

Computació Numèrica

Tema 5.3 - Equacions diferencials

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

18 de maig de 2020

“Donat el caràcter i la finalitat exclusivament docent i eminentment il·lustrativa de les explicacions a classe d'aquesta presentació, l'autor s'acull a l'article 32 de la Llei de propietat intel·lectual vigent respecte de l'ús parcial d'obres alienes com ara imatges, gràfics o altre material contingudes en les diferents diapositives”



© 2019 by M. Àngela Grau Gotés.

Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional.

- 1 Introducció
 - Definicions i conceptes
 - Problema de valors inicials
- 2 Mètodes d'aproximació numèrica
 - Mètode d'Euler
 - Mètodes de Runge- Kutta
 - Estabilitat
 - Stiff
 - Control del pas
 - Mètodes multipas
 - Mètodes Predictor Corrector

Definicions i conceptes

Equació diferencial

- Una **equació diferencial** és una equació que conté les derivades o diferencials d'una o més variables dependents respecte a una o més variables independents.
- Si l'equació conté només derivades ordinàries (d'una o més variables dependents) respecte a una sola variable independent, llavors l'equació es diu **equació diferencial ordinària**.

Per exemple,

$$\triangleright \frac{dy}{dt} = \frac{t^2}{y^2 \cos y}, \quad \frac{dy}{dt} + \frac{du}{dt} = u + t^2 y, \quad t^2 y'' + t y' + (t^2 - n^2) y = 0$$

Equació diferencial parcial

- Si l'equació conté derivades parcials d'una o més variables dependents, llavors l'equació es diu **equació diferencial parcial**.

Per exemple,

▷ $u \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x}$

▷ $uu_x + u = u_{yy}$, recordant que $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$, $u_{yy} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$

▷ equació de Laplace, $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

▷ equació d'ones, $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

▷ equació de la calor, $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

Ordre

- L'ordre d'una equació diferencial, és igual a l'ordre de la derivada de més alt ordre que apareix en l'equació.

Per exemple,

- ▷ $\frac{dy}{dx} = \frac{x^2}{y^2 \cos y}$, equació de primer ordre
- ▷ $u_{xx} + u_{yy} = 0$, equació diferencial parcial de segon ordre
- ▷ $\left(\frac{dy}{dx}\right)^4 = y + x$, equació de primer ordre
- ▷ $y^3 + \frac{dy}{dx} = 1$, equació de primer ordre

Equació diferencial lineal

- Una equació diferencial ordinària (d'ordre n) és **lineal** si és de la forma

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x) \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \cdots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = f(x)$$

on les funcions $a_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, n$, i $f(x)$ són donades, i $a_n(x)$ no és la funció zero.

Per exemple,

- ▷ $\frac{dy}{dt} = t^3$ és lineal ($a_1(t) = 1$, $a_0(t) = 0$, $f(t) = t^3$)
- ▷ $\frac{d^2 u}{dt^2} + u = e^t$ és lineal
($a_2(t) = 1$, $a_1(t) = 0$, $a_0(t) = 1$, $f(t) = e^t$)

Solució d'una equació diferencial

Una solució de la equació diferencial d' n -èssim ordre

$$F(t, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0$$

a l'interval $a < t < b$ és una funció $\phi(t)$ que és contínua a $a < t < b$ i té totes les derivades presents en l'equació diferencial de tal manera que

$$F(t, \phi, \phi', \phi'', \dots, \phi^{(n)}) = 0$$

on $a < t < b$.

Exemple

$y(t) = e^{3t}$ és una solució de la edo $\frac{dy}{dt} = 3y$.

Derivant y tenim $y' = \frac{dy}{dt} = 3e^{3t}$, i substituint veiem que

$$3e^{3t} = 3e^{3t}.$$

$u(t) = \cos(4t)$ és una solució de la edo $\frac{d^2u}{dt^2} + 16u = 0$.

En aquest cas cal derivar dues vegades: $u' = -4\sin(4t)$ i $u'' = -16\cos(4t)$. Per tant,

$$\frac{d^2u}{dt^2} + 16u = -16\cos(4t) + 16\cos(4t) = 0.$$

Solucions analítiques

Solucions amb MATLAB®

Exemple $y'(t) = \frac{1}{2}y(t)$, $y(0) = 2$

```
syms y(t)
eqn = diff(y,t) == 1/2*y;
cond = y(0) == 2;
ySol(t) = dsolve(eqn,cond)
```

$$ySol(t) = 2e^{t/2}$$

La solució es pot representar a l'interval [0,3]

```
ezplot(ySol,[0,3])
```

Problema de valors inicials

PVI

Un problema de valor inicial consta d'una equació diferencial ordinària (EDO) d'ordre n i n condicions inicials imposades a la funció desconeguda i a les seves $n - 1$ primeres derivades en un valor de la variable independent.

$$y'(t) = \frac{1}{2}y(t), \quad y(0) = 2 \quad (1)$$

Exemple

Equació logística:

$$y' = 5y(1 - y)$$

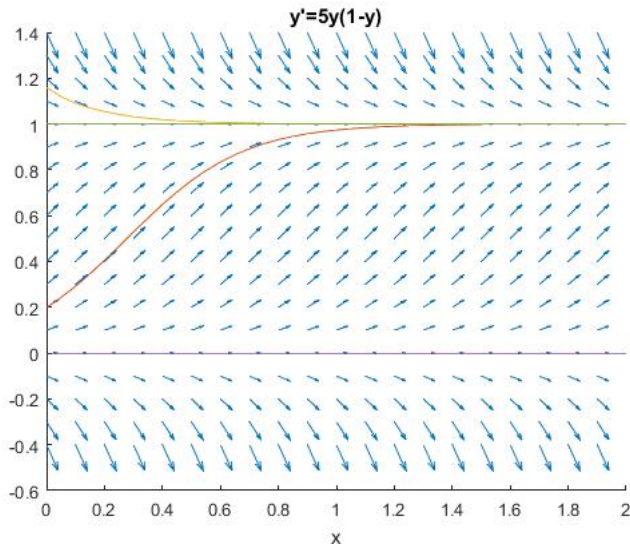
Problemes de valors inicials:

$$y(0) = 0.2, y(0) = 1.26.$$

Solucions estacionàries

$$y(0) = 0, y(0) = 1.$$

Example



Solucions aproximades i numèriques

Solucions amb MATLAB®

```
tspan = [0 10];  
y0 = 20;  
ode = @(t,y) y*(0.7-0.01*y);  
[t,y] = ode23(ode, tspan, y0);  
disp([t,y]')
```

| | | | | | | | |
|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|-----|
| 0 | 0.1600 | 0.9115 | 1.6123 | 2.2977 | 3.0777 | 4.0777 | ... |
| 20.0000 | 21.6376 | 30.1612 | 38.6999 | 46.6497 | 54.2703 | 61.2233 | ... |

Existència i unicitat

Teorema de Picard

Considereu el problema de valor inicial (PVI)

$$\begin{cases} dy/dt = f(t, y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}.$$

Si f i $\frac{\partial f}{\partial y}$ son funcions contínues a la regió rectangular R , $R = \{(t, y) \mid a < t < b, c < y < d\}$, que conté el punt (t_0, y_0) , existeix un interval $|t - t_0| < h$ centrat a t_0 en el qual existeix una i només una solució a l'equació diferencial que satisfà la condició inicial.

Resolució analítica

- Variables separables

Una equació diferencial que es pot escriure de la forma

$$g(y)y' = f(t) \text{ o } g(y)dy = f(t)dt$$

s'anomena **equació diferencial de variables separables**.

- Lineals de primer ordre

Les equacions lineals de primer ordre

$$a_1(t)\frac{dy}{dt} + a_0(t)y = f(t),$$

es poden resoldre analíticament. Primer caldrà però **reescriure** l'EDO en la **forma canònica**

$$\frac{dy}{dt} + p(t)y = q(t).$$

Aproximació numèrica

Introducció

La resolució *analítica* de les equacions diferencials no és possible més que en un nombre de casos molt limitat.

És indispensable disposar de tècniques de resolució aproximada.

Per entendre el funcionament dels principals mètodes de resolució de problemes de valor inicial, ens centrarem en equacions diferencials de primer ordre.

Problema i objectiu

PVI

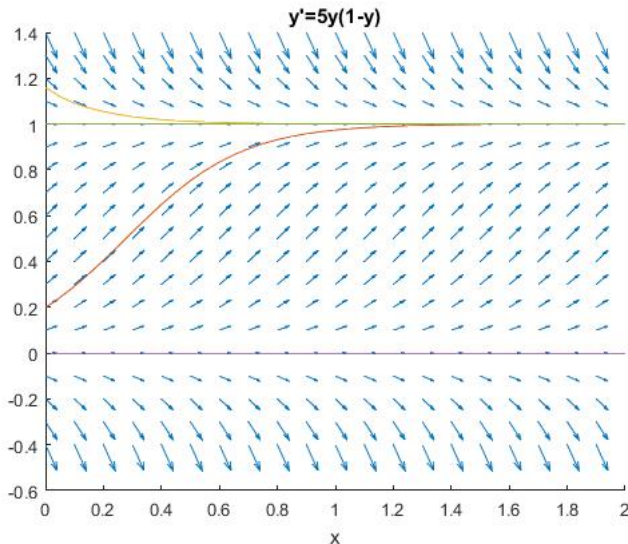
Per al problema de valor inicial,

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(a) = \alpha, \quad t \in [a, b],$$

l'objectiu és obtenir un valor aproximat de $y(b)$.

Sempre que es compleixin les hipòtesis del teorema de Picard

Camp de direccions



Camps de direccions

Les isoclines s'utilitzen sovint com un mètode gràfic per resoldre equacions diferencials ordinàries.

En una equació de la forma $y' = f(t, y)$, les isoclines o corbes de nivell són línies en el pla (t, y) obtingudes per $f(t, y) = k$.

Això dona lloc una sèrie de línies (per a diferents constants) al llarg de les quals les corbes de la solució tenen el mateix gradient. Al calcular aquest gradient per a cada isoclina, es pot visualitzar el camp de pendents; fent que sigui possible esbossar corbes de solució aproximades; com a la fig. anterior.

Problema i objectiu

PVI

Per al problema de valor inicial,

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(a) = \alpha, \quad t \in [a, b],$$

l'objectiu és obtenir un valor aproximat de $y(b)$.

Sempre que es compleixin les hipòtesis del teorema de Picard

Famílies de mètodes

Construïm una col·lecció d'aproximacions

$$y_n \approx y(t_n), \quad t_n = t_{n-1} + h_n$$

per $h_n > 0$ i $x_0 = a$. El mètode numèrica ens defineix com obtenir l'aproximació y_{n+1} end funció de les aproximacions anteriors.

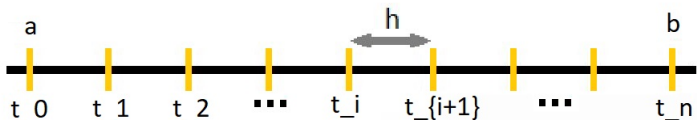
Bàsicament, hi ha tres grans famílies de mètodes:

- Mètodes derivats de la sèrie de Taylor.
- Mètodes lineals multipàs.
- Mètodes de Runge-Kutta.

Discretització

Generalment es divideix l'interval on busquem la solució en punts equiespaïats: donat n prenem

$$t_i = a + ih, \text{ per } i = 0, 1, 2, \dots, n, \text{ amb } h = t_i - t_{i-1} = \frac{b - a}{n}.$$



Els mètodes ens permetran trobar la solució aproximada en $Y_i \simeq y_i \equiv y(t_i)$ en aquests punts del domini, i en particular

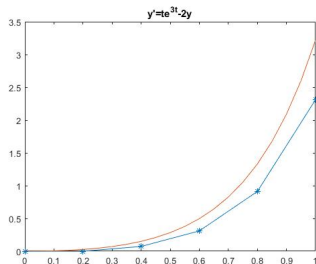
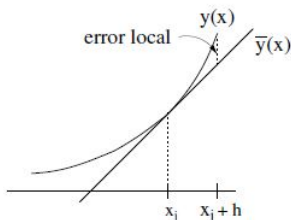
$$y(b) \simeq Y_n.$$

Segons la discretització, notem per

- 1 $\mathbf{y}_i \equiv \mathbf{y}(\mathbf{t}_i)$ la solució analítica exacte, $y(t)$, avaluada en els punts de $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \dots, n$.
- 2 $\mathbf{Y}_i \simeq \mathbf{y}(\mathbf{t}_i)$ el valor obtingut pel mètode numèric emprat en els punts de $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \dots, n$.

Errors de discretització

Error local - Error global



- **Error local:** a causa del mètode d'aproximació que fem, error de truncament.
- **Error global:** a causa dels errors locals anteriors acumulats, o que coneixem la condició inicial amb error ...

Aproximació numèrica

Els mètodes de resolució numèrica es classifiquen:

- 1 **Pas simple.** Calculen la solució y_{i+1} a l'instant t_{i+1} a partir del valor de la funció a y_i a l'instant t_i .

Mètode de Euler:

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i)$$

- 2 **Pas múltiple.** Calculen la solució y_{i+1} a l'instant t_{i+1} a partir del valor de la funció als instants $t_i, t_{i-1}, \dots, t_{i-n+1}$. *Mètode d'Adams-Bashforth de dos passos:*

$$y_{i+2} = y_{i+1} + \frac{h}{2} \left(3f(t_{i+1}, y_{i+1}) - f(t_i, y_i) \right)$$

Aproximació numèrica

Els mètodes de resolució numèrica es classifiquen:

- 1 **Mètodes explícits** . Els mètodes explícits calculen y_{i+1} directament. *Mètode d'Adams-Bashforth de dos passos:*

$$y_{i+2} = y_{i+1} + \frac{h}{2} \left(3f(t_{i+1}, y_{i+1}) - f(t_i, y_i) \right)$$

- 2 **Mètodes implícits** . Els mètodes implícits necessiten resoldre un sistema d'equacions no lineal per calcular la solució y_{i+1} .
Regla trapezoidal:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \left(f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}) \right)$$

Mètode d'Euler

Mètode d'Euler

El mètode d'Euler és un mètode d'un pas explícit

El problema

$$y'(t_i) = f(t_i, y(t_i)), \quad y(t_0) = \alpha,$$

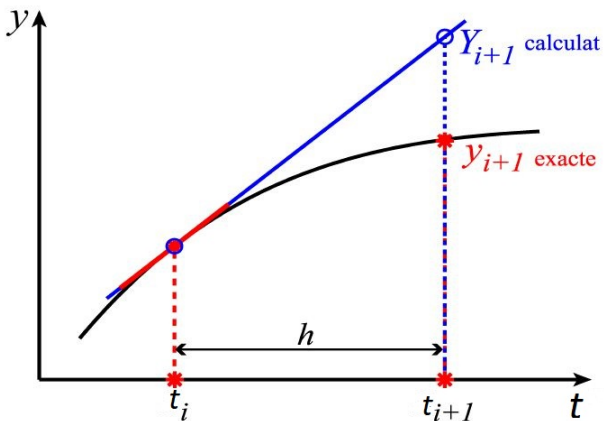
queda

$$Y_{i+1} = Y_i + hf(t_i, Y_i) \quad Y_0 = \alpha.$$

fent la substitució

$$y'(t_i) \longrightarrow \frac{Y_{i+1} - Y_i}{h}, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Representació gràfica del mètode d'Euler



Mètode d'Euler

Error local

La idea principal del mètode d'Euler és **aproximar la derivada en t_i** . Per fer-ho, escrivim **Taylor** centrat en t_i :

$$y(t) = y_i + y'_i(t - t_i) + O(t - t_i)^2$$

i substituïm en t_{i+1} :

$$y(t_{i+1}) = y_i + y'_i(t_{i+1} - t_i) + O(t_{i+1} - t_i)^2$$

$$y_{i+1} = y_i + y'_i \cdot h + O(h^2)$$

En aquest punt, aïllem y'_i :

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + O(h) \quad (2)$$

Mètode d'Euler

Error local

Així obtenim una **aproximació de la derivada** $\frac{y_{i+1}-y_i}{h}$ més un **error de truncament** $\tau(h) := O(h)$

Realitzant la substitució (2) en (1):

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} + O(h) = f(t_i, y_i)$$

És a dir, finalment obtenim

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(t_i, y_i) + h \cdot \tau(h),$$

on $h \cdot \tau(h)$ es defineix com l'**error local**.

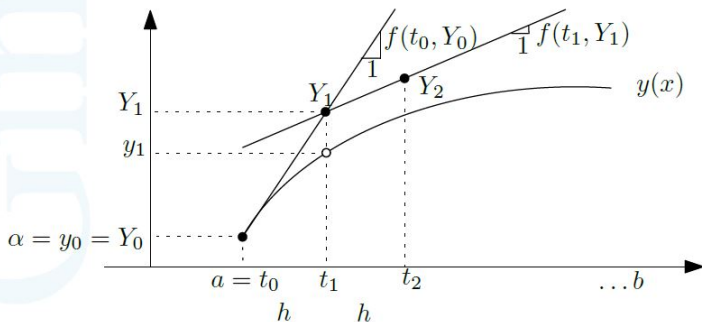
Mètode d'Euler

Error local

Si negligim els errors, obtenim el mètode numèric d'Euler.

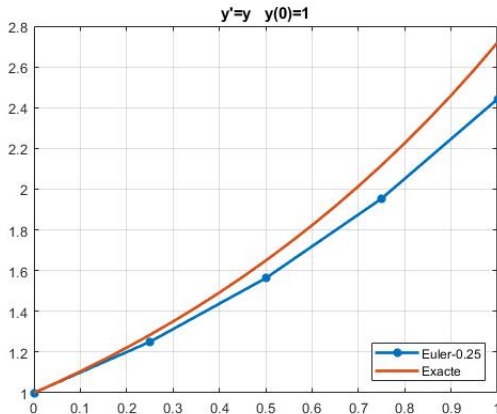
$$Y_{i+1} = Y_i + h \cdot f(t_i, Y_i),$$

que és l'equació verificada per la solució numèrica.



Méthode d'Euler

Error global



Error global $\mathcal{O}(h) = \text{Nombre de pasos } \mathcal{O}(\frac{1}{h}) \times \text{Error Local } \mathcal{O}(h^2)$

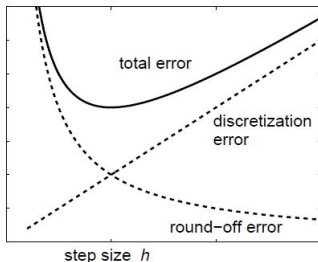
Mètode d'Euler

Ordre mètode $\mathcal{O}(h)$

- Error local = $\mathcal{O}(h^2)$.
- Error de discretització = $\mathcal{O}(h)$.
- Error global = $\mathcal{O}(h)$
- Error d'arrodoniment, degut a la precisió de l'aritmètica de l'ordinador.

Moral:

Decreasing the step size of the difference equation does not always result in the increased accuracy of the obtained solution.



Mètode d'Euler

Algorisme

Donat N prenem $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \dots, n$, amb $h = (b - a)/n$, el mètode d'Euler construeix

$$\omega_i \approx y(t_i)$$

tal que

$$\begin{aligned}\omega_0 &= \alpha \\ \omega_{i+1} &= \omega_i + hf(t_i, \omega_i)\end{aligned}\tag{2}$$

Error local $\mathcal{O}(h^2)$

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2}y''(\xi_i)$$

Variants del Mètode d'Euler

Mètode d'Euler Modificat

Mètode del punt mig explícit

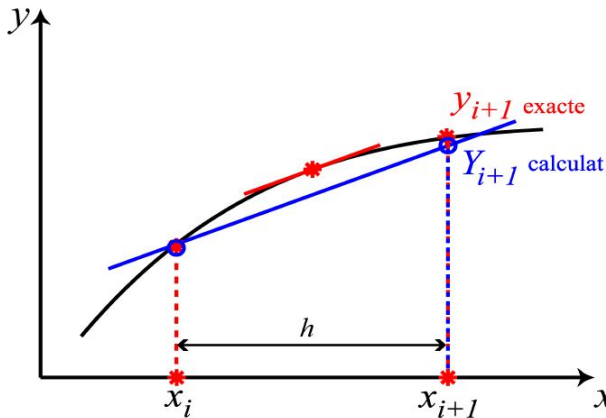
Donat N prenem $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \dots, N$, amb $h = (b - a)/N$, per $\omega_0 = \alpha$ el mètode és:

$$\begin{aligned}k_1 &= \omega_i + \frac{h}{2} f(t_i, \omega_i) \\ \omega_{i+1} &= \omega_i + h f\left(t_i + \frac{h}{2}, k_1\right)\end{aligned}\tag{3}$$

Tal que $\omega_i \approx y(t_i)$, i per tant, $\omega_N \approx y(b)$.

Aquest mètode és un mètode de Runge-Kutta de segon orde. L'error local és $\mathcal{O}(h^3)$ i l'error global queda $\mathcal{O}(h^2)$

Representació gràfica del mètode d'Euler modificat



La idea és modificar el mètode d'Euler emprant com a pendent la derivada en el punt mig del subinterval.

Mètode d'Euler millorat

Mètode de Heun de segon ordre

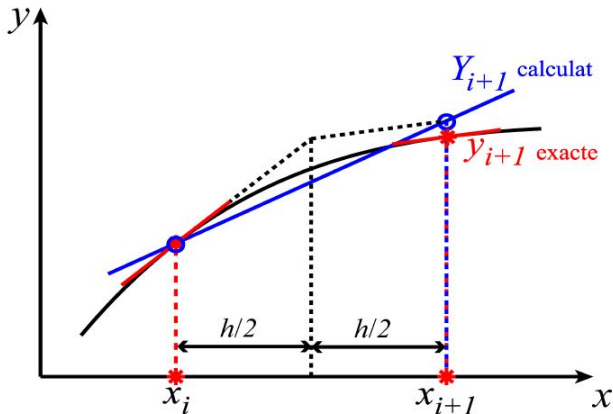
Donat N prenem $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \dots, N$, amb $h = t_i - t_{i-1} = (b - a)/N$, per $\omega_0 = \alpha$ el mètode és:

$$\begin{aligned}k_1 &= h f(t_i, \omega_i) \\k_2 &= h f(t_{i+1}, \omega_i + k_1) \\ \omega_{i+1} &= \omega_i + \frac{1}{2} (k_1 + k_2)\end{aligned}\tag{4}$$

Tal que $\omega_i \approx y(t_i)$, i per tant, $\omega_N \approx y(b)$

Aquest mètode és conegut per mètode de Heun de segon orde.
L'error local és $\mathcal{O}(h^3)$ i l'error global queda $\mathcal{O}(h^2)$

Representació gràfica del mètode de Heun



La idea és modificar el mètode d'Euler emprant com a pendent la mitjana de la derivada en el punt inicial i la derivada en el punt final.

Mètodes de Taylor

Mètodes de Taylor

- Basado en el desarrollo en serie Formulado en 1715 por Brook Taylor¹, Reino Unido, 1685-1731.
- Si se desarrolla en serie de Taylor $y(t)$ en el punto t_i , suponiendo que $y(t)$ tiene derivadas continuas hasta orden $n + 1$, se tiene que

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!}y''(t_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(t_i) + \cdots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(t_i) + \mathcal{O}(h^{n+1}).$$

- Si f es derivable,

$$\begin{aligned}y' &= f(t, y) \\y'' &= f' = f_t + f_y \cdot y' = f_t + f_y \cdot f \\y''' &= f'' = f_{tt} + 2f_{ty} \cdot f + f_{yy} \cdot f^2 + f_t \cdot f_y + f_y^2 \cdot f \\&\vdots\end{aligned}$$

¹El original parece se debe al escocés James Gregory, 1638-1675.

Mètodes de Taylor

- Sustituyendo estas expresiones en el desarrollo en serie se obtiene el **método de Taylor del orden de precisión que se desee**.
- Su gran inconveniente es que las derivadas de orden superior a uno –**en este caso sería el método de Euler**– pueden ser muy complicadas de calcular.

Mètodes de Runge- Kutta

Mètodes de Runge- Kutta

- Son una familia de métodos desarrollados a partir del trabajo de los alemanes Carl David Tolmé Runge, 1856-1927, y Martin Wilhelm Kutta 1867-1944.
- Consiguen la precisión del método de Taylor sin necesidad de calcular derivadas de orden elevado.
- El avance se realiza mediante una expresión general

$$y_{i+1} = y_i + h\phi, \quad \text{con } \phi = a_1k_1 + a_2k_2 + \cdots + a_nk_n,$$

y donde los coeficientes a_i son unos pesos de aproximaciones k_i de las distintas derivadas por medio de la función $f(t, y)$ evaluada en distintos puntos.

Mètodes de Runge- Kutta

- Los valores de las k_i se obtienen mediante las fórmulas

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$$

$$k_3 = f(t_i + p_2 h, y_i + q_{21} k_1 h + q_{22} k_2 h)$$

$$\vdots$$

$$k_n = f(t_i + p_n h, y_i + q_{n-1,1} k_1 h + q_{n-1,2} k_2 h + \cdots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} h).$$

- Cada valor de k_i depende de los k s ya calculados, por lo que la evaluación de estas fórmulas es sencilla si se conocen los coeficientes.
- Los p s y q s son coeficientes numéricos que se calculan imponiendo la condición de que el error sea del mismo orden que en el método de Taylor de orden similar.

Deducción de las fórmulas de Runge-Kutta de orden 2

- Son $y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h$, donde $k_1 = f(t_i, y_i) \equiv f_i$
 $k_2 = f(t_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h)$.

- El método de Taylor, reteniendo términos hasta orden dos, establece que

$$y_{i+1} = y_i + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2!}y''(t_i) = y_i + hf_i + \frac{h^2}{2}(f_{ti} + f_{yi} \cdot f_i).$$

- Desarrollando en serie las fórmulas de Runge-Kutta se tiene que

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h = y_i + (a_1f(t_i, y_i) + a_2f(t_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h))h \\ &= y_i + a_1f_ih + a_2(f_i + f_{ti}p_1h + f_{yi}f_iq_{11}k_1h)h.\end{aligned}$$

- Comparando las dos expresiones se llega a estas tres ecuaciones con cuatro incógnitas:

$$a_1 + a_2 = 1, \quad a_2p_1 = \frac{1}{2} \quad \text{y} \quad a_2q_{11} = \frac{1}{2}.$$

- Dando valores a a_2 se obtienen distintas fórmulas de Runge-Kutta de orden 2 (con error local de truncamiento $\mathcal{O}(h^3)$).

1.- $a_2 = \frac{1}{2} \longrightarrow p_1 = q_{11} = 1$: **Método de Heun**

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_1 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f(t_i + h, y_i + k_1 h).\end{aligned}$$

2.- $a_2 = 1 \longrightarrow p_1 = q_{11} = 1/2$: **Método del Punto Medio**

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_1 + k_2 h \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f(t_i + h/2, y_i + k_1 h/2).\end{aligned}$$

3.- $a_2 = 2/3 \longrightarrow p_1 = q_{11} = 3/4$: **Método de Ralston**

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_1 + \frac{h}{2} \left(\frac{1}{3}k_1 + \frac{2}{3}k_2 \right) \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f(t_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}k_1 h).\end{aligned}$$

RK2

Mètode de Heun de segon ordre

Lo normal es presentar el mètode con las expresiones siguientes:

$$k_1 = h f(x_n, y_n) \quad ; \quad k_2 = h f(x_{n+1}, y_n + k_1)$$

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

Comparando este mètode con el mètode de Taylor de segundo orden, es posible demostrar que el error local es también proporcional a h^3 y, por tanto, el global lo es a h^2 .

Podemos entonces resumir el Método de Runge-Kutta de tercer orden en la forma:

$$\begin{aligned}k_1 &= h f(x_n, y_n) \\k_2 &= h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2} k_1\right) \\k_3 &= h f(x_n + h, y_n - k_1 + 2k_2) \\y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3)\end{aligned}$$

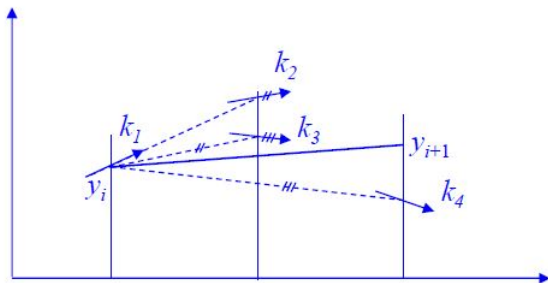
Finalmente, añadir que el error local en el Método de tercer orden es proporcional a h^4 y en consecuencia el global lo es a h^3 .

$$\begin{aligned}
 k_1 &= h f(x_n, y_n) \\
 k_2 &= h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\
 k_3 &= h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\
 k_4 &= h f(x_n + h, y_n + k_3) \\
 y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
 \end{aligned}$$

que al igual que el método de tercer orden está basado en el método de interacción de Simpson. Los errores local y global son en este caso proporcionales a h^5 y h^4 respectivamente.

RK4

- La interpretación geométrica de la fórmula de orden 4 es la esta.



- Cada una de las k s representa una pendiente. El resultado es una media ponderada de esas pendientes.

Comparació de mètodes

| Mètode | Orden del error | Evaluaciones funcionales |
|------------------|-----------------|--------------------------|
| Euler | h | 1 |
| Heun | h^2 | 2 |
| Euler modificado | h^2 | 2 |
| Runge-Kutta | h^4 | 4 |

Estabilitat

Definició 7.14. Diem que un PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

és *estable* si per algun radi $\delta > 0$, si $|\bar{y}_0 - y_0| < \delta$ (per una pertorbació prou petita de la condició inicial) la solució del PVI inexacte

$$\begin{cases} \bar{y}' = f(x, \bar{y}) \\ \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

compleix que l'error $|y(x) - \bar{y}(x)|$ és decreixent en x_0 .
Diem que el PVI és *inestable* si no és estable.

Exemple: Creixement exponencial

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta és $y(x) = e^x$.

Si el valor inicial que tenim és $\bar{y}(0) = 1 + \epsilon$, encara que resolguem exactament el PVI

$$\begin{cases} \bar{y}' = \bar{y} \\ \bar{y}(0) = 1 + \epsilon \end{cases}$$

tenim $\bar{y}(x) = (1 + \epsilon)e^x$ i un error $|y(x) - \bar{y}(x)| = \epsilon \cdot e^x$ que creix exponencialment.

Exemple: Error constant

$$\begin{cases} y' = e^x \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta és $y(x) = e^x$.

Si resollem el problema amb condició inicial amb error

$$\begin{cases} \bar{y}' = e^x \\ \bar{y}(0) = 1 + \epsilon \end{cases}$$

La solució és $\bar{y}(x) = e^x + \epsilon$, i l'error no creix: $|\bar{y}(x) - y(x)| = \epsilon$.

Exemple: Decreixement exponencial

$$\begin{cases} y' = -y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta és $y(x) = e^{-x}$.

Si tenim el PVI amb error

$$\begin{cases} \bar{y}' = -\bar{y} \\ \bar{y}(0) = 1 + \epsilon \end{cases}$$

la solució és $\bar{y}(x) = (1+\epsilon)e^{-x}$, i l'error és: $|y(x) - \bar{y}(x)| = \epsilon \cdot e^{-x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$
(l'error decreix exponencialment!).

Exemple

Equació logística:

$$y' = 5y(1 - y)$$

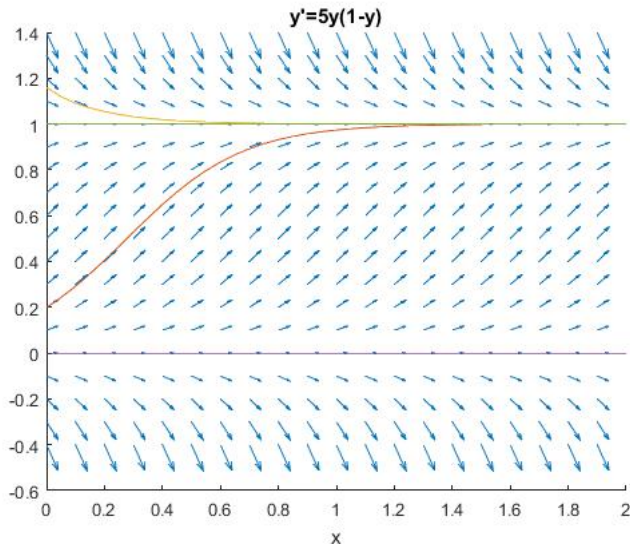
Problemes de valors inicials:

$$y(0) = 0.2, y(0) = 1.26.$$

Solucions estacionàries

$$y(0) = 0, y(0) = 1.$$

Example



Stiff

"Stiff"

- En los métodos **explícitos** una fórmula determina explícitamente una nueva aproximación y_{i+1} a partir de datos de h , t_i y y_i .
- Hay un tipo de problemas, denominados **stiff** –rígidos–, para los que los métodos explícitos evolucionan mal hacia la solución.
- Son aquellos que convergen relativamente rápido hacia una solución estable pero que tienen componentes transitorios importantes con un decaimiento o amortiguación mucho más rápido.
- Suelen modelizar procesos físicos con varios componentes con escalas de tiempo dispares. El intervalo de tiempo con el que se les estudia puede ser bueno para uno de ellos pero no para todos.

"Stiff"

Estudiemos por ejemplo la ecuación diferencial

$$y' = -\alpha (y - t^2) + 2t, \quad t > 0, \quad y_0 = y(0),$$

cuya solución analítica es

$$y(t) = y_0 e^{-\alpha t} + t^2.$$

Si α es un número real grande, la solución varía rápidamente hasta que el componente exponencial se desvanece o amortigua.

A partir de entonces prevalece el componente polinómico de variación lenta.

Control del pas

Control pas

Quan tenim un PVI (una edo o un sistema)

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

i el resollem aproximadament per un mètode iteratiu (Euler, RK4...):

- Mentre els successius PVI amb $y(x_0) = y_0, y(x_1) = y_1, \dots$ surtin estables, tenim l'error sota control fent el pas h petit.
- Si ens trobem en algun punt de la solució amb un $y(x_j) = y_j$ inestable, l'error $|\bar{y}(x) - y(x)|$ passa a créixer, normalment de manera exponencial en $x - x_j$. Cal fer el pas h *molt petit*.

Control pas

La manera de gestionar el pas h i tenir alguna esperança que $\bar{y}(x)$ approximi la solució correcta $y(x)$ és usar alguna estratègia de control de pas.

Mètode típic: el RK14 amb control de pas

Idea Per cada pas h , calcularem $\bar{y}(x_0 + h)$ a partir de $\bar{y}(x_0)$ usant el mètode d'Euler (RK1) i un RK4. Compararem els dos resultats, i si la diferència entre ells és més gran del que considerem admissible, repetirem el càlcul amb pas h més petit.

Métodos Runge-Kutta de paso variable

- Hasta ahora hemos supuesto que h era fijo. En un intervalo de integración $[0, T]$, sin embargo, puede haber subintervalos de mayor o menor variación de la función $y(t)$ que conviene tratar con más detalle, con pasos mayores o más pequeños, según que la dificultad (o el error) sea menor o mayor.
- Para cambiar el paso, con un coste razonable de tiempo de cálculo, es necesario estimar la magnitud del error local de truncamiento, lo cual puede hacerse con dos fórmulas de distinto orden o utilizando dos pasos diferentes: h y $h/2$, habitualmente.
- Los métodos de Runge-Kutta de paso variable, también denominados **embebidos**, o **encajados**, resuelven el problema dos veces usando los pasos h y $h/2$, y comparan los resultados

Método Runge-Kutta-Fehlberg

- Su nombre viene de Runge, Kutta y Erwin Fehlberg, Alemania, 1911, EE.UU. 1990.
- Usa fórmulas Runge-Kutta de orden 4 y 5 respectivamente, concretamente,

$$k_1 = hf(t_i, y_i)$$

$$k_2 = hf\left(t_i + \frac{1}{4}h, y_i + \frac{1}{4}k_1\right)$$

$$k_3 = hf\left(t_i + \frac{3}{8}h, y_i + \frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right)$$

$$k_4 = hf\left(t_i + \frac{12}{32}h, y_i + \frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right)$$

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

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

$$y_{i+1} = y_i + \left(\frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4104}k_4 - \frac{1}{5}k_5\right)$$

$$z_{i+1} = y_i + \left(\frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6\right).$$

- La estimación del error que se comete en el paso es

$$e_{i+1} = |z_{i+1} - y_{i+1}| = h \left| \frac{1}{360}k_1 - \frac{128}{4275}k_3 - \frac{2197}{75240}k_4 + \frac{1}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6 \right|.$$

- Para una tolerancia del error, Tol y un paso inicial h , se calculan para empezar y_1 , z_1 y e_1 . Si se cumple que

$$\frac{e_i}{|y_i|} < Tol,$$

en este caso para $i = 1$, el valor de z_1 sustituye a y_1 y se procede al siguiente paso. Si no se cumple esa relación, se ensaya con

$$h = 0,8 \left(\frac{Tol|y_i|}{e_i} \right)^{\frac{1}{5}} h_i$$

y se vuelven a calcular los parámetros del paso.

- La rutina de **Matlab ode45** usa una variante de este método de 1980, denominada de **Dormand-Prince** por sus autores, cuyas fórmulas son

$$k_1 = hf(t_i, y_i)$$

$$k_2 = hf\left(t_i + \frac{1}{5}h, y_i + \frac{1}{5}k_1\right)$$

$$k_3 = hf\left(t_i + \frac{3}{10}h, y_i + \frac{3}{40}k_1 + \frac{9}{40}k_2\right)$$

$$k_4 = hf\left(t_i + \frac{4}{5}h, y_i + \frac{44}{45}k_1 - \frac{56}{15}k_2 + \frac{32}{9}k_3\right)$$

$$k_5 = hf\left(t_i + \frac{8}{9}h, y_i + \frac{19372}{6561}k_1 - \frac{25360}{2187}k_2 + \frac{64448}{6561}k_3 - \frac{212}{729}k_4\right)$$

$$k_6 = hf\left(t_i + h, y_i + \frac{9017}{3168}k_1 - \frac{355}{33}k_2 + \frac{46732}{5247}k_3 + \frac{49}{176}k_4 - \frac{5103}{18656}k_5\right)$$

$$z_{i+1} = y_i + \left(\frac{35}{384}k_1 + \frac{500}{1113}k_3 + \frac{125}{192}k_4 - \frac{2187}{6784}k_5 + \frac{11}{84}k_6\right)$$

$$k_7 = hf(t_i + h, z_{i+1})$$

$$y_{i+1} = y_i + \left(\frac{5179}{57600}k_1 + \frac{7571}{16695}k_3 + \frac{393}{640}k_4 - \frac{92097}{339200}k_5 + \frac{187}{2100}k_6 + \frac{1}{4}k_7\right).$$

- La estimación del error que se comete en el paso es

$$e_{i+1} = |z_{i+1} - y_{i+1}| = h \left| \frac{71}{57600}k_1 - \frac{71}{16695}k_3 + \frac{71}{1920}k_4 - \frac{17253}{339200}k_5 + \frac{22}{525}k_6 - \frac{1}{40}k_7 \right|.$$

No es necesario calcular y_{i+1} , sólo e_{i+1} .

- Si se cumplen las tolerancias, z_{i+1} será el nuevo punto y k_1 será k_7 , por lo que no se desperdician cálculos.

Mètodes múltiples

Mètodes múltiples

$$y_{i+1} = \sum_{j=1}^m \alpha_j y_{i+1-j} + h \sum_{j=0}^m \beta_j f(t_{i+1-j}, y_{i+1-j}).$$

Si $\beta_0 = 0$, el método es explícito; si $\beta_0 \neq 0$, implícito. Los parámetros α_i y β_i se calculan mediante interpolación polinómica.

Un método de dos pasos explícito, o abierto, por ejemplo, sería

$$y_{i+1} = \alpha_1 y_i + h (\beta_1 y'_i + \beta_2 y'_{i-1}) \quad (\text{se indica } y' = f(\cdot, \cdot)).$$

Para calcular α_1 , β_1 y β_2 se interpola forzando a que la fórmula sea exacta para los primeros tres monomios: 1 , t y t^2 .

Si $y(t) = 1$, entonces $y'(t) = 0$ y se consigue así la primera ecuación

$$1 = \alpha_1 \cdot 1 + h (\beta_1 \cdot 0 + \beta_2 \cdot 0).$$

Mètodes múltiples

Si $y(t) = t$, entonces $y'(t) = 1$ y tenemos la segunda

$$t_{i+1} = \alpha_1 t_i + h(\beta_1 \cdot 1 + \beta_2 \cdot 1).$$

Si $y(t) = t^2$, entonces $y'(t) = 2t$ y tenemos la tercera

$$t_{i+1}^2 = \alpha_1 t_i^2 + h(\beta_1 \cdot 2t_i + \beta_2 \cdot 2t_{i-1}).$$

Estas tres ecuaciones se deben cumplir para cualesquiera valores de t_i , por lo que podemos hacer $t_{i-1} = 0$, $h = 1$ (entonces $t_i = 1$ y $t_{i+1} = 2$) y resolvemos el sistema lineal resultante 3×3 dando $\alpha_1 = 1$, $\beta_1 = \frac{3}{2}$, $\beta_2 = -\frac{1}{2}$.

Mètodes múltiples

La fórmula resultante del método explícito de dos pasos es

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(3y'_i - y'_{i-1}),$$

que se conoce como la fórmula del **Método Adams-Bashforth** de segundo order. Debe el nombre a John Couch Adams, Reino Unido, 1819-1892, Francis Bashforth, Reino Unido, 1819-1912 y Forest Ray Moulton, EE.UU., 1872-1952.

También así se desarrolla la **fórmula implícita, o cerrada, de dos pasos**:

$$y_{i+1} = \alpha_1 y_i + h(\beta_0 y'_{i+1} + \beta_1 y'_i).$$

Para calcular α_1 , β_0 y β_1 forzaremos como antes a que la fórmula resultante se exacta para los primeros tres monomios: 1 , t y t^2 . Se obtienen estas tres ecuaciones

$$\begin{aligned}1 &= \alpha_1 \cdot 1 + h(\beta_0 \cdot 0 + \beta_1 \cdot 0) \\ t_{i+1} &= \alpha_1 t_i + h(\beta_0 \cdot 1 + \beta_1 \cdot 1) \\ t_{i+1}^2 &= \alpha_1 t_i^2 + h(\beta_0 \cdot 2t_{i+1} + \beta_1 \cdot 2t_i).\end{aligned}$$

Mètodes multipas

Haciendo $t_i = 0$ y $h = 1$ (por lo que $t_{i+1} = 1$), y resolviendo el sistema 3×3 resultante se llega a que $\alpha_1 = 1$, $\beta_0 = \frac{1}{2}$ y $\beta_1 = \frac{1}{2}$. La fórmula resultante es

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(y'_{i+1} + y'_i),$$

que da lugar al método implícito conocido como el **método del trapecioide**, o **Método de Adams-Moulton** de un paso.

Fórmulas de multipaso explícitas de Adams-Bashforth

| n | | Error |
|-----|---|-----------------------------------|
| 2 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1})$ | $\frac{5}{12}h^3 f''(\xi)$ |
| 3 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}(23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2})$ | $\frac{3}{8}h^4 f'''(\xi)$ |
| 4 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})$ | $\frac{251}{720}h^5 f^{(4)}(\xi)$ |
| 5 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720}(1901f_i - 2744f_{i-1} + 2616f_{i-2} - 1274f_{i-3} + 251f_{i-4})$ | $\frac{95}{288}h^6 f^{(5)}(\xi)$ |

Fórmulas de multipaso implícitas de Adams-Moulton

| n | | Error |
|-----|--|------------------------------------|
| 2 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(3f_{i+1} - f_i)$ | $-\frac{1}{12}h^3 f''(\xi)$ |
| 3 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}(5f_{i+1} + 8f_i - f_{i-1})$ | $-\frac{1}{24}h^4 f'''(\xi)$ |
| 4 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2})$ | $-\frac{19}{720}h^5 f^{(4)}(\xi)$ |
| 5 | $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720}(251f_{i+1} + 646f_i - 264f_{i-1} + 106f_{i-2} - 19f_{i-3})$ | $-\frac{27}{1440}h^6 f^{(5)}(\xi)$ |

Adams-Bashforth d'ordre 4

Les equations del mètode són:

$$\omega_0 = \alpha, \quad \omega_1 = \alpha_1, \quad \omega_2 = \alpha_2, \quad \omega_3 = \alpha_3,$$

$$\omega_{i+1} = \omega_i + \frac{h}{24} (55f(t_i, w_i) - 59f(t_{i-1}, w_{i-1}) + 37f(t_{i-2}, w_{i-2}) - 9f(t_{i-3}, w_{i-3}))$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, N$$

És un mètode explícit.

Adams-Moulton d'ordre 4

Les equacions del mètode són:

$$\omega_0 = \alpha, \quad \omega_1 = \alpha_1, \quad \omega_2 = \alpha_2, \quad \omega_3 = \alpha_3,$$

$$\omega_{i+1} = \omega_i + \frac{h}{24} (9f(t_{i+1}, w_{i+1}) + 19f(t_i, w_i) - 5f(t_{i-1}, w_{i-1}) + f(t_{i-2}, w_{i-2}))$$
$$i = 0, 1, 2, \dots, N$$

És un mètode implícit.

Mètodes Predictor - Corrector

Combinan métodos explícitos e implícitos en cada intervalo mediante un paso **predictor**, que estima la solución en el nuevo punto, y otro **corrector**, que la mejora.

Vencen así la dificultad de contar con un buen punto de partida para comenzar el proceso de integración.

El **método de Adams-Bashforth-Moulton** de cuarto orden, por ejemplo:

- Utiliza Adams-Bashforth de cuarto orden como **predictor**:

$$y_{i+1}^* = y_i + \frac{h}{24}(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}).$$

- Evalúa la función en el nuevo punto (t_{i+1}, y_{i+1}^*)

$$f_{i+1}^* = f(t_{i+1}, y_{i+1}^*).$$

- Utiliza Adams-Moulton de cuarto orden como **corrector**:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(9f_{i+1}^* + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}).$$

- Finalmente evalúa de nuevo la función en el punto (t_{i+1}, y_{i+1})

$$f_{i+1} = f(t_{i+1}, y_{i+1}).$$

Se conoce como método **PECE** (**predice, evalúa, corrige, evalúa**).

El método de Milne-Simpson:

- Utiliza como predictor

$$y_{i+1}^* = y_{i-3} + \frac{4h}{3}(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}).$$

- Como corrector

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3}(f_{i+1}^* + 4f_i + f_{i-1}).$$

También se usa como corrector el de Hamming:

$$y_{i+1} = \frac{9y_i - y_{i-2} + 3h(f_{i+1}^* + 2f_i - 2f_{i-1})}{8}.$$