Computació Numèrica

Tema 5.3 - Equacions diferencials

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

15 de maig de 2023

Drets d'autor

"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"

Índex

Definicions i conceptes

Equació diferencial

Una **equació diferencial** és una equació que relaciona una funció i les seves derivades respecte a una o més variables independents.

Una **equació diferencial ordinària** és una equació que relaciona una funció i les seves derivades respecte a una variable independent.

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

Exemples

$$\frac{dy}{dt} = t^2 + y(t) + \cos(y(t)) \quad \longleftrightarrow \quad y' = t^2 + y + \cos(y)$$

$$t^3 y'' + e^t y' + y = e^{2t}$$

Equació diferencial parcial

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

Exemples

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

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

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

Ordre

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

Exemples

Ordre 1 : $y' = t^2 + y + \cos(y)$

Ordre 2 : $t^3 y'' + e^t y' + y = e^{2t}$

Equació diferencial lineal

Una equació diferencial ordinària d'ordre n és lineal si és de la forma

$$c_n(t)\,\frac{d^n y}{dt^n} + c_{n-1}(t)\,\frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \cdots + c_1(t)\,\frac{dy}{dt} + c_0\, y = f(t)$$

on les funcions $c_i(t)\;\; i = 0, 1, \ldots, n$ i $f(t)$ són contínues i $c_n(t) \neq 0$.

Exemples

Lineal ordre 1 : $y' + y = t^2 \cos(t)$.

Lineal ordre 2 : $t^3 y'' + e^t y' + y = e^{2t}$.

Lineal ordre 2 : $y'' + 8y' + 16y = e^{2t}$ de coeficients constants.

Lineal ordre 2 : $y'' + 8y' = 0$ de coeficients constants homogènia.

Solució d'una equació diferencial

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

Una solució de l'equació diferencial d'ordre n a l'interval $a < t < b$ és un funció contínua $\phi(t)$, amb totes les derivades d'ordre més petit o igual a n contínues tal que

$$F(t, \phi(t), \phi'(t), \phi''(t), \dots, \phi^{(n)}(t)) = 0\,, \quad t \in [a, b]\,.$$

Exemples

$y(t) = e^{3t}$ és solució de $y' - 3y = 0$.

$y(t) = cos 3t$ és solució de $y'' + 9y' = 0\,$.

Un problema de valor inicial (PVI) consisteix a resoldre una equació diferencial subjecta a condicions inicials per modelar les condicions del sistema en l'instant t_0.

Un **PVI** 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.

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

Solució analítica

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

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

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

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

```
tspan = [0 0.5];
y0 = 0.2;
ode = @(t,y) 5*y*(1-y);
[t1,y1] = ode23(ode, tspan, y0);
```

t	y(t)
0	0.2
0.02	0.21648
0.07	0.26186
0.12	0.31296
0.17	0.36904
0.22	0.4289
0.27	0.49092
0.32	0.55321
0.37	0.61388
0.42	0.67121
0.47	0.72386
0.5	0.75281

Teorema de Picard - Lindelöf

Sigui $f : [a, b] \times [c, d] \to \mathbb{R}$ contínua, considereu el problema de valor inicial (PVI)

$$\left\{ \begin{array}{lcl} y'(t) & = & f(t, y)\,, \\ y(t_0) & = & y_0\,, \qquad\qquad (t_0, y_0) \in [a, b] \times [c, d]\,. \end{array} \right. \tag{1}$$

Teorema de Picard

Si $\dfrac{\partial f}{\partial y}(t, y)$ és una funció contínua a la regió $[a, b] \times [c, d]$, podem trobar h tal que $\forall t$ de l'interval $|t - t_0| \leq h$ existeix una i només una solució del problema de valor inicial, (1) .

Equació logística:

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

Problemes de valors inicials:

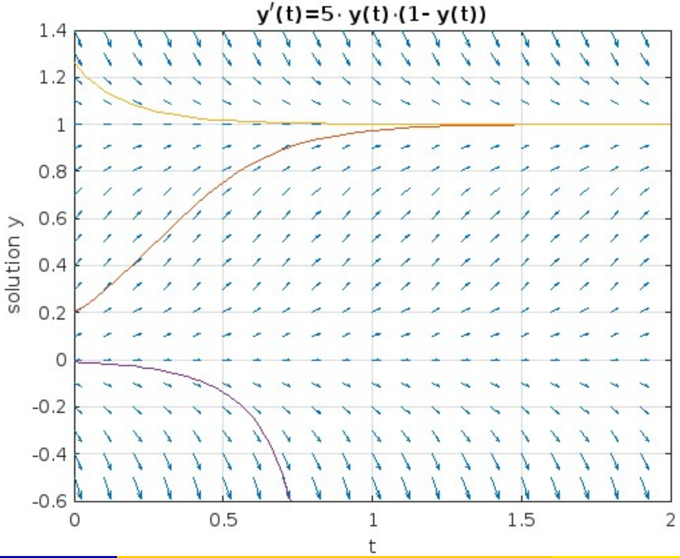
$$y(0) = 0.2, \quad y(0) = 1.26, \quad y(0) = 0.01.$$

Solucions estacionàries

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

Exemple

Solucions amb MATLAB®



Solucions analítiques

- Variables separables.

  Una equació diferencial que es pot escriure com $G(y)y' = F(t)$, s'anomena equació diferencial de variables separables.

- Lineals de primer ordre.

  Una equació diferencial que es pot escriure com $y' + p(t)\,y = f(t)$, s'anomena equació diferencial de lineal de primer ordre.

- Lineals de segon ordre amb coeficients constants. item[] Una equació diferencial lineal de segon ordre amb coeficients constants té la forma $y'' + by' + cy = q(t)$, on b, c són constants reals i $q(t)$ una funció real.

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

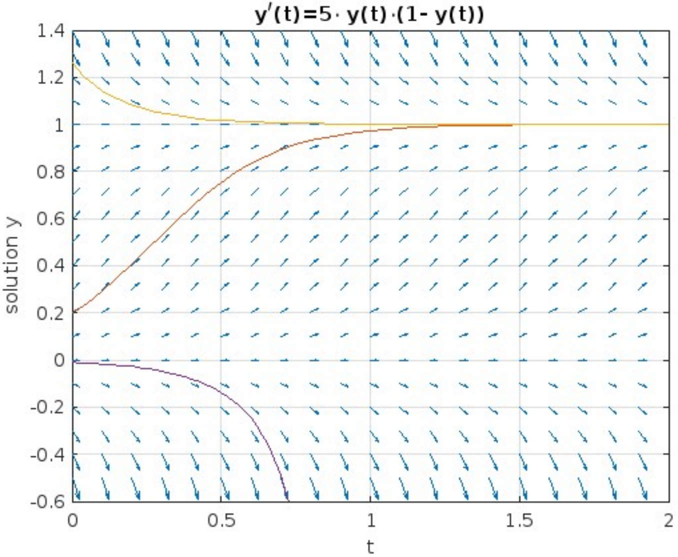
Per al problema de valor inicial,

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

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 dóna 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

El mètode numèric ens defineix com obtenir l'aproximació de $y(t+h)$, en funció de les aproximacions anteriors (per $h > 0$):

$$y(t+h) = \underbrace{y(t) + h \cdot \Phi(t, y(t), h)}_{\textit{Mètode}} + \underbrace{h \cdot \mathcal{T}(h)}_{\textit{Error}}$$

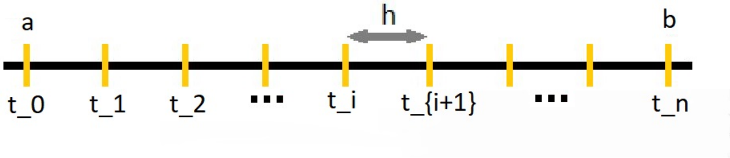
Bàsicament, hi ha tres grans famílies de mètodes:

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

Discretització

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

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



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

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

Notació

Segons la discretització, notem per

1. $\mathbf{y_i} \equiv \mathbf{y(t_i)}$ la solució analítica exacte, $y(t)$, avaluada en els punts de $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \ldots, n$.

2. $\mathbf{Y_i} \simeq \mathbf{y(t_i)}$ el valor obtingut pel mètode numèric emprat en els punts de $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \ldots, n$.

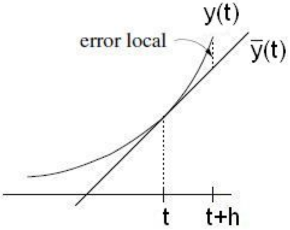
Un mètode de resolució numèrica:

$$y(t+h) = \underbrace{y(t) + h \cdot \Phi(t, y(t), h)}_{\textit{Mètode}} + \underbrace{h \cdot \mathcal{T}(h)}_{\textit{Error}}, \quad h > 0$$

es diu que és un mètode d'ordre k si

$$\mathcal{T}(h) = \mathcal{O}(h^k).$$

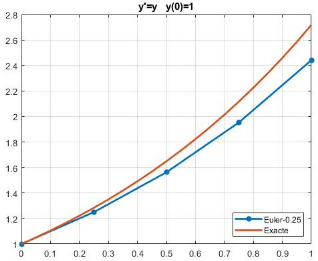
• **Error local**: a causa del mètode d'aproximació que emprem, és un error de truncament.



Definició: Error local

L'error local de truncament és l'error que es comet a l'aproximar el valor de $y(t+h)$ si es conegués el valor exacte de $y(t)$.

• **Error global**: a causa dels errors locals anteriors acumulats, o que coneixem la condició inicial amb error, . . .



Definició: Error global

L'error global és l'error que s'acumula a l'aplicar n pasos del mètode, és a dir

$$y(t_n) - Y_n\,.$$

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 intants $t_i, t_{i-1}, \ldots, t_{i-n+1}$. *Mètode d'Adams-Bashforth de dos pasos:*
   $$y_{i+2} = y_{i+1} + \frac{h}{2}\Big(3f(t_{i+1}, y_{i+1}) - f(t_i, y_i)\Big)$$

Els mètodes de resolució numèrica es classifiquen:

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

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

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

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

Mètode d'Euler

El problema

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

es transforma en

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

fent la substitució

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

La idea principal del mètode d'Euler és aproximar la derivada en cada t_i de la discretització fent ús de la fórmula endavant:

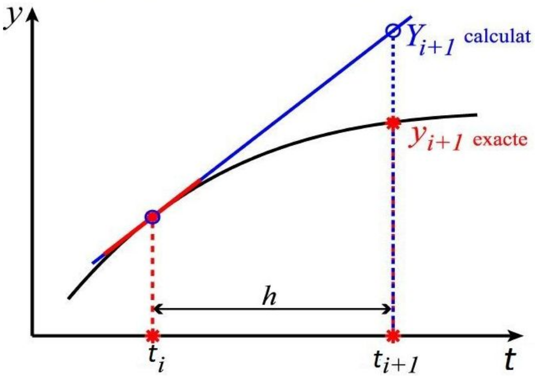
$$y'(t_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + \mathcal{T}(h)\,, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

LLavors, realitzant la substitució s'obté

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(t_i, y_i) + h \cdot \mathcal{T}(h)\,, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

on $\mathcal{T}(h)$ és l'error local de truncament.
Si negligim els errors, obtenim el mètode numèric d'Euler:

$$Y_{i+1} = Y_i + h \cdot f(t_i, Y_i)\,, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$



La idea és avançar per la recta tangent.

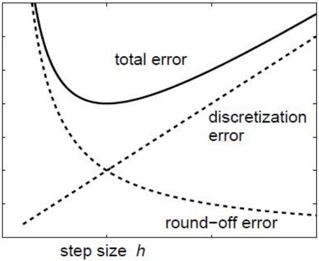
Mètode d'Euler

Error total

- Error local de discretització $\mathcal{T} = \mathcal{O}(h)$.
- Error local $h \cdot \mathcal{T} = \mathcal{O}(h^2)$.
- Error global $\mathcal{O}(h) =$ Nombre de pasos $\mathcal{O}(\frac{1}{h}) \times$ Error Local $\mathcal{O}(h^2)$
- Error d'arrodoniment, degut a la precisió de l'aritmètica de l'ordinador.

<u>Comentari</u>

Disminuir el pas h d'integració de l'equació diferencial no implica un augment de la precisió de la solució obtinguda.



PVI

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

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

Donat N prenem $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \cdots, n$, amb $h = \dfrac{(b-a)}{N}$, el mètode d'Euler construeix $\omega_i \approx y(t_i)$ amb la recurrència:

$$\left.\begin{aligned} \omega_0 &= \alpha \\ \omega_{i+1} &= \omega_i + h\, f(t_i, \omega_i) \end{aligned}\right\} \longrightarrow y(b) \approx \omega_N$$

Variants del Mètode d'Euler

Donat n prenem $h = \dfrac{(b-a)}{N}$ i $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \cdots, N$.

Inicialitzem $\omega_0 = \alpha$, el mètode és:

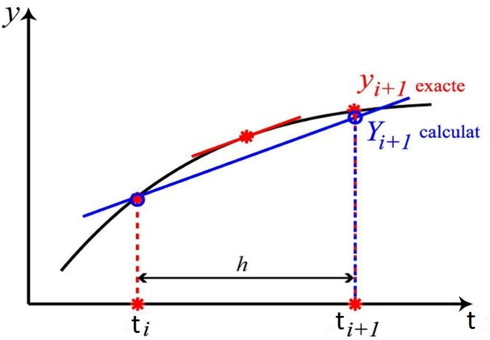
$$\left.\begin{aligned} k_1 &= \omega_i + \frac{h}{2} f(t_i, \omega_i) \\ \omega_{i+1} &= \omega_i + h\, f\left(t_i + \frac{h}{2}, k_1\right) \end{aligned}\right\} \quad \text{per a } i = 0, 1, 2, \cdots, N-1\,.$$

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 ordre, $\mathcal{O}(h^2)$.

Mètode d'Euler modificat

Mètode del punt mig explícit



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

Donat n prenem $h = \dfrac{(b-a)}{N}$ i $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \cdots, N$.

Inicialitzem $\omega_0 = \alpha$, el mètode és:

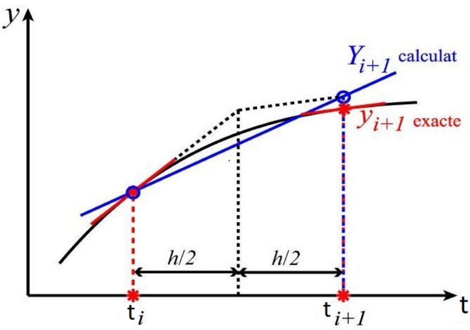
$$\left.\begin{aligned} k_1 &= \quad h\, f(t_i, \omega_i) \\ k_2 &= \quad h\, f(t_{i+1}, \omega_i + k_1) \\ \omega_{i+1} &= \quad \omega_i + \tfrac{1}{2}\, (k_1 + k_2) \end{aligned}\right\} \quad \text{per a } i = 0, 1, 2, \cdots, N-1\,.$$

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 ordre, $\mathcal{O}(h^2)$.

Mètode d'Euler millorat

Mètode de Heun de segon ordre



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

Un mètode general per obtenir aproximacions numèriques de la solució d'un problema de valors inicials associats a l'equació diferencial

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

consisteix en desenvolupar en sèrie de Taylor $y(t)$ en el punt t_i per calcular $y(t_{i+1})$ fins a l'ordre que es desitji $\mathcal{O}(h^{n+1})$:

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

Les derivades es calculen per aplicació de la regla de la cadena

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

Mètodes de Taylor

Substituïnt les expressions calculades de les derivades en el desenvolupament de Taylor s'obté el mètode de Taylor de l'ordre desitjat. Per exemple:

El mètode d'Euler, és el mètode de Taylor d'ordre 1:

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

El mètode de Taylor d'ordre 2 seria

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) + \frac{h^2}{2}\left(f_t(t_i, y_i) + f_y(t_i, y_i) \cdot f(t_i, y_i)\right)$$

Tots els mètodes són d'un pas i explícits. El problema d'aquest mètodes és que cal calcular i avaluar les derivades successives de $f(t, y)$.

Teorema

L'error de truncament local del mètode de Taylor d'ordre k

$$y(t+h) = y(t) + h \cdot \Phi(t, y(t), h) + h \cdot \mathcal{T}(h)$$

està donat per

$$\mathcal{T}(h) = \frac{h^k}{(k+1)!} y^{(k+1)}(\xi) \qquad \text{per algun } \xi \in (\mathrm{t}, \mathrm{t}+\mathrm{h})\,.$$

En conseqüència, $\mathcal{T}(h) = \mathcal{O}(h^k)$*, és un mètode d'ordre k .*

Mètodes de Runge- Kutta

Mètodes de Runge- Kutta

Carl David Tolmé Runge (1856 – 1927), i Martin Wilhelm Kutta (1867 – 1944)

Són els mètodes d'un pas més emprats. La idea és obtenir aproximacions que resultin del mateix ordre que els mètodes de Taylor, però sense calcular les derivades d'ordre alt de $f(t, y)$.
L'expressió general del mètode seria

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \phi \,, \text{ amb } \phi = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \cdots + a_n k_n \,.$$

Els coeficients a_i són els pesos de les diferents aproximacions k_i de les derivades de la funció $f(t, y)$.

Teorema

L'error de truncament local del mètode de Runge-Kutta d'ordre k verifica

$$\mathcal{T}(h) = \mathcal{O}(h^k)$$

L'expressió general del mètode d'ordre $\mathcal{O}(h^2)$ seria

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)\, h$$

$$\text{per } k_1 = f(t_i, y_i) \equiv f_i \text{ i } k_2 = f(t_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$$

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 f(t_i, y_i) + a_2 f(t_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h))\, h$$

Fent ús del desenvolupament de Taylor per a funcions de dues variables, escrivim

$$y_{i+1} = y_i + a_1 f_i h + a_2 \left(f_i + p_{11} f_t(t_i, y_i) h + f_i \cdot f_y(t_i, y_i)\, q_{11} h\right) h$$

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 + a_2) f_i h + a_2 p_{11} f_t(t_i, y_i) h^2 + a_2 f_i \cdot f_y(t_i, y_i)\, q_{11} h^2$$

El mètode de Taylor d'ordre 2 és

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

Comparant les expressions, obtenim 3 condicions i 4 incògnites:

$$a_1 + a_2 = \tfrac{1}{2}\,, \quad a_2 p_1 = \tfrac{1}{2} \quad a_2 q_{11} = \tfrac{1}{2}$$

Donant valors a a_2 obtenim

- $a_2 = \frac{1}{2}$, llavors $p_1 = q_{11} = 1$ és el mètode de Heun:

  $$y_{i+1} = y_i + \tfrac{h}{2}\left(k_1 + k_2\right)\,, \quad k_1 = f\left(t_i, y_i\right), \quad k_2 = f\left(t_i + h, y_i + k_1 h\right).$$

- $a_2 = 1$, llavors $p_1 = q_{11} = \frac{1}{2}$ és el mètode del punt mig:

  $$y_{i+1} = y_i + hk_2\,, \quad k_1 = f\left(t_i, y_i\right), \quad k_2 = f\left(t_i + \tfrac{h}{2}, y_i + k_1 \tfrac{h}{2}\right).$$

- $a_2 = \frac{2}{3}$, llavors $p_1 = q_{11} = \frac{3}{4}$ és el mètode de Ralston:

$$y_{i+1} = y_i + \tfrac{h}{2}\left(\tfrac{1}{3}k_1 + \tfrac{2}{3}k_2\right)\,, \; k_1 = f\left(t_i, y_i\right), \; k_2 = f\left(t_i + \tfrac{3}{4}h, y_i + k_1 \tfrac{3}{4}h\right).$$

La idea general dels mètodes de Runge- Kutta és substituir el problema de valor inicial

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y'(t) & = & f(t,y)\,, \\ y(t_0) & = & y_0\,, \qquad\qquad (t_0,y_0)\in[a,b]\times[c,d]\,. \end{array} \right.$$

per l'equació integral equivalent

$$\int_{y_0}^{y} dy = \int_{t_0}^{t} f(t,y(t))\,dt \Longrightarrow y = y_0 + \int_{t_0}^{t} f(t,y(t))\,dt\,.$$

i a continuació aproximar la darrera integral per un mètode d'integració numèrica. Pas a pas, per una discretització seria

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t,y(t))\,dt\,.$$

Mètodes de Runge - Kutta de ordre 3

RK3

Un mètode de Runge-Kutta de tercer ordre és

$$k_1 = h \cdot f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = h \cdot f(t_i + \tfrac{h}{2}, y_i + \tfrac{k_1}{2})$$

$$k_3 = h \cdot f(t_i + h, y_i - k_1 + 2k_2)$$

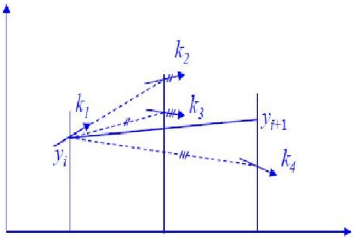
$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \ .$$

Aquest mètode es fonamenta en el mètode d'integració de Simpson

Mètodes de Runge - Kutta de ordre 4

RK4

Un mètode de Runge-Kutta de quart ordre és



$$k_1 = h \cdot f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = h \cdot f(t_i + \tfrac{h}{2}, y_i + \tfrac{k_1}{2})$$

$$k_3 = h \cdot f(t_i + \tfrac{h}{2}, y_i + \tfrac{k_2}{2}))$$

$$k_4 = h \cdot f(t_i + h, y_i + k_3)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\ .$$

Comparació de mètodes

Eficiència

Mètode	Ordre	Avaluacions
Euler	$\mathcal{O}(h)$	1
Euler mod.	$\mathcal{O}(h^2)$	2
Heun	$\mathcal{O}(h^2)$	2
RK4	$\mathcal{O}(h^4)$	4

Estabilitat

$$\textbf{PVI} \equiv \begin{cases} y'(t) & = & -y(t)\,, \\ y(0) & = & y_0\,, \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \bar{y}'(t) & = & -\bar{y}(t)\,, \\ \bar{y}(0) & = & \bar{y}_0\,, \end{cases}$$

compleix que l'error $|y(\bar{t}) - y(t)| =$ és decreixent en t.

Un **PVI** és <u>inestable</u> si no és estable.

$$\textbf{PVI} \equiv \left\{ \begin{array}{rcl} y'(t) & = & y(t)\,, \\ y(0) & = & 1\,, \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad y(t) = e^{t}\,.$$

Canviem lleugerament la condició inicial,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \bar{y}'(t) & = & \bar{y}(t)\,, \\ \bar{y}(0) & = & 1+\epsilon\,, \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad \bar{y}(t) = (1+\epsilon)e^{t}\,.$$

L'error $|y\overline{(t)} - y(t)| = \epsilon \cdot e^{t}$ és creixent en t.

Estabilitat

Estable, amb decreixement exponencial

$$\textbf{PVI} \equiv \left\{ \begin{array}{rcl} y'(t) & = & -y(t)\,, \\ y(0) & = & 1\,, \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad y(t) = e^{-t}\,.$$

Canviem lleugerament la condició inicial,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \bar{y}'(t) & = & -\bar{y}(t)\,, \\ \bar{y}(0) & = & 1+\epsilon\,, \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad \bar{y}(t) = (1+\epsilon)e^{-t}\,.$$

L'error $|\overline{y(t)} - y(t)| = \epsilon \cdot e^{-t}$ és decreixent en t.

$$\textbf{PVI} \equiv \begin{cases} y'(t) & = & -y(t)\,, \\ y(0) & = & y_0\,, \end{cases}$$

Quan tenim un PVI i el resolem aproximadament per un mètode iteratiu:

- Menter els successius PVI amb $y(t_0) = y_0$, $y(t_1) = y_1$, ...surtin estables, tenim l'error sota control prenent el pas h petit.
- Si ens trobem en algun punt de la solució amb un $y(t_j) = y_j$ inestable, l'error $|\bar{y}(t) - y(t)|$ passa a crèixer, normalment de manera exponencial en $t - t_j$. Cal fer el pas h molt i molt petit.
- La manera de gestionar el pas h i tenir alguna esperança que $\bar{y}(t)$ aproximi la solució correcte $y(t)$ és usar alguna estratègia de control de pas

Idea 1: Per cada pas h es calcula $\bar{y}(t_0 + h)$ a partir de $\bar{y}(t_0)$ fent ús de dos mètodes; es comparen els dos resultats, i si la diferència entre ells és més gran del que es considera admissible, es repeteix el càlcul amb pas h més petit.

Idea 2: Per canviar de pas, amb un cost raonable de temps de càlcul, és necessari estimar la magnitud l'error local de truncament, la qual cosa pot fer-se amb dues fórmules de diferent ordre o utilitzant dos passos diferents: h i $h/2$ habitualment.

La rutina de MATLAB® ode45 fa ús de la variant de Dormand-Prince (1980) del mètode de Runge-Kutta-Fehlberg. Les fórmules són

$$k_1 = h \cdot f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = h \cdot f(t_i + \tfrac{1}{5}h, y_i + \tfrac{1}{5}k_1)$$

$$k_3 = h \cdot f(t_i + \tfrac{3}{10}h, y_i + \tfrac{3}{40}k_1 + \tfrac{9}{40}k_2)$$

$$k_4 = h \cdot f(t_i + \tfrac{4}{5}h, y_i + \tfrac{44}{45}k_1 - \tfrac{56}{15}k_2 + \tfrac{32}{9}k_3)$$

$$k_5 = h \cdot f(t_i + \tfrac{8}{9}h, y_i + \tfrac{19372}{6561}k_1 - \tfrac{25360}{2187}k_2 + \tfrac{64448}{6561}k_3 - \tfrac{212}{729}k_4)$$

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

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

$$k_7 = h \cdot f(t_i + h, z_{i+1})$$

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

Els valors z_{i+1} i y_{i+1} són estimacions, l'estimació de l'error que es comet en un pas és:

$$e_{i+1} = \left| z_{i+1} - y_{i+1} \right| =$$

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

L'algorisme no cal que calculi y_{i+1}, només e_{i+1}.
Per una tolerància de l'error, *tol* i un pas inicial h, si

$$\frac{e_{i+1}}{\left| y_{i+1} \right|} < tol$$

el valor de Y_{i+1} serà z_{i+1}, i k_7 serà el valor de k_1 en el proper iterat; i per tant tots els càlculs són reaprofitats.

Estabilitat
Problemes stiff

Hi ha un tipus de problemes **PVI** anomenats stiff per als que els mètodes explícits[1] evolucionen malament cap a la solució analítica del PVI. Per exemple

$$\textbf{PVI} \equiv \begin{cases} y'(t) & = & -\alpha(y - t^2) + 2t\,, \\ y(0) & = & y_0\,, \end{cases} \implies \quad y(t) = y_0 e^{-\alpha t} + t^2\,.$$

Si $\alpha > 0$ és un nombre real gran, la solució varia ràpidament fins que la component exponencial s'esmorteeix. A partir d'aquest moment prima la component no exponencial.

Per aquests PVI es recomana la resolució fent ús d'un <u>mètode ímplicit</u>.

[1] Els mètodes explícits de resolució d'un **PVI** donen una aproximació Y_{i+1} a partir de les dades h, t_i i Y_i.

El problema

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

es transforma en

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

fent la substitució

$$y'(t_i) \longleftrightarrow \frac{Y_{i-1} - Y_i}{h}\,, \quad i = 1, \ldots, n.$$

L'expressió obtinguda no ens dóna directament una fórmula per a la nova aproximació Y_i

PVI

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

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

Donat N prenem $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \cdots, n$, amb $h = \dfrac{(b-a)}{N}$, el mètode d'Euler <u>ímplicit</u> construeix $\omega_i \approx y(t_i)$ amb la recurrència:

$$\left.\begin{aligned} \omega_0 &= \alpha \\ \omega_i &= \omega_{i-1} + h\, f(t_i, \omega_i) \\ i &= 1, 2, \cdots, n \end{aligned}\right\} \longrightarrow y(b) \approx \omega_N$$

Mètode d'Euler ímplicit

Exemple

$$\textbf{PVI} \equiv \begin{cases} y'(t) & = & -\alpha(y - t^2) + 2t\,, \\ y(0) & = & y_0\,, \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad y(t) = y_0 e^{-\alpha t} + t^2\,.$$

L'algorisme d'Euler ímplicit per el PVI anterior seria

$$\begin{aligned} \omega_i = & \quad \omega_{i-1} + h\,\left(-\alpha(\omega_i - t^2) + 2t\right) \\ = & \quad \omega_{i-1} - h\alpha\omega_i + h(\alpha\, t^2 + 2t) \end{aligned}$$

El resultat és una equació no lineal[2], en aquest cas si aïllem ω_i de l'expressió anterior s'obté el mètode iteratiu $(\omega = g(\omega))$, a implementar

$$\omega_i = \frac{\omega_{i-1} + h(\alpha\, t^2 + 2t)}{1 + \alpha\, h}\;,\; \omega_0 = y_0 \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

en aquest cas convergent si $g'(\omega) = 1/(1 + \alpha\, h) < 1$, cert per a qualsevol $\alpha > 0$.

[2] Tema previ de resolució d'equacions

Mètodes multipas

Els mètodes presentats fins ara són d'un sol pas, el valor Y_{i+1} es calcula a partir de la informació d'un únic punt. Els mètodes multipas fan ús de la informació de més punts anteriors amb l'objectiu de fer menys avaluacions de la funció per al mateix ordre d'error.
L'expressió general d'aquests tipus de mètodes de m passos és:

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

Si $\beta_0 = 0$, el mètode és explícit; s'anomenen mètodes d'Adams-Bashforth.

Si $\beta_0 \neq 0$, el mètode és implícit; s'anomenen mètodes d'Adams-Moulton.

Tots els mètodes multipas necessiten d'altres mètodes per als primers m passos; normalment es calculen amb mètodes d'un pas. No són adients per a PVI que presenten discontinuïtats en la solució.

El problema

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

es transforma en

$$Y_{i+1} = Y_{i-1} + 2hf(t_i, Y_i)\,, \quad Y_0 = \alpha\,,$$

fent la substitució

$$y'(t_i) \longleftrightarrow \frac{Y_{i+1} - Y_{i-1}}{2h}\,, \quad i = 1, \ldots, n.$$

És un mètode de 2 passos, per calcular $Y i+1$ cal Y_i i Y_{i-1}.

Per iniciar l'algorisme cal conèixer els valors Y_0 i Y_1; el valor de Y_0 és α i el valor de Y_1 es pot obtenir per el mètode d'Euler, per RK2, per RK4, ...

El problema

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

es transforma en

$$Y_{i+2} = Y_i + \frac{h}{3}\left(f(t_i, Y_i) + f(t_{i+1}, Y_{i+1}) + f(t_{i+2}, Y_{i+2})\right)\,, \quad Y_0 = \alpha\,,$$

Es parteix de la fórmula d'integració

$$y(t_{i+2}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+2}} y'(s)\,ds$$

i aproximant el valor de la integral per la regla de Simpson, s'obté

$$y(t_{i+2}) - y(t_i) = \frac{h}{3}\left(y'(t_i) + y'(t_{i+1}) + y'(t_{i+2})\right)$$

És un mètode de 2 passos, per calcular $Y i+1$ cal Y_i i Y_{i-1}.
Per iniciar l'algorisme cal conèixer els valors Y_0 i Y_1; el valor de Y_0 és α i el valor de Y_1 es pot obtenir per el mètode d'Euler, per RK2, per RK4

Adams-Bashforth d'ordre 4

Algorisme

Les equacions del mètode per al PVI

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = \alpha\,,$$

són

$$\begin{aligned}
\omega_0 = \alpha, \qquad & \omega_1 = \alpha_1, \quad \omega_2 = \alpha_2, \quad \omega_3 = \alpha_3\,, \\
\omega_{i+1} = \omega_i \quad + \quad & \frac{h}{24}\Big(55f(t_i, \omega_i) - 59f(t_{i-1}, \omega_{i-1}) + \\
+ \quad & 37f(t_{i-2}, \omega_{i-2}) - 9f(t_{i-3}, \omega_{i-3})\Big) \\
& i = 3, 4, \cdots, N-1
\end{aligned}$$

És un mètode explícit. Els coeficients del mètode es calculen interpolant i obligant que la fórmula sigui exacte per als monomis: $1, t, t^2, t^3$ i t^4.

Les equacions del mètode per al PVI

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = \alpha\,,$$

són

$$\begin{aligned}
\omega_0 = \alpha, \qquad & \omega_1 = \alpha_1, \quad \omega_2 = \alpha_2, \\
\omega_{i+1} = \omega_i \quad + & \quad \frac{h}{24}\Big(9f(t_{i+1}, \omega_{i+1}) + 19f(t_i, \omega_i) + \\
- & \quad 5f(t_{i-1}, \omega_{i-1}) + f(t_{i-2}, \omega_{i-2})\Big) \\
& \quad i = 2, 3, \cdots, N-1
\end{aligned}$$

És un mètode implícit. Els coeficients del mètode es calculen interpolant i obligant que la fórmula sigui exacte per als monomis: $1, t, t^2, t^3$ i t^4.

Per iniciar els algorismes cal conèixer els valors inicials; el valor de ω_0 és α i per la resta de valors es pot obtenir per el mètode d'Euler, per RK2, per RK4 o per un mètode de Taylor.

En general els un mètodes implícits són més precisos que els mètodes explícits, però per aplicar un mètode implícit cal resoldre una equació implícita per ω_{i+1}. La resolució de l'equació implícita pot no ser posible o la solució ω_{i+1} pot no ser única.

Mètodes Predictor - Corrector

Mètodes Predictor - Corrector

Combinen mètodes explícits i implícits en cada interval mitjançant un pas predictor (mètode explícit), que estima la solució en el nou punt, i un altre corrector (mètode ímplicit), que la millora. Es conneix com mètode PECE (prediu,avalua,corregeix,avalua).

La taula de la pàgina següent descriu la mecànica de l'algorisme:
(pàgina del llibre de Càlcul numèric)

Algorisme genèric

apliquem el predictor $\longrightarrow$	$y_{n+k}^{[0]}$	P	
avaluem $f(y_{n+k}^{[0]})$ $\longrightarrow$	$f_{n+k}^{[0]}$	E	
apliquem el corrector $\longrightarrow$	$y_{n+k}^{[1]}$	C	PEC
avaluem $f(y_{n+k}^{[1]})$ $\longrightarrow$	$f_{n+k}^{[1]}$	E	
apliquem el corrector $\longrightarrow$	$y_{n+k}^{[2]}$	C	$P(EC)^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
avaluem $f(y_{n+k}^{[m-1]})$ $\longrightarrow$	$f_{n+k}^{[m-1]}$	E	
apliquem el corrector $\longrightarrow$	$y_{n+k}^{[m]}$	C	$P(EC)^m$

Per al següent pas y_{n+k+1} podem utilitzar $f_{n+k}^{[m-1]}$ o bé $f_{n+k}^{[m]}$, i s'obtenen, finalment, dos esquemes diferents

$$P(EC)^m \quad \text{o bé} \quad P(EC)^m E$$

$$\textbf{PVI} \equiv \begin{cases} y'(t) &= f(t, y(t)), \\ y(0) &= Y_0, \end{cases}$$

Donat N, prenem $h = \dfrac{(b-a)}{N}$, llavors $t_i = a + ih$, per $i = 0, 1, 2, \cdots, N$.
Notem per f_i el valor $f_i = f(t_i, Y_i)$, llavors[3] per $i \geq 3$

- Predictor: Adams - Bashforth d'ordre 4

$$Y_{i+1}^* = Y_i + \frac{h}{24}\left(55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}\right)$$

- Avaluació: $f_{i+1}^* = f(t_{i+1}, Y_{i+1}^*)$
- Corrector: Adams - Moulton d'ordre 4

$$Y_{i+1}^* = Y_i + \frac{h}{24}\left(9f_{i+1}^* + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}\right)$$

- Avaluació: $f_{i+1} = f(t_{i+1}, Y_{i+1})$

[3] dades faltants $Y_1 =$, $Y_2 =$, $Y_3 =$, s'obtenen per RK4.

Equacions diferencials d'ordre superior. Sistemes d'equacions diferencials.

Un sistema d'ordre m de problemes de valor inicial té la forma

$$\mathbf{PVI} \equiv \begin{cases} u_1'(t) &= f_1(t, u_1, u_2, \ldots, u_m)\,, \\ u_2'(t) &= f_2(t, u_1, u_2, \ldots, u_m)\,, \\ u_3'(t) &= f_3(t, u_1, u_2, \ldots, u_m)\,, \\ & \vdots \\ u_m'(t) &= f_m(t, u_1, u_2, \ldots, u_m)\,, \end{cases}$$

per $a \leq t \leq b$, les condicions inicials són

$$u_1(a) = \alpha_1,\ u_2(a) = \alpha_2,\ u_3(a) = \alpha_3,,\ \ldots,\ u_m(a) = \alpha_m\,.$$

L'objectiu és determinar m funcions $u_1(t), u_2(t), \ldots, u_m(t)$ que compleixen cadascuna de les equacions diferencials i les condicions inicials.

Sigui

$$D = \left\{ (t, u_1, u_2, \dots, u_m) \,\middle|\, t \in [a, b]\,, u_i \in \mathbb{R}\,, 1 \leq i \leq m \right\}$$

el domini de la funció $f(t, u_1, u_2, \dots, u_m)$.

Teorema

[a] Si $f(t, u)$ i $\dfrac{\partial f}{\partial u}(t, u)$ són funcions contínues a la regió D, llavors el sistema d'equacions diferencials,(**??**), amb condicions inicials té una única solució $u(t)$, per $t \in [a, b]$.

[a]Notem $u(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t))$

Els mètodes per resoldre sistemes d'equacions diferencials de primer ordre són generalitzacions dels mètodes d'equacions de primer ordre que ja s'han estudiat.

El mètode d'Euler s'aplicaria de forma vectorial[4]; cal tenir en compte que la variable dependent u i la funció f són vectors. Les condicions inicials són $w_{1,0} = \alpha_1,\ w_{2,0} = \alpha_2, \ldots w_{m,0} = \alpha_m$, i l'algorisme és:

$$u' = f(t, u) \longrightarrow w_{i,j+1} = w_{i,j} + h\, f(t_i, w_{i,j})\,, \quad u_i(t_j) \approx w_{i,j}.$$

[4]Donat N, prenem $h = \frac{(b-a)}{N}$, llavors $t_j = a + jh$, per $j = 0, 1, 2, \cdots, N$; es fa ús de la notació $w_{i,j}$ per el valor aproximat de $u_i(t_j)$.

Donat N, prenem $h = \frac{(b-a)}{N}$, llavors $t_j = a + jh$, per $j = 0, 1, 2, \cdots, N$; es fa ús de la notació $w_{i,j}$ per el valor aproximat de $u_i(t_j)$.

Les condicions inicials són $w_{1,0} = \alpha_1,\ w_{2,0} = \alpha_2, \ldots w_{m,0} = \alpha_m$.

$$
\begin{aligned}
k_{1,i} &= h \cdot f_i\left(t_j, w_{1,j}, w_{2,j}, \ldots, w_{m,j}\right), \quad i = 1, 2, \ldots, m \\
k_{2,i} &= h \cdot f_i\left(t_j + \frac{h}{2}, w_{1,j} + \frac{k_{1,1}}{2}, w_{2,j} + \frac{k_{1,2}}{2}, \ldots, w_{m,j} + \frac{k_{1,m}}{2}\right),\ i = 1, 2, \ldots, m \\
k_{3,i} &= h \cdot f_i\left(t_j + \frac{h}{2}, w_{1,j} + \frac{k_{2,1}}{2}, w_{2,j} + \frac{k_{2,2}}{2}, \ldots, w_{m,j} + \frac{k_{2,m}}{2}\right),\ i = 1, 2, \ldots, m \\
k_{4,i} &= h \cdot f_i\left(t_j + h, w_{1,j} + k_{3,1}, w_{2,j} + k_{3,2}, \ldots, w_{m,j} + k_{3,m}\right),\ i = 1, 2, \ldots, m \\
w_{i,j+1} &= w_{i,j} + \frac{1}{6}\left(k_{1,i} + 2k_{2,i} + 2k_{3,i} + k_{4,i}\right),\ i = 1, 2, \ldots, m
\end{aligned}
$$

Tots els mètodes d'un pas es poden extendre als sistemes d'equacions de manera similar. Els mètodes multipas i les tècniques predictor-corrector es poden ammpliar a sistemes.

No introduïm tècniques noves per equacions diferencials d'ordre n, $n > 1$.
La idea general és substituir el problema de valor inicial

$$\textbf{PVI} \equiv \left\{ \begin{array}{rcl} y^{(n)}(t) & = & f(t, y, y', y'', y''', \ldots, y^{(n-1)})\,, \\ y(t_0) & = & y_0\,, \\ y'(t_0) & = & y'_0\,, \\ y''(t_0) & = & y''_0\,, \\ & \vdots & \\ y^{(n-1)}(t_0) & = & y_0^{(n-1)}\,. \end{array} \right.$$

per un sistema de n equacions diferencials de primer ordre al reetiquetar les variables $y', y'', y''', \ldots, y^{(n-1)}$.

Si $u_1(t) = y'(t),\ u_2(t) = y''(t),\ u_3(t) = y'''(t), \ldots, u_{n-1}(t) = y^{(n-1)}(t)$;
el **PVI** es transforma en el sistema

$$\textbf{PVI} \equiv \left\{ \begin{array}{rcl} u_1'(t) & = & u_2(t)\,, \\ u_2'(t) & = & u_3(t)\,, \\ & \vdots & \\ u_{n-1}'(t) & = & u_n(t)\,, \\ u_n'(t) & = & y^{(n)}(t) = f(t, u_1, u_2, \ldots, u_{n-1}, u_n)\,, \end{array} \right.$$

i les condicions inicials es reescriuen com

$$u_1(t_0) = y(t_0),\ u_2(t_0) = y'(t_0),\ u_3(t_0) = y''(t_0),\ \ldots,\ u_n(t_0) = y^{(n-1)}(t_0),$$

Guia estudi subtema

Llibre Càlcul numèric: teoria i pràctica

- Conceptes associats: Capítol 8, Equacions diferencials ordinàries. Des de la pàgina 318 fins a la 344.

Llibre Cálculo Científico con MATLAB y Octave

- Conceptes i exercicis resolts: capítol 7, pàgines 194 a 243.
- Problemes i pràctiques proposades: 7.1, 7,2, 7.15, 7.18 i 7.19.

Lloc web Chapter 08 Ordinary Differential Equations

Lloc web Solving ODEs - MATLAB®

Llibres de consulta online

- Llibre de consulta - Accès UPCommons,
  Càlcul numèric: teoria i pràctica
- Llibre de consulta - Accès Biblioteca,
  Cálculo Científico con MATLAB y Octave by A. Quarteroni, F. Saleri
- Métodos Numéricos, J. Douglas Faires & Richard Burden.
  Ed.Thomson 3era edición. 2004.
- Llibre de consulta -C. Moler,
  Cleve Moler - Llibre de text i codis - MathWorks
- Lloc web
  Holistic Numerical Methods