

PEC3. Integración numérica y resolución de ecuaciones no-lineales

Juan José Rodríguez Aldavero

Métodos Numéricos en Ingeniería

Resumen

En este documento, correspondiente a la cuarta Prueba de Evaluación Continua de la asignatura Métodos Numéricos en Ingeniería, se aplicarán métodos numéricos para la resolución de un sistema de ecuaciones ordinarias acoplado.

1. Introducción

En este ejercicio se nos pide tratar el problema diferencial

$$\begin{cases} \dot{y}_A(t) = -(y_A(t))^2 + y_B(t) \\ \dot{y}_B(t) = (y_A(t))^2 - 2y_B(t) \end{cases}$$

con condiciones iniciales

$$y_A(0) = 1, \quad y_B(0) = 0$$

que describe un sistema químico de dos sustancias acopladas. En particular, deseamos encontrar su solución en el intervalo $t \in [0, 10]$ empleando el método de Euler y el método de Runge-Kutta de orden 4 (RK4).

2. El método de Euler

El método de Euler es la forma más sencilla de resolver numéricamente una ecuación diferencial ordinaria. Está basada en la resolución por diferencias de la ecuación resultante de sustituir la definición de la derivada

$$y'(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(t+h) - y(t)}{h}$$

para un valor finito del paso h . En su forma más general, una ecuación diferencial vectorial

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

es expresada iterativamente según el método de Euler como

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + h\mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k)$$

Este algoritmo puede ser programado en un script de Matlab, el cual nos permitirá hallar los valores numéricos de $\mathbf{y}(t) = (y_A(t), y_B(t))$ en distintos puntos de t . En particular, creamos una tabla con los valores numéricos de $\mathbf{y}(t)$ para tres valores del paso h , decrecientes de tal forma que podamos apreciar la evolución de las soluciones a medida que el paso se hace cada vez más fino. El resultado es el siguiente

h	$y_A(1)$	$y_A(5)$	$y_A(10)$	$y_B(1)$	$y_B(5)$	$y_B(10)$
0,1	0.611181051883847	0.309084348581163	0.184155010042748	0.212280742804455	0.055446509350203	0.018571537879497
0,05	0.613948591451550	0.309148240266787	0.183854658780693	0.216780969211742	0.055446425799044	0.018505115443885
0,025	0.612229089610021	0.309110025420021	0.184043349624803	0.213929259934304	0.055447163144937	0.018546814745696

Para visualizar estos resultados, representamos las soluciones para los tres valores de h en una gráfica.

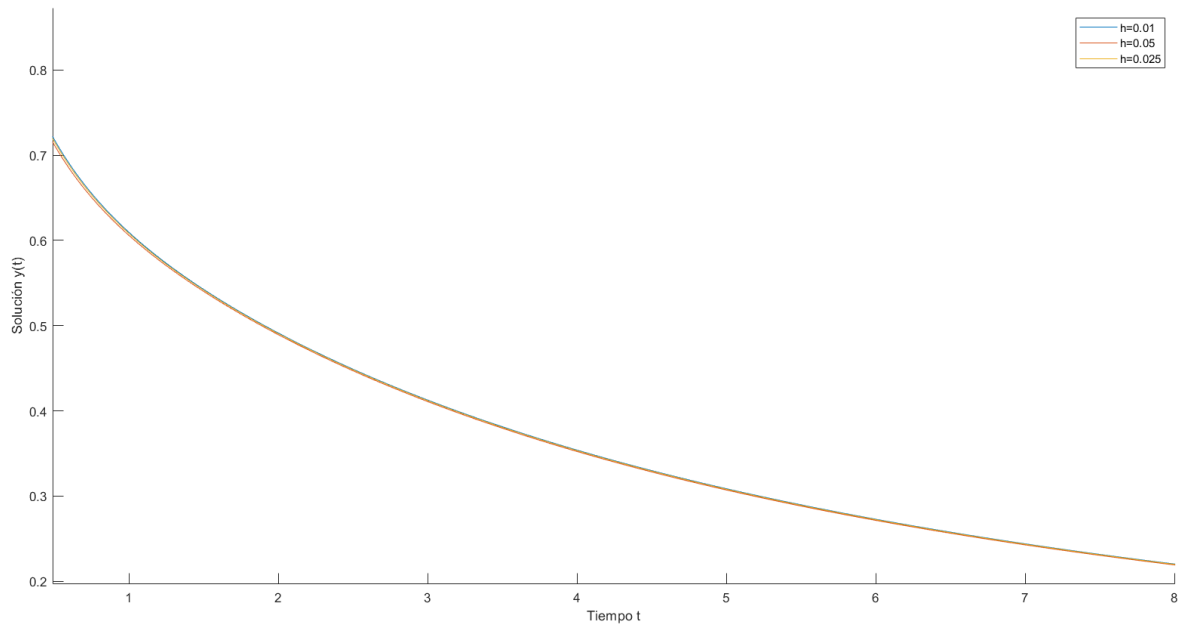


Figura 1: Resolución por el método de Euler

Vemos como a primera vista no se distinguen las distintas gráficas debido a que su separación relativa es muy pequeña, y la convergencia es muy buena. Ampliando un segmento de la gráfica vemos como su separación relativa es del orden de 10^{-3} unidades

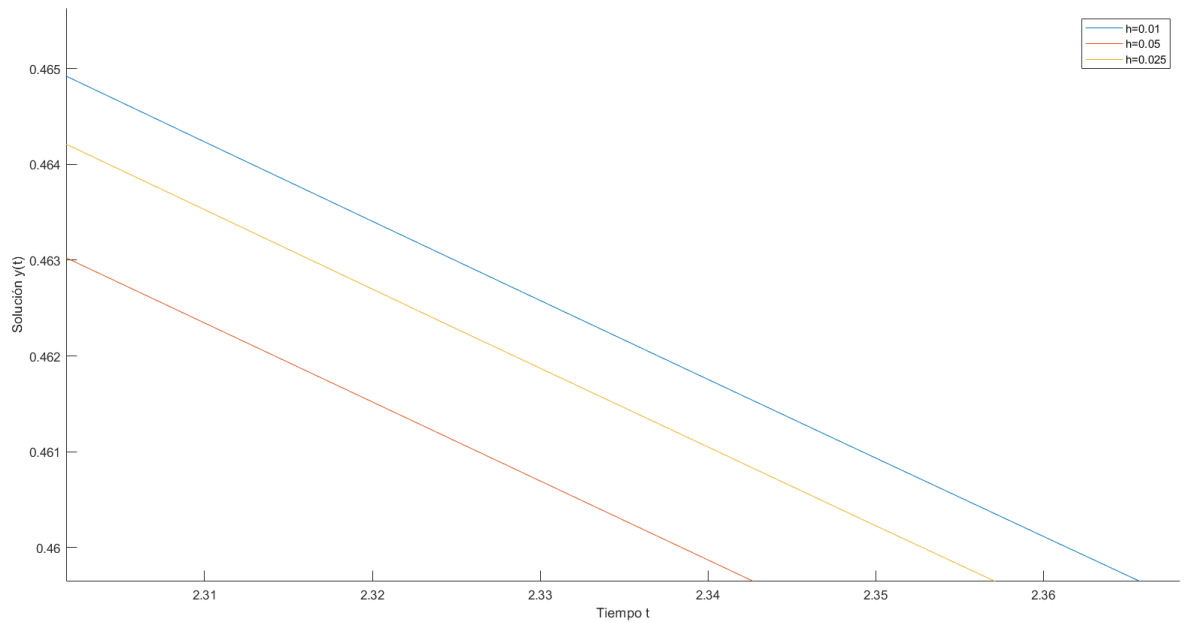


Figura 2: Separación de las soluciones en términos del paso h

3. El método de Runge-Kutta de orden 4

Si partimos de la ecuación general,

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

e integramos ambos términos

$$\mathbf{y}(t_{k+1}) = \mathbf{y}(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) dt$$

es posible hacer la integral del término derecho mediante la aproximación de Simpson,

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} f(x) dx \cong \frac{h'}{3} (f_k + 4f_{k+1/2} + f_{k+1}), \quad f_{k+1/2} \approx \frac{f_{k2} + f_{k3}}{2}$$

para obtener el método de Runge-Kutta de orden 4:

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + \frac{h}{6} (\mathbf{f}_{k1} + 2\mathbf{f}_{k2} + 2\mathbf{f}_{k3} + \mathbf{f}_{k4})$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{k1} &= \mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k) \\ \mathbf{f}_{k2} &= \mathbf{f}(t_k + h/2, \mathbf{y}_k + \mathbf{f}_{k1}h/2) \\ \mathbf{f}_{k3} &= \mathbf{f}(t_k + h/2, \mathbf{y}_k + \mathbf{f}_{k2}h/2) \\ \mathbf{f}_{k4} &= \mathbf{f}(t_k + h, \mathbf{y}_k + \mathbf{f}_{k3}h) \end{aligned}$$

Podemos programar este algoritmo en un script de Matlab que nos permite calcular aproximaciones numéricas de las soluciones. De esta manera, completamos la tabla anterior pero esta vez para el método de Runge-Kutta. Los resultados son los siguientes

h	$y_A(1)$	$y_A(5)$	$y_A(10)$	$y_B(1)$	$y_B(5)$	$y_B(10)$
0,1	0.612098653224768	0.309467372829872	0.184382465956271	0.211698699597242	0.055599627387103	0.018620296159788
0,05	0.618741809037848	0.311081764163121	0.184999475098730	0.213561206222831	0.056221622242085	0.018750700300309
0,025	0.614560307873107	0.310070991944697	0.184613388117345	0.212417942133861	0.055831741481089	0.018669043690017

Para comparar los resultados anteriores con el obtenido por este método, representamos los resultados para el paso $h = 0,1$ con Runge-Kutta junto con los anteriores para el método de Euler.

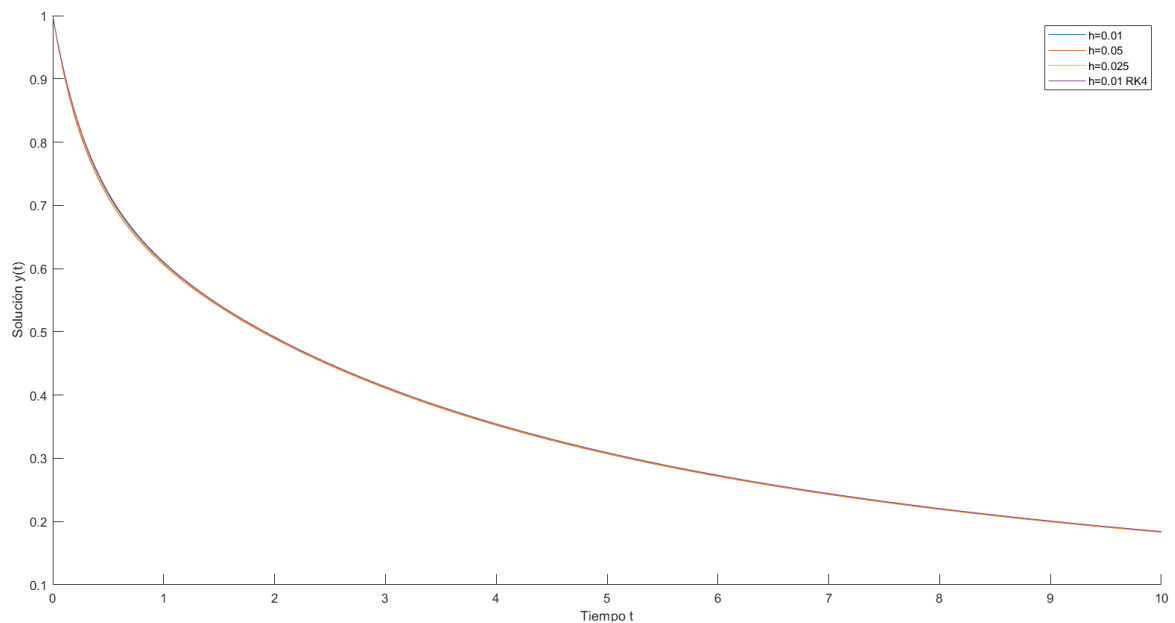


Figura 3: Separación de las soluciones en términos del paso h

De nuevo, vemos como la convergencia de todos los métodos es muy buena y no distinguimos nada, pero ampliando las gráficas

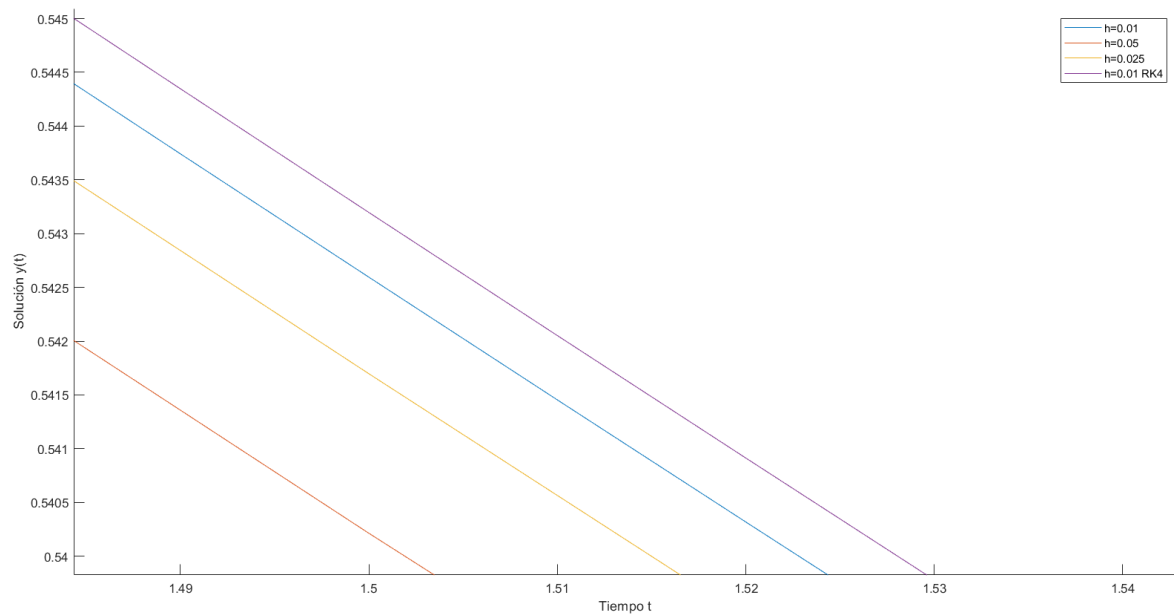


Figura 4: Incorporación de la solución por Runge-Kutta a las del método de Euler

vemos como las soluciones del método de Euler convergen a la solución de Runge-Kutta a medida que disminuye el paso h . Esto era de esperar ya que Runge-Kutta presenta un menor error ($O(h^4)$) que el de Euler ($O(h)$).

A continuación planteamos todos los resultados para Runge-Kutta a medida que variamos h . En esta ocasión representamos ambas ramas de la solución, $y_A(t)$ e $y_B(t)$. El resultado es

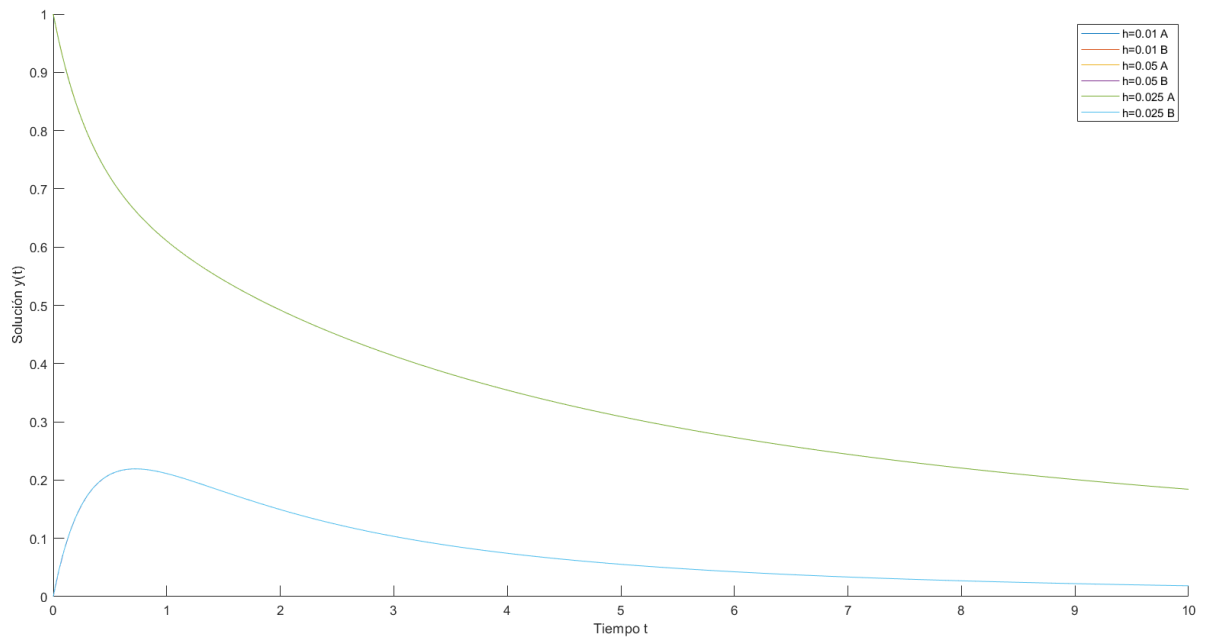


Figura 5: Soluciones para Runge-Kutta en términos de h

Planteamos las separaciones para los distintos pasos igual que hicimos para las gráficas anteriores:

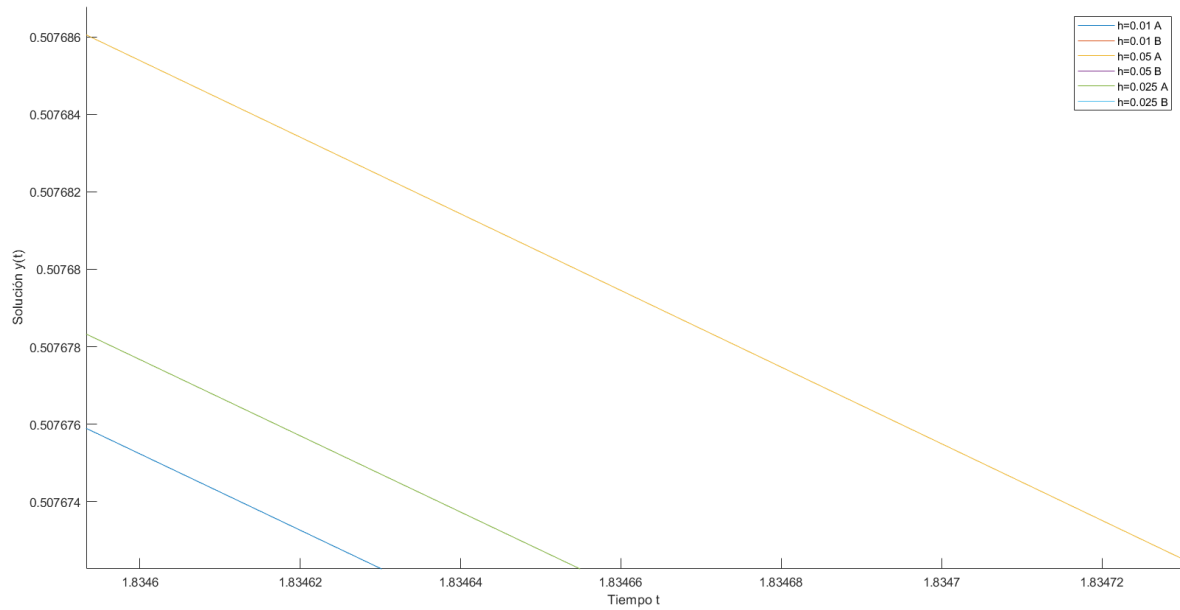


Figura 6: Separaciones para $y_A(t)$ en términos de h

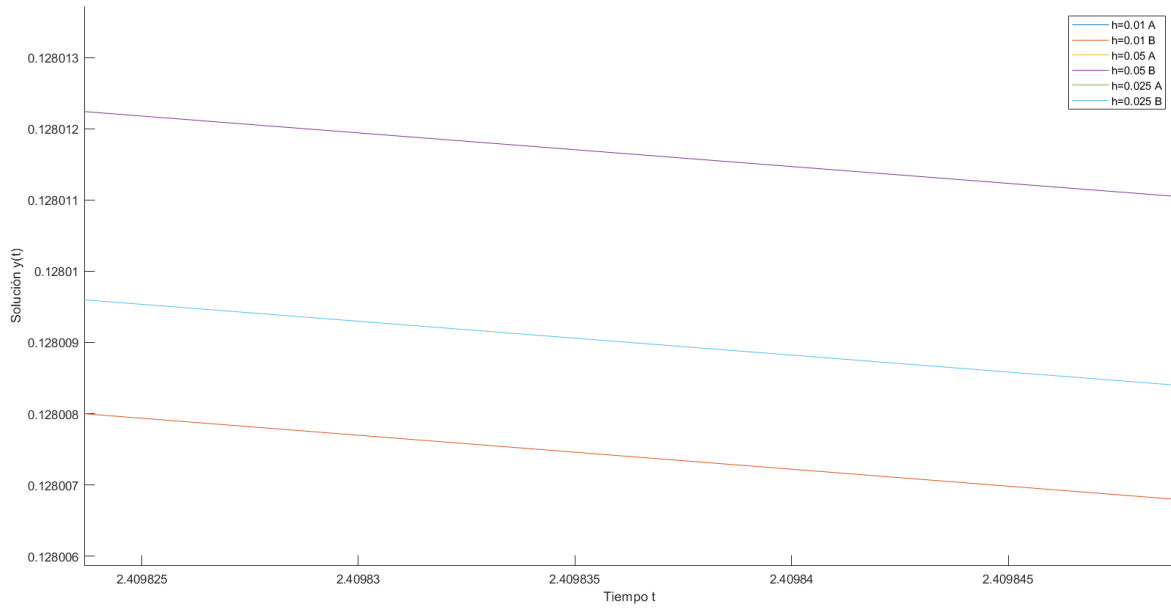


Figura 7: Separaciones para $y_B(t)$ en términos de h

Vemos como las separaciones relativas para Runge-Kutta son del orden de 10^{-6} unidades tanto para $y_A(t)$ como para $y_B(t)$. Cabe esperar que el resultado para $h = 0,025$ sea el más preciso y el más parecido al resultado exacto.

A continuación, probamos a cambiar las condiciones iniciales del problema y observamos como cambian las soluciones. Empleando el método de Runge-Kutta obtenemos el siguiente resultado:

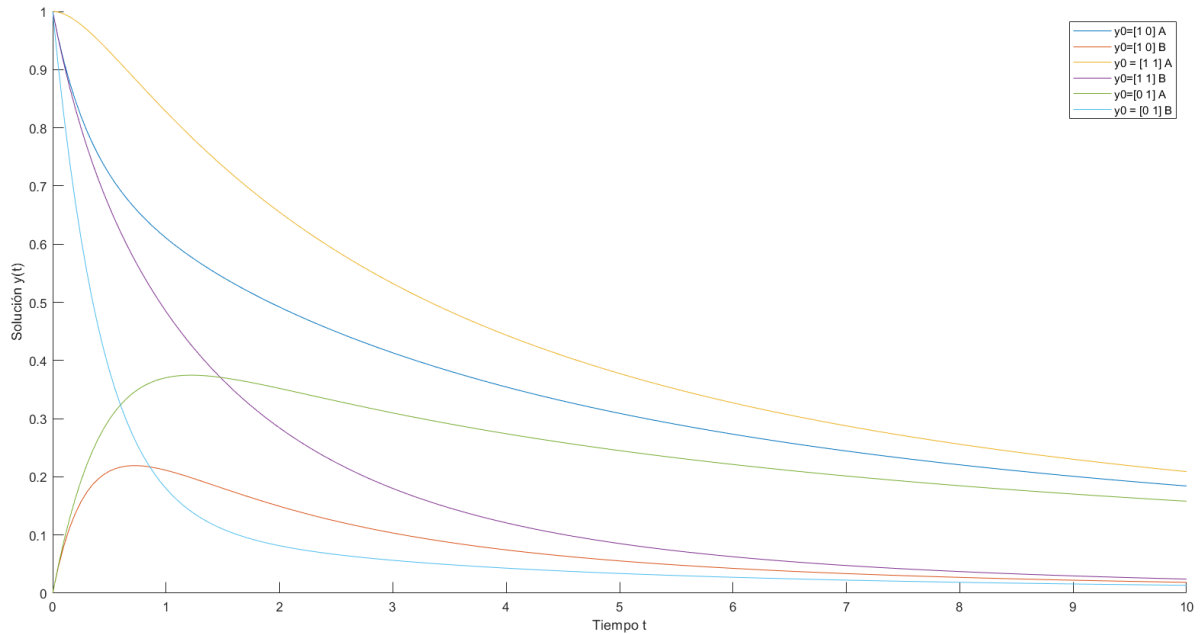


Figura 8: Conjunto de soluciones para distintas soluciones iniciales

Observamos como, independientemente de las condiciones iniciales, las trayectorias $y_A(t)$ e

$y_B(t)$ convergen a una misma solución a medida que t aumenta. Debido a esto, es razonable pensar que este problema representa un sistema químico cuyas concentraciones se encuentran fuera del equilibrio, y por tanto estas tienden al equilibrio tras pasar un tiempo lo suficientemente largo. Este comportamiento físico queda plasmado en las soluciones del sistema de ecuaciones diferenciales porque este está planteado de tal forma que, por intuición física, capture el comportamiento del sistema químico. Esto es así porque, en una gran cantidad de casos, los sistemas de ecuaciones diferenciales se postulan como un modelo sencillo del sistema que se quiere describir, de tal forma que sus soluciones capturen su dinámica lo mejor posible.