2. Repaso ODEs

Empezamos con una breve revisión de los métodos numéricos para aproximar soluciones a ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) ya que estos ejemplos resultan bastante didácticos y fijan las ideas fundamentales en las que se basan estas herramientas. Casi todos los textos acerca de ODEs abordan hasta cierto punto el tema, para una revisión bastante concreta recomiendo Numerical Recipies.

Consideramos un sistema de ecuaciones diferenciales escrito de la forma

$$\frac{d\mathbf{u}(x)}{dx} = \mathbf{F}\left(\mathbf{u}(x), x\right) \ . \tag{2.1}$$

La idea básica para buscar una aproximación numérica a la solución de este tipo de ecuaciones es sustituír las derivadas por diferencias finitas.

$$\frac{\mathbf{u}(x+\delta x) - \mathbf{u}(x)}{\delta x} \simeq \mathbf{F}\left(\mathbf{u}(x), x\right) \ . \tag{2.2}$$

Para esta aproximación particular, el error de la aproximación es “proporcional” a δx, por lo que se dice que es una aproximación a primer orden (el orden de la aproximación se refiere a la potencia de δx que acompaña al término dominante del error)

$$\frac{\mathbf{u}(x+\delta x) - \mathbf{u}(x)}{\delta x} \simeq \mathbf{F}\left(\mathbf{u}(x), x\right) + \delta x \left(\frac{1}{2!}\frac{d^2\mathbf{u}(x)}{dx^2} + ...\right) \ . \tag{2.3}$$

Una observación importante es que la aproximación por diferencias finitas a (2.2) no es única:

$$\frac{d\mathbf{u}(x)}{dx} \simeq \frac{\mathbf{u}(x+\delta x) - \mathbf{u}(x)}{\delta x} \simeq \frac{\mathbf{u}(x) - \mathbf{u}(x-\delta x)}{\delta x} \simeq \frac{\mathbf{u}(x+\delta x) - \mathbf{u}(x-\delta x)}{2\delta x} \tag{2.4}$$

Para continuar asumiremos que el vector del sistema $\mathbf{u}$ se reduce a una función, e introduciremos la notación discretizada

$$u(x) = u_n \ , \qquad u(x+\delta x) = u_{n+1}, \qquad \text{etc.}$$

Esta notación es fácilmente generalizable a sistemas. Retomando la primera aproximación que mostramos, en estos términos queda escrita como

$$u_{n+1} = u_n + \delta x F(u_n, x_n) \ . \tag{2.5}$$

Esta aproximación es conocida como *método de Euler*. Aparte de ser una aproximación a primer orden, resulta ser poco estable. Un ejemplo

$$y' = -ky \ , \qquad y = y_0 \exp\left[-k(x-x_0)\right] \ , \tag{2.6}$$

donde k es una constante. Utilizando el método de Euler

$$y_{n+1} = y_n + \delta x(-ky_n) = (1 - k\delta x)y_n \ . \tag{2.7}$$

La figura 1 muestra las aproximaciones obtenidas a la solución de esta ecuación para distintos intervalos δx. Para $\delta x > 2/k$ los nuevos valores se amplifican, a pesar de que la solución analítica decrece. Este análisis no es suficiente para mostrar que el método no es útil en general, pero al fallar para un caso tan sencillo no podemos esperar más de este. La estabilidad de un método numérico está siempre ligada a las ecuaciones para las cuales se está implementando.

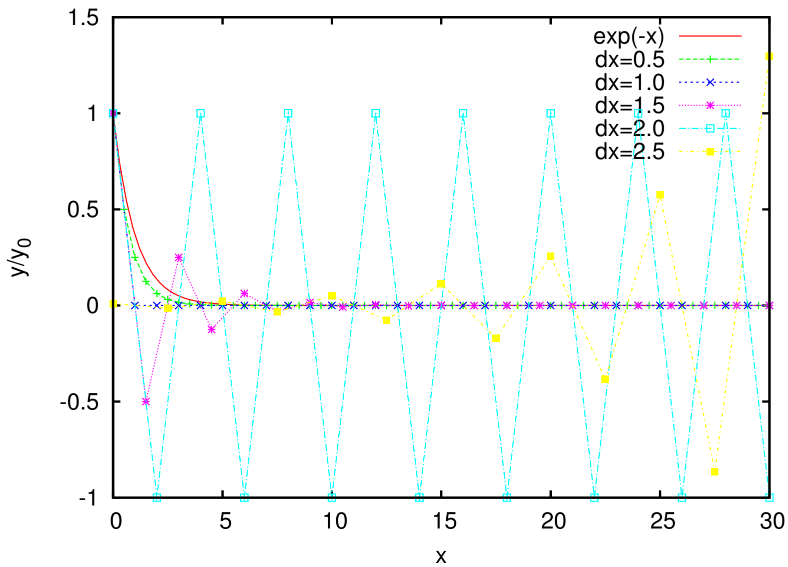

Figura 1: Aproximaciones a la solución de la ecuación $y' = -ky$, $y(0) = 1$, obtenidas con el método de Euler. La aproximación obtenida para el caso inestable $\delta x = 2.5$ está reescalada por un factor de 10^{-2} para ser observable a la misma escala.

Una forma de mejorar la aproximación (2.2) es considerar los términos correspondientes a derivadas de orden superior en la expansión en serie de Taylor. En general esta información no se tiene, pero la idea central de los métodos de Runge-Kutta es que esta puede estimarse a pratir de la información conocida. De esta forma se pueden obtener métodos con mayor orden de convergencia que resultan ser bastante robustos en la práctica. El método de Runge-Kutta de segundo orden consiste en estimar el valor de la derivada en el punto medio y con base a él hacer la aproximación

$$
\begin{aligned}
k_1 &= F\left(u_n,\ x_n\right)\ , \\
k_2 &= F\left(u_n + \frac{1}{2}k_1\delta x,\ x_n + \frac{1}{2}\delta x\right)\ , \\
u_{n+1} &= u_n + k_2\delta x + \mathcal{O}(\delta x^3)\ . \qquad (2.8)
\end{aligned}
$$

El método de Runge-Kutta de cuarto orden requiere de 4 evaluaciones estimando sucesivas correcciones a la derivada en el punto medio y en el nuevo punto y al final el paso se hace tomando un promedio de estas estimaciones

$$
\begin{aligned}
k_1 &= F\left(u_n,\ x_n\right)\ , \\
k_2 &= F\left(u_n + \frac{1}{2}k_1\,\delta x,\ x_n + \frac{1}{2}\delta x\right)\ , \\
k_3 &= F\left(u_n + \frac{1}{2}k_2\,\delta x,\ x_n + \frac{1}{2}\delta x\right)\ , \\
k_4 &= F\left(u_n + k_3\,\delta x,\ x_n + \delta x\,\right)\ , \\
u_{n+1} &= u_n + \frac{\delta x}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) + \mathcal{O}(\delta x^5)\ . \qquad (2.9)
\end{aligned}
$$

En las figuras 2 y 3 se muestran las aproximaciones obtenidas por los métodos de Euler, RK2 y RK4 y el error para la solución de la ecuación ejemplificada. Se observa que al aumentar el orden de convergencia en este caso la precisión mejora, esto se observa generalmente aunque no es algo que pueda darse por hecho.

Otra forma de mejorar la estabilidad de los métodos numéricos es considerar discretizaciones que dejan las ecuaciones para determinar los valores posteriores de la solución de manera implícita. Tomemos por ejemplo el método de Euler inverso

$$u_{n+1} = u_n + \delta x F(u_{n+1}, x_{n+1})\ . \qquad (2.10)$$

para el caso particular que vimos anteriormente

$$y_{n+1} = y_n + \delta x(-k y_{n+1})\ \rightarrow\ (1 + k\delta x)y_{n+1} = y_n\ . \qquad (2.11)$$

De esta forma los valores no se amplifican y es posible tomar mayores intervalos a costa únicamente de precisión. Esto se ejemplifica en la figura 4.

Para un sistema más complicado un método explícito puede verse como

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \mathbf{F}(\mathbf{u_n}, x_n)\ , \qquad (2.12)$$

mientras que en el caso implícito toma la forma

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \mathbf{F}(\mathbf{u}_{n+1}, x_{n+1})\ . \qquad (2.13)$$

Entonces en general para obtener $\mathbf{u}_{n+1}$ a partir de los valores al paso anterior $\mathbf{u}_n$, es necesario invertir una relación algebraica que puede ser altamente no trivial.

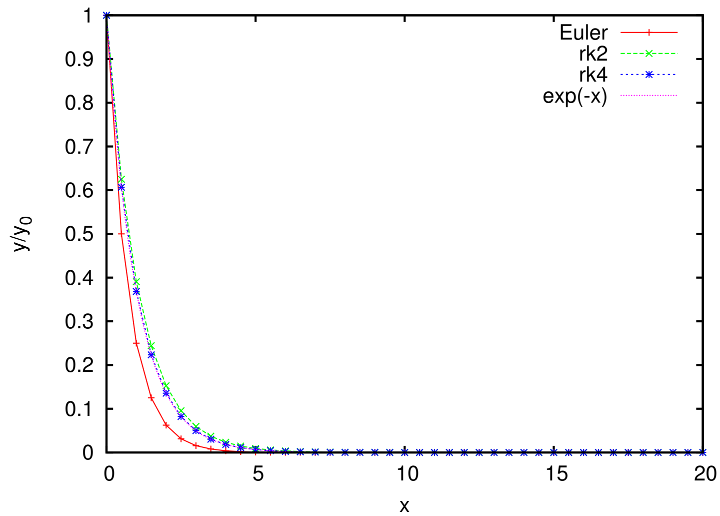

Figura 2: Comparación de las aproximaciones obtenidas a la solución de $y' = -ky$ con los métodos de Euler y Runge-Kutta de segundo y cuarto orden usando un intervalo $dx = 0.5$

2.1. Análisis de Convergencia

El uso de los métodos numéricos para obtener aproximaciones numéricas es inútil si no se puede establecer por medio de los mismos estimaciones de los errores de discretización. Para los métodos de diferencias finitas es posible hacer estimaciones de estos errores analizando las propiedades de convergencia de las soluciones al considerar resoluciones cada vez menores. Partimos de parametrizar la aproximación numérica en términos de la resolución $u_{\mathrm{aprox.}} := \bar{u}(\delta x)$, entonces pensando en que esta tiene una expansión en serie (propuesta por Richardson)

$$\bar{u}(\delta x) = u_0 + \delta x \frac{du_0}{d\delta x} + \frac{\delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{d\delta x^2} + \ldots \,. \tag{2.14}$$

Si la aproximación es consistente, el primer término que contribuye al error en la aproximación obtenida tiene por coeficiente δx^n con n el orden de discretización. Esto nos dice que el error con respecto a la solución analítica que se está aproximando, cuando se está en el régimen de convergencia, reescala como una potencia del error la cual está determinada por el orden de la discretización empleada. Usualmente una desviación de este comportamiento muestra que hay inconsistencias en la implementación que pueden ser debidas a errores o bien a consideraciones analíticas que no se han tomado en cuenta. Usualmente nos interesan las aproximaciones numéricas cuando no contamos con soluciones analíticas, pero usualmente los sistemas físicos poseen cantidades conservadas

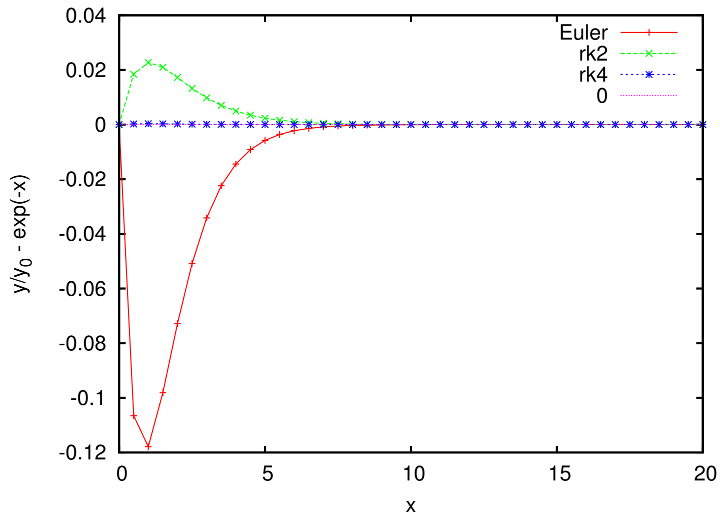

Figura 3: Comparación del error de las aproximaciones obtenidas a la solución de $y' = -ky$ con los métodos de Euler y Runge-Kutta de segundo y cuarto orden usando un intervalo $dx = 0.5$

dependientes de las variables del sistema, entonces es posible aplicar este criterio a la desviación de estas cantidades calculadas numéricamente respecto al valor conservado.

Una forma de hacer este tipo de análisis cuando no se cuenta con funciones del sistema que se conozca su comportamiento analítico es considerar diferencias entre soluciones a distintas resoluciones. De este modo al tomar la diferencia las contribuciones correspondientes a la solución analítica se cancelan

$$\bar{u}(\delta x_1) - \bar{u}(\delta x_2) = ({\delta x_1}^n - {\delta x_2}^n)\, e_n + ... \,, \tag{2.15}$$

donde sustituimos el término explícito por un coeficiente que marca el primer término de error que afecta la aproximación. Reescribiendo la resolución mayor como un múltiplo de la segunda (sin perder generalidad $\delta x_1 = \epsilon \delta x_2$), entonces

$$\bar{u}(\delta x_1) - \bar{u}(\delta x_2) = (\epsilon^n - 1)\, {\delta x_2}^n e_n + ... \,, \tag{2.16}$$

entonces de aquí podemos deducir que cuando el primer término de la expansión en potencias de δx, el error que podemos asignar a la aproximación es:

$$\delta u = {\delta x_2}^n e_n = \frac{\bar{u}(\epsilon \delta x) - \bar{u}(\delta x)}{\epsilon^n - 1} \,, \quad \epsilon > 0 \,. \tag{2.17}$$

Entonces podemos ver que el error depende del orden de convergencia, de modo que a segundo orden es aproximadamente la tercera parte de la diferencia entre dos resoluciones, mientras que a cuarto orden es la quinceava parte.

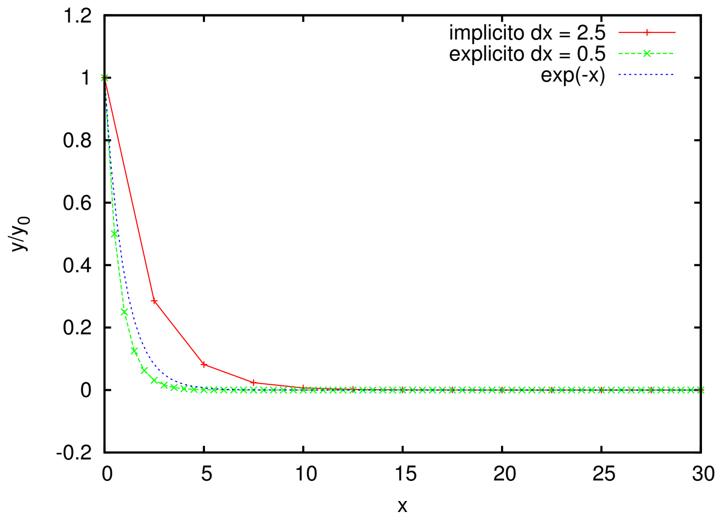

Figura 4: Comparación de las aproximaciones obtenidas con el método de Euler implícito y explícito

Un detalle que se debe tener en cuenta al tomar las diferencias eentre aproximaciones a distintas resoluciones es que los conjuntos de puntos discretos en los que están definidas no son los mismos. Entonces es necesario interpolar al mismo orden los valores de la aproximación a menor resolución para hacer coincidir los dominios numéricos. Cuando se refina por factores de 2 es posible hacer coincidir puntos de la malla más fina con los de la anterior y entonces solo es necesario interpolar puntos medios, a segundo orden esto es solo el promedio de los puntos inmediatos

$$u_{m+\frac{1}{2}} = \frac{u_m + u_{m+1}}{2} \; , \tag{2.18}$$

a cuarto orden

$$u_{m+\frac{1}{2}} = \frac{-u_{m-1} + 9u_m + 9u_{m+1} - u_{m+2}}{16} \; . \tag{2.19}$$

Para finalizar esta sección se incluyen las figuras 5, 6, 7 y 8 que muestran la convergencia de los métodos antes expuestos.

Ejercicios

Osciladores: armónico, forzado, péndulo (doble), etc.

$$u'' + k^2 u = 0 \; . \tag{2.20}$$

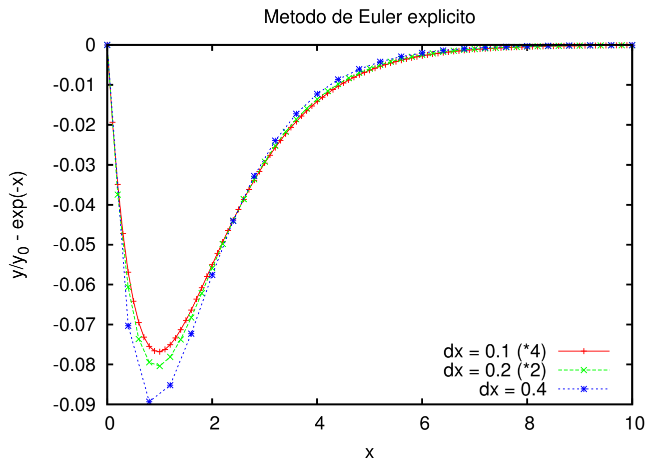

Figura 5: Análisis de convergencia para el método de Euler (primer orden).

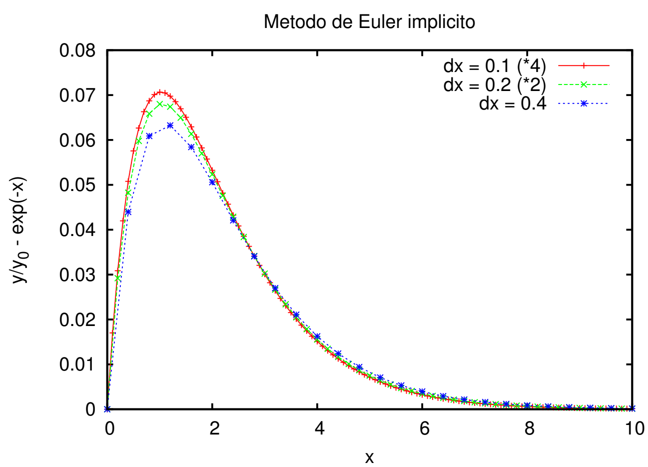

Figura 6: Análisis de convergencia para el método de Euler implícito (primer orden).

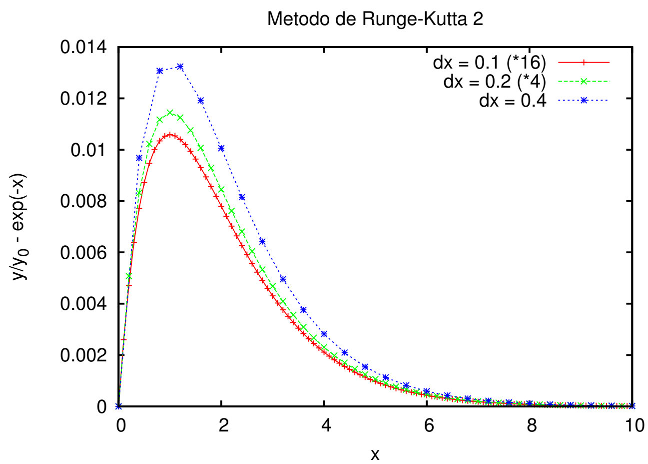

Figura 7: Análisis de convergencia para el método de Runge-Kutta (segundo orden).

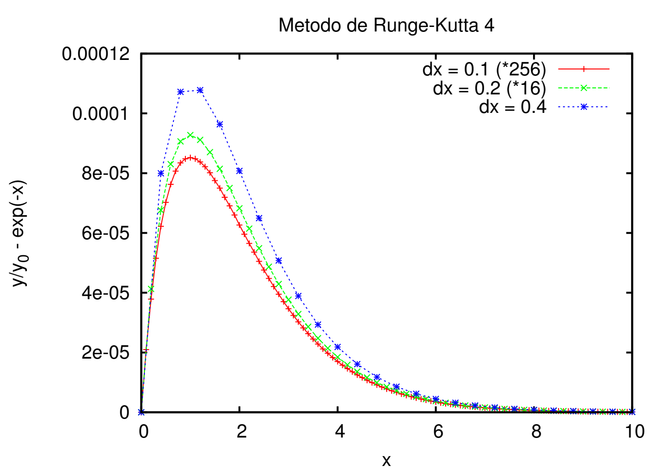

Figura 8: Análisis de convergencia para el método de Runge-Kutta (cuarto orden).