otra aproximación para las derivadas en Diferencias Finitas? ¿Qué cambiaría?
- ¿Cómo se podrían obtener fórmulas de diferencias finitas para la tercera o cuarta derivada? ¿Qué orden tendrían estas fórmulas?
- ¿Qué ocurre si se tiene una relación no-lineal de $y''(x)$ con el Método del Disparo?, i.e. $F(x, y(x), y'(x), y''(x)) = 0$, $y(0) = c_0$ y $y(1) = c_1$?
- ¿Se puede utilizar RK4 para resolver un BVP?
- ¿Se podría utilizar FPI en el Método del Disparo?
- ¿Cómo se podría resolver un problema de cuarto orden? Donde se proveen condiciones de borde de la función y de sus derivadas?
- ¿Cómo queda el sistema de ecuaciones lineales de Diferencias Finitas cuando h se reduce?

Referencias

- Numerical Analysis, Timothy Sauer, Second Edition, Pearson, 2012. Chapter 5: Numerical Differentiation and Integration.
- Numerical Analysis, Timothy Sauer, Second Edition, Pearson, 2012. Chapter 7: Boundary Value Problems.