

Métodos Numéricos

Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Problemas de valor inicial y métodos de un paso

Diego Passarella

Universidad Nacional de Quilmes

Motivación

A través de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias se puede describir la evolución de diversos fenómenos en una gran variedad de campos de aplicación.

En general, el modelado de un fenómeno físico involucra la descripción de la variación de una magnitud con respecto a otras variables. Estos modelos de evolución pueden representarse a través de ecuaciones diferenciales, donde la solución particular nos dará la funcionalidad de nuestra magnitud con el resto de las variables.

Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Si $y(x)$ es una función de que depende de una única variable x , una ecuación diferencial ordinaria (EDO) es una relación del tipo:

$$f(y', y, x) = 0$$

En este caso, la EDO es de primer orden porque el orden máximo de la derivada es uno.

Las EDO's se pueden clasificar en dos tipos:

- Problemas de Valor Inicial (PVI): La variable x suele representar el tiempo y para definir el problema representado por la EDO es necesario brindar Condiciones Iniciales (CI's).
- Problemas de Frontera (PF): La variable x suele representar una coordenada espacial y el problema no evoluciona en el tiempo. Para definir al problema es necesario brindar Condiciones de Contorno (CC's).

Problemas de Valor Inicial

Los PVI's se definen a través de la EDO y la condición inicial que permite determinar a la solución particular.

$$\frac{dy}{dx} = f(y, x), \quad x \in (0, x_{fin}), \quad y(0) = y_0$$

En este caso se presenta un PVI de primer orden.

Los métodos más simples para resolver este tipo de EDO's son:

- Euler Progresivo
- Euler Regresivo
- θ -método

Discretización

Se va a buscar la solución numérica en un conjunto discreto de puntos del dominio $x_i, i = 0, 1, \dots, n$.

$$y_i \approx y(x_i)$$

donde $y(x_i)$ es la solución exacta en x_i y y_i es la aproximación proporcionada por el método numérico.

Euler Progresivo

Se basa en aproximar a la derivada primera por:

$$\frac{dy(x_i)}{dx} \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

de ahora en adelante vamos a tomar $x_{i+1} - x_i = h$. Por lo tanto, este método queda como:

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

Este es un método explícito ya que se tiene una fórmula recursiva:

$$y_{i+1} = y_i + hf(y_i, x_i) \quad \text{para: } i = 0, \dots, n-1$$

Dependiendo del tipo de $f(y, x)$ y de h , este método puede resultar condicionalmente estable.

Euler Regresivo

Se basa en aproximar a la derivada primera por:

$$\frac{dy(x_{i+1})}{dx} \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

En este caso, el método queda como:

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

Este es un método implícito. Si $f(y_{i+1}, x_{i+1})$ es una función no lineal de y_{i+1} habrá que usar un método iterativo para obtener y_{i+1} en cada paso de tiempo.

$$y_{i+1} - hf(y_{i+1}, x_{i+1}) = y_i \quad \text{para: } i = 0, \dots, n-1$$

La ventaja de este método es que es incondicionalmente estable.

θ -Método

Es una combinación convexa de ambos métodos anteriores.

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \theta f(y_i, x_i) + (1 - \theta)f(y_{i+1}, x_{i+1})$$

El parámetro $\theta \in (0, 1)$.

Para $\theta = 0$ se tiene el método de Euler regresivo y para $\theta = 1$ el método progresivo.

Si $\theta \neq 1$ el método es implícito.

Para $\theta = 1/2$ se lo llama método del trapecio.

EDO's de orden superior

Una EDO de orden s tiene la forma:

$$\frac{d^s y(x)}{dx^s} = f(y^{(s-1)}(x), y^{(s-2)}(x), \dots, y'(x), y(x), x)$$

con condiciones iniciales:

$$y(0)^{(s-1)} = y0_{s-1}, y(0)^{(s-2)} = y0_{s-2}, \dots, y(0)' = y0_1, y(0) = y0_0$$

Esta EDO de orden s puede transformarse en un sistema de s EDO's de orden 1 por medio del siguiente cambio de variable:

$$\omega_1 = \frac{dy}{dt}, \quad \omega_2 = \frac{d\omega_1}{dt}, \dots, \quad \omega_{s-2} = \frac{d\omega_{s-3}}{dt}, \quad \omega_{s-1} = \frac{d\omega_{s-2}}{dt}$$

quedando...

EDO's de orden superior

$$\begin{cases} \omega'_{s-1} = f(\omega_{s-1}, \omega_{s-2}, \dots, \omega_1, y, x) \\ \omega'_{s-2} = \omega_{s-1} \\ \dots \\ \omega'_1 = \omega_2 \\ y' = \omega_1 \end{cases}$$

y con las correspondientes CI's,

$$\omega_{(s-1)}(0) = y0_{s-1}, \omega_{(s-2)}(0) = y0_{s-2}, \dots, \omega_1(0) = y0_1, y(0) = y0_0$$

Generando un sistema de s EDO's que puede resolverse (por ejemplo) con un método explícito.

Convergencia

Para que un método numérico sea convergente, éste debe ser **estable** y **consistente**.

Para que un método numérico converja debe cumplirse que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left(\max_{0 \leq i \leq n} \|y(x_i) - y_i\| \right) = 0$$

Y el método será convergente con orden p si

$$\max_{0 \leq i \leq n} \|y(x_i) - y_i\| = O(h^p), \quad p \geq 1$$

Siendo que una función genérica $\phi(h)$ es una “ O ” de h^p si cumple que

$$\|\phi(h)\| \leq C.h^p, \quad C \geq 0$$

Convergencia - Orden

De la definición de orden de convergencia y empleando la hipótesis de colocación (mencionar), se puede demostrar que los métodos de Euler y θ -método ($\theta \neq 1/2$) poseen orden de convergencia 1.

Para $\theta = 1/2$, el θ -método posee orden de convergencia 2.

Conceptos generales del modelado

Modelos Matemáticos:

- Formulación matemática de relaciones entre variables que representan un parámetro físico (Velocidad, Energía, Concentración, Esfuerzos, etc...)
- Se basan en hipótesis y simplificaciones
- Un mismo fenómeno físico se puede representar a través de distintos modelos.
- Dependiendo del modelo, se pueden obtener distintos grados de exactitud en el resultado.
- Compromiso entre exactitud y resolubilidad.

Conceptos generales del modelado

Para resolver un modelo matemático es necesario:

- Conocer leyes físicas generales para plantear el modelo (leyes de conservación)
- Entender cabalmente la física del problema
- Considerar hipótesis simplificadoras
- Aplicar métodos numéricos para resolver el problema planteado (asegurar convergencia y acotar el error)

Ej. 1: Biorreactor continuo perfectamente agitado

Consideraciones iniciales:

- Se considera un biorreactor dentro del cual ocurre una reacción química dada. La evolución de la reacción se monitorea a través de la concentración de uno de los componentes $C(t)$.
- El biorreactor posee un flujo de entrada F_{in} y uno de salida F_{out}
- La reacción es de consumición y el biorreactor es alimentado con una concentración C_{in}

Ej. 1: Biorreactor continuo perfectamente agitado

Hipótesis simplificadoras:

- La concentración en todo el volumen del biorreactor es constante
- La reacción química depende de cantidad de componente dado: $k.V.C(t)$
- La constante de reacción k es constante
- El flujo de entrada y salida es el mismo y constante
 $F_{in} = F_{out} \Rightarrow V = \text{cte.}$

Ej. 1: Biorreactor continuo perfectamente agitado

Generación del modelo:

| | | |
|--|-------------------------|---------------------|
| | Reactivo que ingresa | $F_{in}C_{in}$ |
| + | Reactivo que se consume | $-k.V.C$ |
| + | Reactivo que sale | $-F_{out}C_{out}$ |
| Variación de la concentración del reactivo | | $\frac{d(V.C)}{dt}$ |

Particularización del modelo:

- $F_{in} = F_{out} = F$ (cte.)
- $C_{out} = C(t)$
- C_{in} (cte.)

Ej. 1: Biorreactor continuo perfectamente agitado

Modelo matemático:

$$\frac{d(V.C)}{dt} = -k.V.C - F.C + F.C_{in}$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\left(k + \frac{F}{V}\right) C(t) + \frac{F}{V} C_{in}$$

que de forma genérica lo podemos escribir como:

$$\frac{dy(x)}{dx} = A - By(x) \quad (\text{EDO lineal de 1er orden})$$

Ej. 1: Biorreactor continuo perfectamente agitado

Solución Analítica:

$$y(x) = \frac{A}{B} + c_1 e^{-B \cdot x}$$

c_1 surge de la condición inicial...

Ejercicio:

Ahora que tenemos nuestro primer modelo físico, resolverlo para $k = 0,3[1/min]$, $V = 10[m^3]$, $F = 1[m^3/min]$, $C_{in} = 1[-]$, $C(0) = 1[-]$.

- Comparar la resolución de los esquemas numéricos para $\neq h$.
- Probar el esquema para una $C_{in}(t)$ y distintas $C(0)$'s.