LABORATORIO 5

Unidad 6

Nicolás Delgado Camila Paladines

Computación Científica

Profesor: Hernán Darío Vargas Cardona, PhD

Junio 11 de 2021

RESUMEN

En este informe se describen los resultados conseguidos al implementar algoritmos en Python para la obtención de respuestas a problemas matemáticos, como lo es el cómputo de la solución de una Ecuación Diferencial Ordinaria (EDO) bajo un Problema de Valor Inicial (PVI) y bajo un Problema de Valor de Frontera (PVF). Las EDOs de primer orden bajo un PVI son calculadas mediante los Métodos de Euler, Serie de Taylor, Runge-Kutta (de orden 2 y 4), y Multipaso (de orden 2 y 4). Para las EDOs de orden superior se usa una estrategia de divide y conquista usando los métodos anteriormente mencionados. Las EDOs bajo un PVF son calculadas mediante el Método de Diferencias Finitas y el Método de Elementos Finitos (Colocación). Además, se realizan algunos análisis sobre los métodos utilizados aplicándolos a EDOs de diferente tipo, donde se observa su comportamiento dependiendo de diversos factores. También se calcula la complejidad computacional y la exactitud, con el fin de comparar los métodos y determinar cuál obtuvo mejores resultados para las EDOs usadas.

ABSTRACT

This report describes the results achieved by implementing algorithms in Python to obtain answers to mathematical problems, such as the computation of the solution of an Ordinary Differential Equation (ODE) under an Initial Value Problem (IVP) and under a Boundary Value Problem (BVP). The first-order ODEs under a IVP are calculated using the Euler, Taylor Series, Runge-Kutta (of order 2 and 4), and Multi-step (of order 2 and 4) Methods. A divide and conquer strategy using the above mentioned methods is used for the higher-order ODEs. The ODEs under a BVP are calculated using the Finite Difference Method and the Finite Element Method (Collocation). In addition, some analyses are performed on the methods used by applying them to ODEs of different types, where their behavior is observed depending on various factors. The computational complexity and accuracy are also calculated, in order to compare the methods and determine which one obtained better results for the ODEs used.

Contenido

Ι	Int	troducción		1	
II	\mathbf{N}	lateriales y Métodos		2	
1.	Mat	teriales		2	
2.	Mét	todos		2	
	2.1.	Ecuación Diferencial		. 2	
	2.2.	Problemas de Valor Inicial		. 4	
		2.2.1. Método de Euler		. 5	
		2.2.2. Métodos de Serie de Taylor		. 5	
		2.2.3. Métodos de Runge-Kutta		. 6	
		2.2.4. Métodos Multi-Paso		7	
	2.3.	ODEs de Orden Superior		. 7	
	2.4.	Problemas de Valor de Frontera para ODEs		8	
		2.4.1. Método de Diferencias Finitas		. 8	
		2.4.2. Método de Elementos Finitos		8	
II	ΙĐ	Resultados de las Simulaciones		9	
3.	OD	Es de Primer Orden		9	
	3.1.	Ejemplo 1		. 9	
	3.2.	Ejemplo 2		. 9	
	3.3.	Ejemplo 3		. 9	
4.	ODEs de Orden Superior				
5 .	Pro	oblemas de Valor de Frontera		9	

IV Discusión y Análisis	10
6. ODEs de Primer Orden	10
7. ODEs de Orden Superior	10
8. Problemas de Valor de Frontera	10
V Conclusiones	11
VI Referencias	12

Índice de Figuras

Índice de Tablas

Parte I Introducción

Parte II

Materiales y Métodos

1. Materiales

Para el desarrollo de esta unidad se usó Python 3.7, con las siguientes librerías:

- numpy. Para funciones matemáticas como promedio, desviación estándar, entre otros.
- pyplot. Para graficar los resultados en el plano y las estadísticas de los métodos con respecto a su exactitud y tiempo de ejecución.
- time. Para calcular los tiempos de cómputo de cada uno de los métodos en los Problemas de Valor Inicial y los Problemas de Valor de Frontera.
- sympy. Para modelar las variables t y y dentro de las operaciones de los métodos.

2. Métodos

2.1. Ecuación Diferencial

Una ecuación diferencial es una ecuación matemática que relaciona una función con sus derivadas. En las matemáticas aplicadas, las funciones usualmente representan cantidades físicas, las derivadas representan sus razones de cambio y la ecuación define la relación entre ellas. Como estas relaciones son muy comunes, las ecuaciones diferenciales juegan un rol primordial en diversas disciplinas, incluyengo la ingeniería, la física, la química, la economía y la biología.

En las matemáticas puras, las ecuaciones diferenciales se estudian desde perspectivas diferentes, la mayoría concernientes al conjunto de las soluciones de las funciones que satisfacen la ecuación. Solo las ecuaciones diferenciales más simples se pueden resolver mediante fórmulas explícitas; sin embargo, se pueden determinar algunas propiedades de las soluciones de una cierta ecuación diferencial sin hallar su forma exacta.

Si la solución exacta no puede hallarse, esta puede obtenerse numéricamente, mediante una aproximación usando computadoras. La teoría de sistemas dinámicos hace énfasis en el análisis cualitativo de los sistemas descritos por ecuaciones diferenciales, mientras que muchos métodos numéricos han sido desarrollados para determinar soluciones con cierto grado de exactitud.

La siguiente imagen muestra la transferencia de calor en una cámara de una bomba, creada resolviendo la ecuación de calor. El calor se genera internamente en la cámara y se enfría en los bordes, dando un estado estacionario de distribución de temperatura.

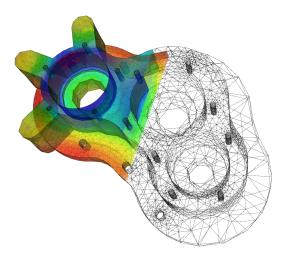


Figura 1: Transferencia de calor en una cámara de una bomba.

Las ecuaciones diferenciales pueden dividirse en varios tipos. Aparte de describir las propiedades de la ecuación en sí, las clases de las ecuaciones diferenciales pueden ayudar a buscar la elección de la aproximación a una solución. Es muy común que estas distinciones incluyan si la ecuación es: ordinaria/en derivadas parciales, lineal/no lineal, y homogénea/no homogénea. Esta lista es demasiado

grande; hay muchas otras propiedades y subclases de ecuaciones diferenciales las cuales pueden ser muy útiles en contextos específicos. Algunas de ellas son:

- Ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE).
- Ecuación en derivadas parciales.
- Ecuaciones diferenciales lineales.
- Ecuaciones diferenciales no lineales.
- Ecuaciones semilineales y cuasilineales.

2.2. Problemas de Valor Inicial

Una ecuación diferencial ordinaria (ODE) y'=f(t,y) no tiene una solución única. En general, hay una familia infinita de funciones que satisfacen la ecuación diferencial. Para encontrar una solución particular se debe especificar el valor denotado por y_0 en algún punto t_0 . Entonces, se requiere conocer:

$$y(t_0) = y_0$$

Esto se conoce como el problema de valor inicial. La ODE gobierna la evolución dinámica del sistema en el tiempo, desde su valor inicial y_0 en el tiempo t_0 . Lo que se busca es una función y(t) que describe el estado de un sistema como función del tiempo.

La solución analítica de una ODE es una función que se computa en cualquier punto t. Por el contrario, una solución numérica es una tabla de valores aproximados de la solución verdadera evaluados en un conjunto discreto de datos.

Los valores de la solución aproximada se generan paso a paso en incrementos discretos en el tiempo. Por esta razón, los métodos numéricos para resolver ODEs se conocen como métodos de variable discreta.

2.2.1. Método de Euler

Se busca simular el comportamiento del sistema gobernado por la ODE. Empezando en t_0 con el valor inicial dado y_0 , se desea seguir la trayectoria dictada por la ODE. La evaluación de $f(t_0,y_0)$ nos dice la pendiente o inclinación de la trayectoria en ese punto. Se usa esta información para predecir el valor y_1 de la solución en el tiempo futuro $t_1 = t_0 + h$, siendo h un incremento adecuado. Considere la siguiente serie de Taylor:

$$y(t + h) = y(t) + y'(t)h + \frac{y''(t)}{2!}h^2 + \cdots +$$

$$=y(t)+f(t,y(t))h+\frac{y^{\prime\prime}(t)}{2!}h^2+\cdots+$$

El método de Euler elimina los términos de segundo orden y superior para obtener los valores de la solución aproximada:

$$y_{k+1} = y_k + f(t_k, y_k)h_k$$

Lo cual permite saltar del tiempo t_k a $t_{k+1} = t_k + h_k$. Equivalentemente, si se reemplaza la derivada en la ecuación diferencial y'(t) = f(t,y) por la representación en diferencias finitas, se obtiene una ecuación algebráica:

$$\frac{y_{k+1} - y_k}{h_k} = f(t_k, y_k)$$

2.2.2. Métodos de Serie de Taylor

Del método de Euler se obtiene de la expansión en series de Taylor. Si se toman más términos en la serie de Taylor, se pueden obtener más métodos de paso sencillo (*single-step*) para órdenes más altos. Por ejemplo, tomando un término adicional en la serie de Taylor:

$$y(t + h) = y(t) + y'(t)h + \frac{y''(t)}{2!}h^2 + \frac{y'''(t)}{3!}h^3 + \cdots +$$

Se obtiene el método de segundo orden:

$$y_{k+1} = y_k + y_k' h_k + \frac{y_k''}{2} h_k^2$$

Nótese que se requiere la segunda derivada de y''. Esto se puede obtener diferenciando y'=f(t,y) usando la regla de la cadena:

$$y'' = f_t(t,y) + f_y(t,y)y' = f_t(t,y) + f_y(t,y)f(t,y)$$

2.2.3. Métodos de Runge-Kutta

Son métodos de paso sencillo que son similares a los métodos de serie de Taylor, pero no requieren la computación de derivadas de orden superior. En vez de eso, se simula el efecto de las derivadas superiores evaluando f varias veces entre t_k y t_{k+1} . La idea básica se ilustra por el método de Runge-Kutta de orden 2, conocido como el método de Heun.

$$f_t + f_{y_f} = \frac{f(t + h, y + h_f) - f(t, y)}{h}$$

Con esta aproximación, el método de Taylor de segundo orden se convierte a (el cual es de **exactitud de orden 2**):

$$y_{k+1} = y_k + \frac{f(t_k, y_k) + f(t_k + h_k, y_k + h_{k_f}(t_k, y_k))}{2} h_k$$

El método de Runge-Kutta mejor conocido y más empleado es el *esquema* clásico de orden 4:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$
 donde:

- $\bullet k_1 = f(t_k, y_k)h_k,$
- $k_2 = f(t_k + \frac{h_k}{2}, y_k + \frac{k_1}{2})h_k$

•
$$k_3 = f(t_k + \frac{h_k}{2}, y_k + \frac{k_2}{2})h_k$$

$$k_4 = f(t_k + h_k, y_k + k_3)h_k.$$

2.2.4. Métodos Multi-Paso

Estos métodos usan informacién en más de un punto previo para estimar la solución en el siguiente. Por esta razón, a veces se conocen como métodos con memoria. Los métodos lineales *multi-paso* tienen la siguiente forma general:

$$y_{k+1} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_{k+1-i} + h \sum_{i=0}^{n} \beta_i f(t_{k+1}, y_{k+1-i})$$

Los parámetros α_i y β_i se determinan con interpolación polinómica. Si $\beta_0=0$, el método es explícito, de lo contrario es implícito. La fórmula explícita del método de dos pasos es:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{2} (3y'_k - y'_{k-1})h$$

Uno de los métodos multi-paso más populares es el método explícito de cuarto orden de Adams — Bashforth:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{24} \left(55y_k' - 59y_{k-1}' + 37y_{k-2}' - 9y_{k-3}' \right) h$$

2.3. ODEs de Orden Superior

Las ecuaciones diferenciales de orden superior ocurren frecuentemente en la práctica, pero pueden ser transformadas a un sistema equivalente de primer orden de la siguiente manera:

$$\mathfrak{u}^{(\mathfrak{n})} = f(t,\mathfrak{u},\mathfrak{u}',\ldots,\mathfrak{u}^{(\mathfrak{n}-1)})$$

La ecuación de orden \mathfrak{n} -ésimo define las \mathfrak{n} nuevas incógnitas $y_1(t)=\mathfrak{u},$ $y_2(t)=\mathfrak{u}',\ldots,y_\mathfrak{n}(t)=\mathfrak{u}^{(\mathfrak{n}-1)}, \text{ tal que la ecuación original se convierte en un sistema de primer orden con <math>\mathfrak{n}$ ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} y_{1}^{'} \\ y_{2} \\ \vdots \\ y_{n-1}^{'} \\ y_{n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{2} \\ y_{3} \\ \vdots \\ y_{n} \\ f(t, u, u', \dots, u^{(n-1)}) \end{bmatrix}$$

2.4. Problemas de Valor de Frontera para ODEs

2.4.1. Método de Diferencias Finitas

2.4.2. Método de Elementos Finitos

Este método aproxima la solución de un PVF a una combinación lineal de funciones base ϕ_i , típicamente monomios. La aproximación tiene la forma:

$$y(t) \approx u(t) = \sum_{i=1}^{n} x_i \varphi_i(t)$$

Parte III

Resultados de las Simulaciones

- 3. ODEs de Primer Orden
- 3.1. Ejemplo 1
- 3.2. Ejemplo 2
- 3.3. Ejemplo 3
- 4. ODEs de Orden Superior
- 5. Problemas de Valor de Frontera

Parte IV

Discusión y Análisis

- 6. ODEs de Primer Orden
- 7. ODEs de Orden Superior
- 8. Problemas de Valor de Frontera

Parte V Conclusiones

$\begin{array}{c} {\rm Parte\ VI} \\ {\bf Referencias} \end{array}$

- Material del curso, disponible en BlackBoard
- \blacksquare Bornemann, F., 2016. Numerical linear algebra. 1st ed. Simson, W.
- Mathews, J., Fink, K., Fernández Carrión, A. & Contreras Márquez, M., 2011. Métodos Numéricos con MATLAB. 3rd ed. Madrid: Pearson Prentice Hall.
- Librería Numpy
- Librería Pyplot (Matplotlib)
- <u>Librería Time</u>
- Librería Sympy