

TEMA 6.

ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS E INTEGRACIÓN NUMÉRICA

1. Introducción
2. Nomenclatura
3. Ecuaciones diferenciales ordinarias
4. Métodos explícitos de resolución de ecuaciones diferenciales
5. Métodos implícitos de resolución de ecuaciones diferenciales
6. Métodos predictor-corrector
7. Sistemas de ecuaciones diferenciales acoplados
8. Conversión de una ecuación diferencial de orden n en un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias
9. Estabilidad
10. Evaluación de integrales
11. RESUMEN
12. Programación en Matlab®

1. Introducción

Una ecuación diferencial es una ecuación en la que intervienen derivadas de una o más funciones. Dependiendo del número de variables independientes respecto de las que se deriva, las ecuaciones diferenciales se dividen en:

- Ecuaciones diferenciales ordinarias: aquellas que contienen derivadas respecto a una sola variable independiente.
- Ecuaciones en derivadas parciales: aquellas que contienen derivadas respecto a dos o más variables.

En este tema se verán los métodos numéricos más importantes de resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias, y de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, a la vez que se tratará otro tema muy relacionado: los métodos de integración numérica de valores discretos.

2. Nomenclatura

$f_x(x,y)$	derivada parcial de $f(x,y)$ respecto x
$f_y(x,y)$	derivada parcial de $f(x,y)$ respecto y
$h=\Delta x$	incremento de la variable independiente
i	subíndice- punto en el que se calcula
j	subíndice- ecuación del sistema de ecuaciones
x	variable independiente
y	variable dependiente
y'	derivada respecto de la variable independiente (dy/dx)

3. Ecuaciones diferenciales ordinarias

Un sistema de ecuaciones diferenciales puede venir dado por una serie de expresiones de la forma:

$$F\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) = 0, \text{ en su forma mas habitual } \frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{EDO.(1)}$$

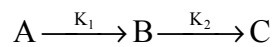
Donde tanto 'F' como 'f' son vectores de n funciones; 'y' es un vector de n variables dependientes y 'x' es la variable independiente.

Para encontrar una solución para este sistema necesitamos un valor para y para un cierto valor dado de la variable x.

$$y = y_0 \quad \text{para } x = x_0$$

En este caso tenemos un problema de valor inicial. Nos centraremos en este tema en la resolución de ecuaciones diferenciales de condición o valor inicial.

Un ejemplo de este tipo de problemas es el descrito por las reacciones de primer orden, con el tiempo como variable independiente:



$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \quad \text{Valores iniciales típicos son :}$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B \quad C_{A0} = 1, \quad C_{B0} = 0, \quad C_{C0} = 0$$

Trabajando con un método numérico no se obtiene una función continua como solución, sino una serie de valores discretos y_i separados en un cierto intervalo de la variable independiente Δx . Este intervalo de variación de la variable independiente 'h' se suele llamar también "paso de integración".

Se debe tener en cuenta que los valores de y_i nunca serán totalmente exactos sino solamente una aproximación al verdadero valor.

Si llamamos $y(x_i)$ al verdadero valor de 'y' para $x=x_i$ la diferencia entre:

$$\varepsilon_i = \|y_i - y(x_i)\| \quad \text{es el llamado error de truncamiento local.}$$

El objetivo de los diferentes métodos es mantener el error de truncamiento local en un valor lo más pequeño posible.

4. Métodos explícitos de resolución de ecuaciones diferenciales

Los métodos explícitos son aquellos que utilizan información de puntos anteriores para calcular el valor en un nuevo punto. Por ejemplo, usan información del punto (x_k, y_k) para calcular el punto (x_{k+1}, y_{k+1})

4.1. Método de Euler Explícito

El método de Euler explícito es el más simple para integrar numéricamente una ecuación diferencial de primer orden. En él, la condición inicial se usa para calcular la pendiente de la función en ese mismo punto.

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} = f(x_0, y_0) \quad \text{EDO.(2)}$$

Posteriormente, suponiendo que la pendiente de función permanece constante una pequeña distancia, se estima el valor de la función en ese punto de acuerdo con (3).

$$f(x_0 + h, y_0) = f(x_0, y_0) + h f(x_0, y_0) \quad \text{EDO.(3)}$$

Después, este nuevo punto se usa para calcular la pendiente de la función en ese punto. La fórmula de recursión quedaría:

$$y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i) \quad \text{EDO.(4)}$$

Esta relación de recursión también puede ser deducida del desarrollo de las series de Taylor. Si lo hiciéramos así, podríamos comprobar que el error de truncamiento dependerá de Δx^2 , o lo que es lo mismo h^2 , correspondiente a la omisión de términos de orden 2 o superior. Sin embargo, si bien el error de truncamiento local es proporcional a h^2 el error global es proporcional a h .

Un ejemplo de la aplicación de este método se puede observar en la Figura 1.

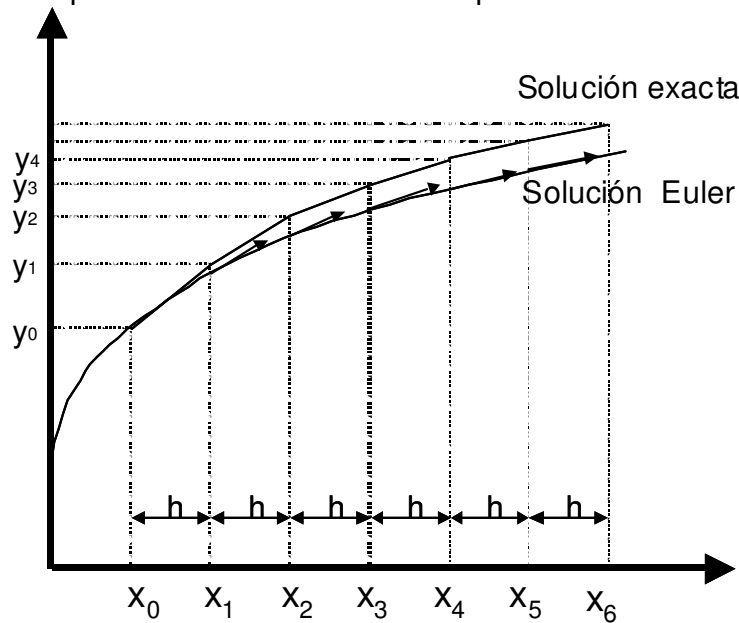


Figura 1. Ejemplo de solución numérica usando el método de Euler.

4.2. Métodos de Runge-Kutta

4.2.1. Método de Runge-Kutta de orden 2

Aunque el método más utilizado de los denominados métodos de Runge Kutta es el de cuarto orden (RK4), los principios en que se basa el método se ilustran mejor presentando el método de Runge Kutta de 2º orden.

El desarrollo en serie de una función $f(x)$ en las cercanías de un punto $x=a$ viene dado por:

$$f(x) = f(a) + (x-a) \frac{f'(a)}{1!} + (x-a)^2 \frac{f''(a)}{2!} + \dots$$

De esta forma, si se desarrolla el valor de y_{i+1} en las proximidades de y_i se obtiene:

$$y_{i+1} = y_i + h y'_i + \frac{1}{2} h^2 y''_i + C_T h^3 + \dots \quad \text{EDO.(5)}$$

donde C_T es un término que incluye las terceras derivadas y potencias de h superiores a 3. Las derivadas y'_i y las segundas derivadas y''_i se deben expresar en función de $f(x,y)$ y de sus derivadas parciales con respecto a 'y' y a 'x'.

Recordando que:

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{EDO.(6)}$$

Utilizando la regla de la cadena para derivar una función de dos variables, podemos diferenciar la ecuación EDO.(6) con respecto a t , para obtener:

$$y'' = \frac{dy'}{dx} = \frac{d}{dx} f(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \frac{dy}{dx} = \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} f(x, y)$$

EDO.(7)

Sustituyendo las expresiones EDO.(6) y EDO.(7) en el desarrollo en serie anterior EDO.(5), obtenemos:

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + h f(x, y) + \frac{1}{2} h^2 f_x(x, y) + \frac{1}{2} h^2 f_y(x, y) f(x, y) + C_T h^3}$$

EDO.(8)

donde $f_x(x, y) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x}$, $f_y(x, y) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}$

Por otra parte el método de Runge Kutta de 2º orden, propone expresar y_{i+1} como una combinación lineal de dos valores de la función:

$$y_{i+1} = y_i + A h f_0 + B h f_1 \quad \text{EDO.(9)}$$

donde

$$\begin{aligned} f_0 &= f(x, y) \\ f_1 &= f(x + Ph, y + Qh f_0) \end{aligned} \quad \text{EDO.(10)}$$

en estas ecuaciones, A, B, P, Q son constantes que debemos determinar.

Si desarrollamos en serie la expresión obtenida para f_1 en EDO.(10):

$$f_1 = f(x, y) + Ph f_x(x, y) + Qh f_y(x, y) f(x, y) + \dots \quad \text{EDO. (11)}$$

sustituyendo ahora en EDO.(9) nos queda:

$$y_{i+1} = y_i + (A+B)h f(x, y) + BPh^2 f_x(x, y) + BQh^2 f_y(x, y) f(x, y) + \dots \quad \text{EDO. (12)}$$

Comparando términos de las ecuaciones EDO.(12) y EDO.(8) llegamos a que:

$$A+B=1; \quad BP=\frac{1}{2}; \quad BQ=\frac{1}{2} \quad \text{EDO. (13)}$$

Dado que sólo tenemos 3 ecuaciones y 4 incógnitas el sistema planteado en la ecuación EDO.(13) no está determinado, lo que nos permite escoger uno de los coeficientes. Existen diferentes opciones, pero las más conocidas y utilizadas son las siguientes:

CASO 1: $A=1/2$. Esta elección lleva a que $B=1/2$; $P=1$; $Q=1$; y por lo tanto:

$$y_{i+1} \approx y_i + \frac{h}{2} [f(x, y) + f(x + h, y + h f(x, y))] \quad \text{EDO.(14)}$$

el resultado es el método de **Heun**

CASO 2: $A=0$. Esta elección lleva a $B=1$; $P=1/2$; y $Q=1/2$. y por lo tanto:

$$y_{i+1} = y_i + h f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} f(x, y)\right) \quad \text{EDO. (15)}$$

el resultado es el **método modificado de Euler-Cauchy**

4.2.2. Método de Runge Kutta de 4 orden

El procedimiento para establecer el método de Runge Kutta de 4º orden es similar al visto anteriormente. Sin embargo no vamos a entrar en detalles. En este caso el desarrollo en serie se realiza hasta el término de 4 orden.

Análogamente a RK2 se plantea la resolución como:

$$y_{i+1} = y_i + w_1 k_1 + w_2 k_2 + w_3 k_3 + w_4 k_4 \quad \text{EDO. (16)}$$

donde:

$$\begin{aligned} k_1 &= h f(x_i, y_i) \\ k_2 &= h f(x_i + a_1 h, y_i + b_1 k_1) \\ k_3 &= h f(x_i + a_2 h, y_i + b_2 k_1 + b_3 k_2) \\ k_4 &= h f(x_i + a_3 h, y_i + b_4 k_1 + b_5 k_2 + b_6 k_3) \end{aligned} \quad \text{EDO. (17)}$$

Procediendo como en el caso anterior aparecería un sistema de 11 ecuaciones con 13 variables desconocidas. Fijando $a_1=1/2$, y $b_2=0$; se obtiene finalmente que:

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

donde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h k_1}{2}\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h k_2}{2}\right) \\ k_4 &= f(x_i + h, y_i + h k_3) \end{aligned} \quad \text{EDO. (18)}$$

Este método de cuarto orden presenta un error de truncamiento proporcional a Δx^5 , mucho menor que el correspondiente al método de Euler que era proporcional a Δx^2 . Un ejemplo gráfico de la resolución de un problema se representa en la Figura 2.

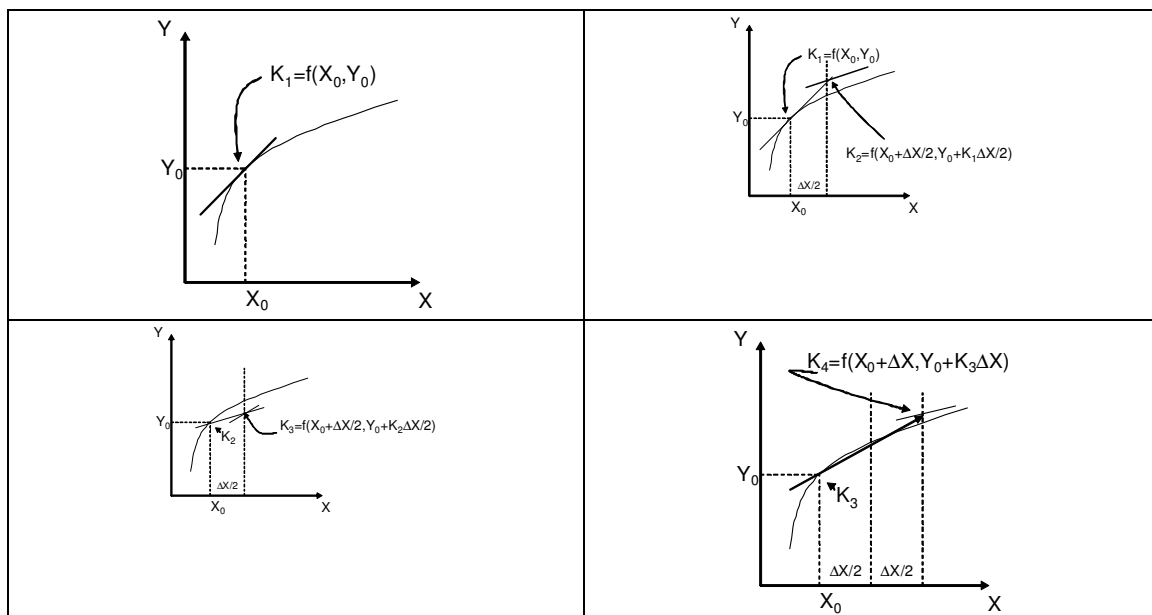


Figura 2. Ilustración gráfica del método de Runge Kutta de 4º orden.

5. Métodos implícitos de resolución de ecuaciones diferenciales

En los dos apartados anteriores, se han usado métodos explícitos, es decir, para el cálculo del nuevo punto de la función no se usaban datos correspondientes a este nuevo punto.

Existe una familia de métodos de resolución basados en la utilización del valor de la función en el nuevo punto que queremos conocer, con lo cual debe ser resuelta una ecuación implícita, por algunos de los métodos ya vistos.

Los dos métodos mas extendidos son el de Euler implícito y el método trapezoidal.

En el Método de **Euler Implícito**, la formula de recursión vendría dada por:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_{i+1}, y_{i+1})\Delta x \quad \text{EDO. (19)}$$

Esto nos lleva a resolver la ecuación

$$y_{i+1} - y_i - f(x_{i+1}, y_{i+1})\Delta x = 0$$

en cada incremento. Esta ecuación en principio será no lineal, y será resuelta por un método apropiado.

El **método trapezoidal** se basa en la aplicación del método de los trapecios (ver apartado 10.2 de este mismo tema) entre los puntos (x_i, y_i) y (x_{i+1}, y_{i+1}) . La fórmula de recursión que aparece es pues:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta x}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})] \quad \text{EDO. (20)}$$

que también deberá resolverse en cada incremento.

6. Métodos predictor-corrector

Los métodos de Euler, Heun, o Runge-Kutta, son métodos de paso simple, porque sólo usan información de un punto para calcular el siguiente. Por ejemplo, sólo se usa información del punto (x_0, y_0) para calcular el punto (x_1, y_1) . Después de haber calculado varios puntos, sería sin embargo interesante utilizar información de varios puntos anteriores para calcular el siguiente.

Como ejemplo presentaremos las líneas generales del **método de Adams-Bashforth-Moulton** de cuarto orden. El método necesita $y_{i-3}, y_{i-2}, y_{i-1}, y_i$ para

calcular y_{i+1} . Por supuesto, para comenzar el cálculo necesitamos algún método auxiliar para calcular (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (x_3, y_3) .

Una ventaja de este tipo de métodos es que el error de truncamiento local se puede determinar en cada paso y añadir un término de corrección que mejore la precisión del sistema en cada paso. También es posible determinar si el tamaño de paso es lo suficientemente pequeño para la precisión deseada o bien se puede aumentar para acelerar la velocidad de cálculo.

Debemos pues resolver la ecuación diferencial:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

Entre los puntos x_i y x_{i+1} conociendo el valor de y_i en el punto x_i , o lo que es lo mismo:

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i, y_i) dx \quad \text{EDO. (21)}$$

La primera etapa del método usa la aproximación polinómica de Lagrange utilizando los puntos (x_{i-3}, f_{i-3}) , (x_{i-2}, f_{i-2}) , (x_{i-1}, f_{i-1}) , (x_i, f_i) . Si lo integramos sobre el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ obtenemos *el predictor de Adams-Bashforth*:

$$p_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (-9 f_{i-3} + 37 f_{i-2} - 59 f_{i-1} + 55 f_i) \quad \text{EDO. (22)}$$

El corrector se desarrolla de forma similar. El valor p_{i+1} que se acaba de obtener se puede utilizar para construir un segundo polinomio de Lagrange utilizando los puntos (x_{i-2}, f_{i-2}) , (x_{i-1}, f_{i-1}) , (x_i, f_i) y el nuevo punto que se acaba de obtener $(x_{i+1}, f_{i+1}) = (x_{i+1}, f(x_{i+1}, p_{i+1}))$. Si lo integramos nuevamente sobre el intervalo $[t_k, t_{k+1}]$ obtenemos *el corrector de Adams Moulton*:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (f_{i-2} - 5f_{i-1} + 19f_i + 9f_{i+1}) \quad \text{EDO. (23)}$$

El error de truncamiento local viene dado aproximadamente por:

$$\varepsilon_i = y(x_{i+1}) - y_{i+1} \approx \frac{-19}{270} (y_{i+1} - p_{i+1}) \quad \text{EDO. (24)}$$

La ecuación (24) se puede utilizar para cambiar el tamaño del paso de integración h . Aunque existen criterios más elaborados un método sencillo podría ser el siguiente:

$$\text{Si } \frac{19}{270} \frac{|y_{i+1} - p_{i+1}|}{|y_{i+1}| + \text{Small}} > \text{Err Rel} \quad \text{entonces hacer } h = \frac{h}{2}$$

$$\text{Si } \frac{19}{270} \frac{|y_{i+1} - p_{i+1}|}{|y_{i+1}| + \text{Small}} < \frac{\text{Err Rel}}{100} \quad \text{entonces hacer } h = 2h$$

Donde los valores Small y ErrRel (error relativo) se fijarán dependiendo de la precisión deseada. Por ejemplo si Small=10⁻⁵ y ErrRel=5·10⁻⁶ si el resultado no se parece en 5 cifras significativas entonces se disminuye a la mitad el intervalo de paso y si se parecen en más de 7 entonces se aumenta.

Señalar que si disminuimos el intervalo de paso debemos obtener los puntos para el polinomio de Lagrange para la siguiente etapa por interpolación, con objeto de que estén separados la nueva distancia h.

7. Sistemas de ecuaciones diferenciales acoplados

El problema general de un sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas vendría dado por EDO. (11).

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y)$$

$$\frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y)$$

EDO. (25)

$$\frac{dy_n}{dx} = f_n(x, y)$$

Siendo conocido el valor de todas las funciones para un punto inicial.

Ejemplos de estos problemas, incluyen reactores de flujo de pistón no isotermos, reactores discontinuos con múltiples reacciones, sistemas de control multivariables, etc.

En este apartado veremos las extensiones de los métodos vistos para la resolución de una única ecuación diferencial.

7.1. Método de Euler explícito

Este método puede ser rápidamente extendido al caso de un sistema de n ecuaciones diferenciales. El algoritmo de cálculo queda:

$$y_{1,j+1} = y_{1,j} + f_1(x_j, y_j)\Delta t$$

$$y_{2,j+1} = y_{2,j} + f_2(x_j, y_j)\Delta t$$

$$y_{n,j+1} = y_{n,j} + f_n(x_j, y_j)\Delta t$$

EDO. (26)

donde y_j corresponde a un vector que engloba todos los términos de y ($y_{1,j}, y_{2,j}, \dots, y_{n,j}$).

Puesto que esta basado en el método de Euler, este será un método de primer orden, con lo cual el error será proporcional a Δx^2 . Debemos especificar que la variable que más rápidamente cambie, será la que limite la longitud de exploración utilizada para mantener la estabilidad.

7.2. Método de Runge-Kutta

De igual forma que para el método explícito de Euler, la extensión del método de Runge-Kutta puede ser utilizada directamente para la resolución de sistema de n ecuaciones diferenciales acopladas. Consideremos el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

La formula de recursión para este método de Runge-Kutta vendría dado por:

$$y_{i,j+1} = y_{i,j} + \frac{\Delta t}{6} [k_{1,i,j} + 2k_{2,i,j} + 2k_{3,i,j} + k_{4,i,j}] \quad \text{EDO. (27)}$$

donde $y_{i,j}$ es el valor de la i variable dependiente después de j pasos en t y:

$$\begin{aligned} k_{1,i,j} &= f_i(x, y_{1,j}, y_{2,j}, y_{3,j}, \dots, y_{n,j}) \\ k_{2,i,j} &= f_i\left(x + \frac{h}{2}, y_{1,j} + \frac{h}{2}k_{1,i,j}, \dots, y_{n,j} + \frac{h}{2}k_{1,n,j}\right) \\ k_{3,i,j} &= f_i\left(x + \frac{h}{2}, y_{1,j} + \frac{h}{2}k_{2,i,j}, \dots, y_{n,j} + \frac{h}{2}k_{2,n,j}\right) \\ k_{4,i,j} &= f_i(x + h, y_{1,j} + hk_{1,i,j}, \dots, y_{n,j} + hk_{1,n,j}) \end{aligned} \quad \text{EDO. (28)}$$

De forma análoga se pueden modificar los métodos implícitos y los predictor-corrector.

8. Conversión de una ecuación diferencial de orden n en un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias

Consideremos el caso de la siguiente ecuación diferencial de segundo orden:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + A(x)\frac{dy}{dx} + B(x)y + C(x) = 0 \quad \text{EDO. (29)}$$

sujeta a las siguientes condiciones iniciales:

$$y(x_0) = a$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} = b$$

Haciendo el cambio de variable $z = \frac{dy}{dx}$ y reordenando, la ecuación diferencial queda:

$$\frac{dz}{dx} = -A(x)z - B(x)y - C(x)$$

$$\frac{dy}{dx} = z$$

Con lo cual la ecuación diferencial de segundo orden que teníamos se ha reducido a un sistema de 2 ecuaciones diferenciales de orden 1 que pueden ser resueltas por cualquiera de los métodos vistos en el apartado anterior.

La extensión al caso general de una ecuación diferencial de orden n es evidente, considerando los siguientes cambios de variables.

$$z_1 = \frac{dy}{dx}$$

$$z_2 = \frac{dz_1}{dx} = \frac{d^2 y}{dx^2} \quad \text{EDO. (30)}$$

$$z_{n-1} = \frac{dz_{n-2}}{dx} = \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}}$$

9. Estabilidad

A parte de la precisión en los cálculos, los diferentes algoritmos necesitan además ser estables. Es decir, que el error disminuya a medida que procedemos en el cálculo y que la solución numérica no presente oscilaciones alrededor de la solución correcta.

Ilustraremos el fenómeno a partir de la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dy}{dx} = -\lambda y \quad y(0)=1 \quad \text{donde } \lambda \text{ es real y positivo.} \quad \text{EDO. (31)}$$

Si escribiéramos la ecuación como la suma de una solución exacta más un error, la ecuación debe cumplirse también para el error.

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = \lambda\varepsilon \quad \text{EDO. (32)}$$

Si se examina el error en sucesivos pasos, un método será estable si el error decae en cada paso sucesivo, y será inestable si el error crece en cada iteración.

Por ejemplo aplicando el método de Euler para t_n, t_{n+1}

$$\frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{h} = -\lambda\varepsilon_n \quad ; \quad \varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n(1 - \lambda h)$$

La estabilidad requiere $\frac{|\varepsilon_{n+1}|}{|\varepsilon_n|} \leq 1$

por lo tanto el método de Euler requiere $|1 - \lambda h| \leq 1$; $0 \leq \lambda h \leq 2$. Así el método de Euler es inestable para incrementos de tiempo mayores que $\frac{2}{|\lambda|}$

Si lo aplicamos a la regla del trapecio:

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n \frac{1 - h\lambda/2}{1 + h\lambda/2}; \quad \text{EDO. (33)}$$

Se puede observar que es estable independientemente del valor de λ ($h\lambda > 0$)
Sin embargo presenta el inconveniente de que a valores altos de $h\lambda$ (por ejemplo $h\lambda \rightarrow \infty$)

$\varepsilon_{n+1} = -\varepsilon_n$ presenta oscilaciones alrededor de la solución.

Finalmente utilizando el método de Euler implícito:

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{\varepsilon_n}{1 + \lambda h} \quad \text{que es estable y no oscila.}$$

El método elegido dependerá de la dificultad para resolver las ecuaciones algebraicas y de cuan pequeño sea el valor de h a utilizar.

El valor del parámetro λ corresponde al valor propio de la ecuación diferencial

En general para un sistema de ecuaciones diferenciales

$$\frac{dy}{dx} = Ay \quad \det|A - \lambda I| = 0 \quad \text{EDO. (34)}$$

me permite calcular los valores propios asociados a la matriz de coeficiente del sistema.

Se dice que un sistema es “stiff” (se puede traducir por rígido o tendente a no estable) utilizando un parámetro “stiffness ratio”.

$$S \cdot R = \frac{\max |\operatorname{Re} \lambda_i|}{\min |\operatorname{Re} \lambda_i|}$$

El mayor de los valores propios del sistema va a gobernar lo “no estable” que es el sistema (el tamaño del paso de integración) y el menor de los valores propios (generalmente) el tiempo final de integración.

Valores típicos:

SR=20 sistema no stiff
 SR=10³ sistema no stiff
 SR=10⁶ sistema muy stiff.

El sistema de Ec. es no lineal, para estudiar el grado de estabilidad del sistema podemos linealizar la ecuación:

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(y(x_n)) + \sum_{j=i}^n \frac{df_i}{dy_j} (y_j - y_j(x_n))$$

$A_{ij} = \frac{df_i}{dy_j}$ { Si calculamos los valores propios de la matriz A podemos ver el grado de estabilidad del sistema

En este último caso el carácter de “stiff” del sistema varía con el tiempo y se debe recalcular a cada paso de integración.

Para sistemas estables no hay que mantener ninguna precaución especial. Para sistemas no-estables debemos elegir un método estable y que no oscile. Así el método implícito de Euler es estable y no oscila, pero es muy poco preciso. El método del trapecio oscila a valores elevados de $|\lambda \Delta|$. Y todos los métodos explícitos fallan por las limitaciones en $|\lambda \Delta|$. En casos difíciles se pueden utilizar los métodos implícitos de Runge Kutta.

10. Evaluación de integrales

En este apartado analizaremos la integración numérica de valores discretos y funciones analíticas.

Se verán dos métodos para la integración numérica: la regla de los trapecios y la regla de Simpson. Estos métodos proporcionan formulas de integración que pueden usarse para funciones de valores discretos igualmente espaciados o para funciones analíticas usando valores de las funciones igualmente espaciados. La regla de los trapecios necesita dos evaluaciones de la función y

la regla de Simpson, tres valores de función con el fin de aproximar el valor de la integral.

Existen otras técnicas diseñadas específicamente para integrar funciones pero no funciones de valores discretos. El método de integración de Romberg usa una aplicación sucesiva de la regla de los trapecios hasta conseguir un valor de la integral con una precisión preestablecida.

10.2. La regla de los trapecios

Si consideramos la aproximación lineal (primer orden) de las series de Taylor para una función dada en el intervalo $[a,b]$, tenemos:

$$f(x) = f(a) + (x - a) \left[\frac{f(b) - f(a)}{b - a} \right] \quad \text{EDO. (35)}$$

integrando esta función entre los límites $[a,b]$ obtenemos la evaluación de la integral para la aproximación lineal:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} \right] (b - a) \quad \text{EDO. (36)}$$

Esta ecuación es conocida como la regla de los trapecios. En ella se asume que la función $f(x)$ varía linealmente en el rango de $x=a$ hasta $x=b$. Una representación de esta integración se muestra en la Figura 3. El área entre la aproximación lineal y $f(x)$ es el error de la aproximación.

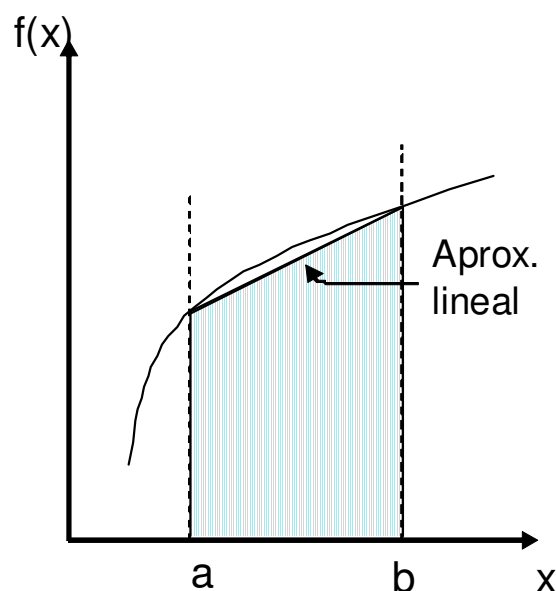


Figura 3. Aproximación considerada en la regla de los trapecios.

El error de la aproximación se puede reducir subdividiendo el intervalo [a,b] y aplicando secuencialmente la regla de los trapecios. Para el caso de la división en n subintervalos, la formula quedaría como se indica en EDO. (37).

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i) + f(x_{i-1})}{2} (x_i - x_{i-1}) \quad \text{EDO. (37)}$$

La ecuación EDO.(3) es valida en para el caso de puntos no igualmente espaciados.

Si todos los puntos están igualmente espaciados:

$$\sum_{i=1}^n \frac{f(x_i) + f(x_{i-1})}{2} (x_i - x_{i-1}) = \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=1}^n [f(x_i) + f(x_{i-1})]$$

con lo que la regla de los trapecios se reduce a la ecuación:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \frac{\Delta x}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right] \quad \text{EDO. (38)}$$

En el caso de utilizar la regla de los trapecios, el error de la aproximación, para un rango fijo, varía de forma inversamente proporcional al cuadrado de n, siendo n el número de subintervalos igualmente espaciados utilizados.

10.3. La regla de Simpson

La regla de Simpson se deriva de la expansión de las series de Taylor usando la evaluación de la función en 3 puntos para minimizar el error de la aproximación. La expresión que se obtendría vendría dada por EDO. (39).

$$\int_{x_a}^{x_c} f(x)dx \cong \frac{\Delta x}{3} [f(x_a) + 4f(x_b) + f(x_c)] \quad \text{EDO. (39)}$$

La ecuación (40) representaría el caso de la aplicación sucesiva de la regla de Simpson para la división en n subintervalos.

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \frac{\Delta x}{3} \left[f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2,4,6}^{n-2} f(x_i) + f(x_n) \right] \quad \text{EDO. (40)}$$

Esta expresión esta restringida al caso en el espaciado entre puntos es igual y el número de puntos es impar. El error global de esta aproximación para un intervalo fijo varía de forma inversamente proporcional a n⁴.

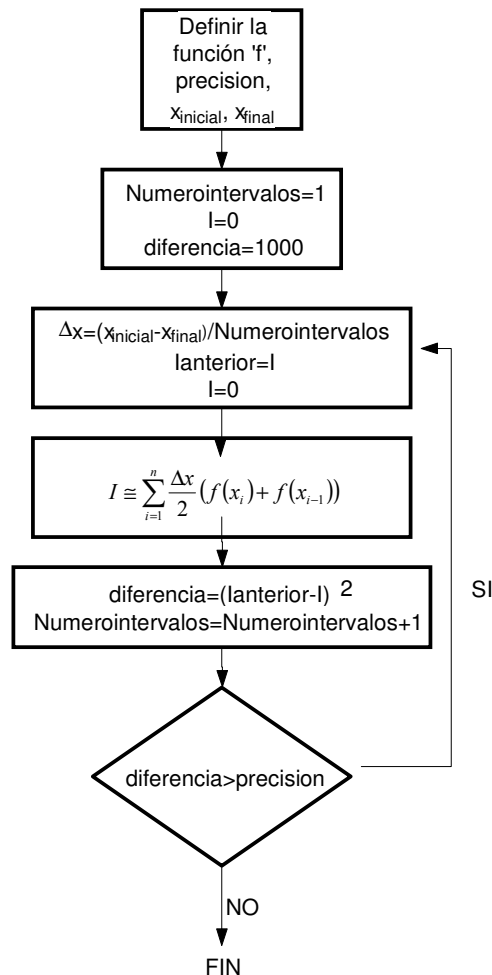
10.4. Método de Romberg para integración numérica de funciones

El método de integración numérico de Romberg es solo aplicable a la integración de funciones, no siendo aplicable a la integración de funciones

definidas por puntos discretos. Su utilización y formulación es muy sencilla y se resume en los siguientes puntos.

1. Se define la precisión con la que se desea conocer el valor de la integral.
2. Se define el intervalo de calculo como todo el área [a,b]
3. Se calcula el valor de la integral utilizando la regla de integración de los trapecios.
4. Se divide el intervalo de análisis en 2.
5. Se calcula el área de cada subintervalo utilizando la regla de los trapecios.
6. Se compara este valor de la integral con el obtenido anteriormente. Si la diferencia en valor absoluto es menor que la precisión deseada, se detiene el cálculo y ya tenemos el valor de la integral. Si es mayor, se divide en 2 cada uno de los subintervalos y se vuelven a repetir los pasos desde el punto 5, hasta que se alcance la precisión deseada.

En forma de diagrama de flujo para la programación tendríamos:



11. RESUMEN

En el tema se han descrito los métodos explícitos e implícitos de resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales. Son de destacar:

- El método de Euler explícito:

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

- Los métodos RK2 explícitos, tal como el de Heun:

$$y_{i+1} \approx y_i + \frac{h}{2} [f(x, y) + f(x + h, y + h f(x, y))]]$$

- El método de RK4 explícito

- El método de Euler implícito:

$$y_{i+1} - y_i - f(x_{i+1}, y_{i+1})\Delta x = 0$$

Se ha abordado cómo convertir una ecuación de orden n en un sistema de ecuaciones.

Se han repasado los métodos de integración numérica de valores discretos, destacando el método de los trapecios:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \cong \frac{\Delta x}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right]$$

y el de Romberg, aplicable a una función expresada de forma analítica.

12. Programación en Matlab®

12.1 Método de Euler explícito (una ecuación diferencial)

```
function [x,y]=eulerex(funcion,x0,xf,y0,ninc)

% Integra por el metodo de Euler explicito
% Valores de entrada:(funcion,x0,xf,y0,ninc)
% 'Funcion' es el fichero con la funcion a integrar
% 'x0' es el punto inicial del calculo
% 'xf' es el punto final
% 'y0' es el valor de y en 'x0'
% 'ninc' es el numero de intervalos en los que se divide xf-x0
% 'SALIDAS' [variable indep, variable integrada]

h=(xf-x0)/ninc;% Paso de integracion
y(1)=y0; %Primer valor de y
x(1)=x0;
for i=1:ninc-1
    y(i+1)=y(i)+h*feval(funcion,y(i),x(i));
%Precaución: La función que contiene la ecuación diferencial debe contener como primera
% variable la variable dependiente 'y', y como segunda la 'x' para que funcione tal como se ha
% escrito. También se podría poner feval(funcion,x(i),y(i)) y habría que definir en la función
% primero la variable dependiente 'x'.
    x(i+1)=x(i)+h;
end
```

12.2 Método de Euler explícito (sistemas de ecuaciones diferenciales o una sola ecuación)

```
function [x,y]=eulersist(F,x0,xf,y0,nint)
% Integra por el metodo de Euler explicito
% 'F' es el fichero con la funcion a integrar
% 'x0' es el punto inicial de calculo
% 'xf' es el punto final
% 'y0' es el valor de la funcion en x0
% 'nint' es el numero de incrementos
h=(xf-x0)/nint; % Paso de integracion
x(1)=x0;
y(:,1)=y0;
for i=1:nint
    y(:,i+1)=y(:,i)+h*feval(F,x(i),y(:,i));
%Precaución: La función que contiene la ecuación diferencial debe contener como primera
% variable la variable dependiente 'y', y como segunda la 'x' para que funcione tal como se ha
% escrito. También se podría poner feval(funcion,x(i),y(:,i)) y habría que definir en la función
% primero la variable dependiente 'x'.
    x(i+1)=x(i)+h;
end
```

12.3 Método de Heun (sistemas):

```
function [x,y]=heun(F,x0,xf,y0,nint)
% Integra por el metodo de HEUN
% 'F' es el fichero con la funcion a integrar
% 'x0' es el punto inicial de calculo
% 'xf' es el punto final
% 'y0' es el valor de la funcion en x0
% 'nint' es el numero de incrementos
h=(xf-x0)/nint; % Paso de integracion
x(1)=x0;
y(:,1)=y0;

for i=1:nint
    f=feval(F,x(i),y(:,i));
    y(:,i+1)=y(:,i)+h/2*(f+feval(F,x(i)+h,y(:,i)+h*f));
%Precaución: La función que contiene la ecuación diferencial debe contener como primera
% variable la variable dependiente 'y', y como segunda la 'x' para que funcione tal como se ha
% escrito. También se podría poner feval(funcion,x(i),y(:,i)) y habría que definir en la función
% primero la variable dependiente 'x'.
    x(i+1)=x(i)+h;
end
```

12.4 Método de Euler-Cauchy (una sola ecuación):

```
function [x,y]=eulercauchy(funcion,ptoinicial,ptofinal,condinicial,numincr)
h=(ptofinal-ptoinicial)/(numincr);
y(1)=condinicial;
x(1)=ptoinicial;
for i=1:numincr-1
    x(i+1)=x(i)+h/2;
    ynueva=y(i)+(h/2)*feval(funcion,y(i));
    y(i+1)=y(i)+h*(feval(funcion,ynueva));
end
```

12.5 Método de Euler implícito:

```
function [x,y]=eulerimp(F,x0,xf,y0,nint)
% Integra por el metodo de Euler IMPLICITO
% 'F' es el fichero con la funcion MODIFICADA
% La función MODIFICADA es una función de Matlab que contiene la ecuación
% o sistema que debe igualarse a cero durante el método de Euler implícito
% 'x0' es el punto inicial de calculo
% 'xf' es el punto final
% 'y0' es el valor de la funcion en x0
% 'nint' es el numero de incrementos
global ysupuesto h xn % debe hacerse variables globales para traspasarla a la función
MODIFICADA
h=(xf-x0)/nint; % Paso de integracion
x(1)=x0;
y(1)=y0;
for i=1:nint
    ysupuesto=y(i); % Valor supuesto de la solución
    xn=x(i);
    y(i+1)=fsolve(F,ysupuesto); %La solución viene dada cuando la función MODIFICADA se hace
    cero
    x(i+1)=x(i)+h;
end
```

Ejemplo de función MODIFICADA:

Si se debe resolver la ecuación diferencial $\frac{dC}{dt} = -10 \exp\left(-\frac{300}{t}\right) C^2$ la función MODIFICADA sería:

```
function z=cinetica2imp(C)
global ysupuesto h xn
t=xn;
f=-10*exp(-300/t)*C^2;
z=C-ysupuesto-f*h;
```

12.6 Método de los trapecios:

```
function l=trapecios(X)
% Integra por el método de los trapecios
% Matriz X con valores [x f(x)]
% Disintos datos en distintas filas
[npuntos,nvar]=size(X); %numero de puntos y variables
x=X(:,1); %Valores de x
y=X(:,2); % Vlaores de la función
l=0;
for i=1:npuntos-1
    l=l+(y(i)+y(i+1))/2*(x(i+1)-x(i));
end
```

12.7 Método de Simpson:

```
function l=simpson(X,incrx)
% Integra por el método de simpson
% Matriz X con valores [x f(x)]
% Disintos datos en distintas filas
[npuntos,nvar]=size(X);
```

```
x=X(:,1);
y=X(:,2);
y0=y(1);
yn=y(npuntos);
sumapares=0;
sumaimpares=0;
for i=2:2:npuntos-1
    sumaimpares=sumaimpares+ y(i);
end
for i=3:2:npuntos-2
    sumapares=sumapares +y(i);
end
l=(incrx/3)*(y0+4*sumaimpares+2*sumapares+yn);
```

12.8 Método de Romberg:

```
function l=romberg(F,x0,xn,precision)
% 'F' debe contener la forma analítica de la expresión a integrar
numerointerval=2;
l=0;
diferencia=100;

while diferencia>precision
    incrx=(xn-x0)/numerointerval;
    Integralanterior=l;
    l=0;
    x=x0:incrx:xn;
    n=length(x);

    for i=1:n-1
        l=l+incrx/2*(feval(F,x(i))+feval(F,x(i+1)));
    end
    diferencia=(l-Integralanterior)^2;
    numerointerval=numerointerval+2;
end
```