

# CAPÍTULO XIII

## MÉTODOS NUMÉRICOS APROXIMACIÓN PARA LA SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

Por

**Nicolás J. Scenna y Alejandro S. M. Santa Cruz**

### XIII.1 INTRODUCCIÓN

El comportamiento de muchos procesos fisicoquímicos en ingeniería química, particularmente aquellos que experimentan cambios dependientes del tiempo (transitorios), se modelan a través de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. De aquí resulta la importancia que adquiere para ingenieros y científicos el conocimiento de métodos de resolución de este tipo de ecuaciones. Si bien muchas ecuaciones diferenciales ordinarias importantes se pueden resolver a través de técnicas analíticas bien conocidas, un gran número de ecuaciones diferenciales físicamente significativas no pueden resolverse de esta forma. En este capítulo se describirán someramente algunos de los métodos de resolución más importantes, como ya se hizo con los sistemas de ecuaciones algebraicas en los Capítulos III y IV.

### XIII.2 ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE ORDEN $n$

Considérese la siguiente ecuación diferencial:

$$f\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2y}{dt^2}, \dots, \frac{d^ny}{dt^n}\right) = 0 \quad (1)$$

Una ecuación diferencial expresada a través de la Ecuación (1) se llama de *orden  $n$*  debido a que el orden más elevado de derivación de la función  $y$  es  $n$ , y *ordinaria* debido a que aparecen sólo derivadas totales (esto es, no hay derivadas parciales presentes, o, alternativamente, la variable dependiente  $y$  sólo es función de una variable independiente  $t$ ).

Una función  $y(t)$  que satisface a la Ecuación (1), lo cual implica que  $y(t)$  es  $n$  veces derivable, se llama *solución de la ecuación diferencial*.

Para obtener una única solución de la Ecuación (1) (en general existen muchas funciones que la satisfacen), es necesario suministrar algún tipo de información adicional, por ejemplo, valores de  $y(t)$  y/o de sus derivadas en valores específicos de  $t$ . Para determinar una solución única de la *ecuación diferencial*

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

*ordinaria de orden n*, normalmente es suficiente con especificar *n* condiciones (*n* integraciones de la ecuación diferencial). Si todas las condiciones se especifican en  $t = t_0$ , entonces al problema se lo llama de *condiciones iniciales*. Cuando está involucrado más de un valor de *t*, el problema se llama de *condiciones de contorno*.

Una EDO (ecuación diferencial ordinaria) de orden *n* puede escribirse como un sistema de *n* ecuaciones diferenciales de 1er. orden, definiendo (*n-1*) nuevas variables. Por ejemplo, consideremos la ecuación de Bessel (ecuación diferencial ordinaria de 2do. orden):

$$t^2 \frac{d^2y}{dt^2} + t \frac{dy}{dt} + (t^2 - p^2) y = 0 \quad (2)$$

donde *p* es una constante. Definamos una nueva variable:

$$y_1 = \frac{dy}{dt} \quad (3)$$

entonces se cumple que:

$$\frac{dy_1}{dt} = \frac{d^2y}{dt^2}$$

Por lo tanto, la EDO de 2do. orden puede reescribirse como un par de EDOs de 1er. orden, con  $y_1$  e *y* como funciones incógnitas,

$$y_1 - \frac{dy}{dt} = 0 \quad (4a)$$

$$t^2 \frac{dy_1}{dt} + t y_1 + (t^2 - p^2) y = 0 \quad (4b)$$

Dado que la mayoría de las EDOs de órdenes superiores pueden escribirse en forma similar, sólo se describirá la solución numérica de EDOs de 1er. orden.

### **XIII.3 SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE 1er. ORDEN**

Sea

$$F \left( t, y, \frac{dy}{dt} \right) = 0$$

una EDO de 1er. orden. Alternativamente puede escribirse en forma explícita como:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad (5)$$

Se quiere determinar una solución que satisfaga a la Ecuación (5) y a una condición inicial especificada. En general, en la mayoría de los problemas de ingeniería es imposible determinar  $y(t)$  en forma analítica. En su lugar, se divide el intervalo de variación de la variable independiente  $t$ ,  $[a, b]$ , en subintervalos o *pasos* en los que se aproxima el valor de la solución verdadera  $y(t)$  en  $(n+1)$  valores igualmente espaciados de  $t : t_0, t_1, \dots, t_n$ , de manera que el tamaño del paso se exprese como:

$$h = \frac{b - a}{n}$$

y

$$t_i = t_0 + i h ; i = 0, 1, 2, \dots, n$$

Luego, la solución se da en forma tabular para  $(n+1)$  valores discretos de  $t$ . Esta tabla contiene valores muestreados de una aproximación particular de la solución de la ecuación. Sea  $y(t_i)$  la solución verdadera en los puntos base  $t_i$  y sea  $y_i$  la aproximación calculada, entonces:

$$y_i \cong y(t_i) \quad (6)$$

La derivada verdadera  $dy/dt$  en los puntos base será aproximada por  $f(t_i, y_i)$  (Ecuación 5); en forma abreviada  $f_i$ . En la medida que se verifiquen exactamente los requisitos de cálculo numérico, esto es, sin errores de redondeo, la diferencia

$$|\epsilon_i| = |y_i - y(t_i)| \quad (7)$$

se denomina *error de discretización o de truncamiento*. El error de truncamiento queda determinado únicamente por el particular procedimiento o método numérico utilizado, esto es, por la naturaleza de las aproximaciones efectuadas en el método. Este tipo de error es independiente de las características del hardware utilizado.

Una clase de error esencialmente diferente proviene del diseño de los equipos de computación. En la práctica, éstos tienen una memoria finita y por consiguiente almacenan un tamaño finito de número. En efecto, las computadoras científicas usualmente poseen una longitud fija de palabra, esto es, el número de dígitos retenidos por cualquier resultado calculado está fijo, reteniendo un cierto número de

cifras significativas. Por consiguiente, cualquier número irracional o cualquier número con más cifras significativas que las que pueden ser retenidas y que se producen en cada secuencia de cálculo, debe ser aproximado por valores numéricos *redondeados*.

El error involucrado se denomina *error de redondeo* y para cualquier método numérico queda determinado por las características del equipo de computación que efectúa los cálculos, el orden de las operaciones de la máquina para implementar el algoritmo, si se trabaja en simple o doble precisión, etc. Es por ello que en general se evita tener que realizar un gran número de operaciones durante el cálculo en los intervalos de integración. Los únicos errores que analizaremos en adelante son aquellos que provienen de la discretización de las ecuaciones diferenciales, esto es, aquellos inherentes al método numérico implementado. Como se verá más adelante, el tema del error es muy importante, en particular vinculado a métodos explícitos de integración de las EDOs. Los algoritmos numéricos comunes para resolver EDOs con condiciones iniciales  $y(t_0)$  se basan en alguno de los siguientes enfoques:

- I) Uso directo o indirecto de la expansión en series de Taylor de la función solución  $y(t)$ .
- II) Uso de fórmulas de integración abiertas o cerradas.

A su vez, los diversos procedimientos pueden clasificarse de un modo general en dos grupos:

- 1) Métodos de paso simple
- 2) Métodos de paso múltiple

Los métodos de paso simple permiten el cálculo de  $y_{i+1}$  dadas solamente la ecuación diferencial y la información en el punto  $t_i$ , esto es, el valor  $y_i$ .

Los métodos de paso múltiple requieren además valores de  $y_i$  y/o  $f_i$  en otros valores de  $t$ , fuera del intervalo de integración considerado,  $[t_i, t_{i+1}]$ . Una desventaja de estos métodos es que requieren más información de la que normalmente se dispone para arrancar el procedimiento. Por lo general se da una condición inicial, por ejemplo,  $y(t_0)$ ; los valores siguientes  $y(t_1)$ ,  $y(t_2)$  no se conocen. Por consiguiente, en un método de paso múltiple, debe utilizarse algún otro método para arrancar.

#### **XIII.4 APROXIMACIÓN A LA SOLUCIÓN MEDIANTE EXPANSIÓN EN SERIES DE TAYLOR**

Un método natural para aproximar numéricamente a la solución de una EDO de primer orden del tipo de la Ecuación (5) es expresar a la solución  $y(t)$  alrededor de un punto de partida  $t_0$  mediante una expansión en serie de Taylor,

$$y(t_0 + h) = y(t_0) + h f [t_0, y(t_0)] + \frac{h^2}{2!} f' [t_0, y(t_0)] + \frac{h^3}{3!} f'' [t_0, y(t_0)] + \dots (8)$$

donde

$$f'[t_0, y(t_0)] = \frac{d}{dt} [f(t, y(t))]_{t=t_0}$$

$$f''[t_0, y(t_0)] = \frac{d^2}{dt^2} [f(t, y(t))]_{t=t_0}$$

y así sucesivamente. Si se especifica la condición inicial  $y(t_0)$ ,  $y(t)$  puede calcularse directamente de la EDO (Ecuación (5)),

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

Para evaluar las derivadas de orden superior se debe derivar  $f(t, y)$  utilizando la regla de la cadena, entonces:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} \quad (9)$$

Ejemplo 1: Sea

$$\frac{dy}{dt} = f(y) = k y \quad (10)$$

sujeta a la condición inicial  $y(t_0) = y_0$ . Si se deriva la Ecuación (10) aplicando la regla de la cadena se obtiene:

$$f'(t, y) = \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} = k^2 y$$

$$f'(t_0, y_0) = k^2 y_0$$

$$f''(t, y) = \frac{df'}{dt} = \frac{\partial f'}{\partial y} \frac{dy}{dt} = k^3 y$$

$$f''(t_0, y_0) = k^3 y_0$$

$$f'''(t, y) = \frac{df''}{dt} = \frac{\partial f''}{\partial y} \frac{dy}{dt} = k^4 y$$

$$f'''(t_0, y_0) = k^4 y_0$$

$$f^n(t, y) = k^{n+1} y \quad ; \quad f^n(t_0, y_0) = k^{n+1} y_0$$

La expansión en serie de Taylor  $y(t)$  alrededor de  $t = t_0$  resulta:

$$y(t_0+h) = y(t_0) \left[ 1 + k h + \frac{(k h)^2}{2!} + \frac{(k h)^3}{3!} + \frac{(k h)^4}{4!} + \dots \right] \quad (11)$$

Por otro lado, después de separar variables, la integración directa de la Ecuación (10) es:

$$\int_{y(t_0)}^{y(t_0+h)} \frac{dy}{y} = k \int_{t_0}^{t_0+h} dt$$

que genera la solución

$$\ln y \Big|_{y(t_0)}^{y(t_0+h)} = k t \Big|_{t_0}^{t_0+h}$$

ó

$$\ln \left[ \frac{y(t_0+h)}{y(t_0)} \right] = k h$$

de donde se obtiene la solución analítica:

$$y(t_0+h) = y(t_0) e^{kh} \quad (12)$$

Por otra parte, el factor

$$\left[ 1 + k h + \frac{(k h)^2}{2!} + \frac{(k h)^3}{3!} + \dots \right]$$

en el segundo miembro de la Ecuación (11) representa la expansión en serie de Taylor de la función  $e^{kh}$  alrededor del origen, por consiguiente, las soluciones (11) y (12) coinciden con una exactitud determinada por el número de términos retenidos en la

serie. En efecto, si se retienen los términos hasta el que incluye a  $f^{(n-1)}$ , entonces el error viene expresado por (Ecuación (7)):

$$\varepsilon = y(\xi_j) \frac{(k h)^{n-1}}{(n+1)!} ; \xi_j \in (t_0, t_0+h)$$

El procedimiento para pasar de un valor de  $t$  a otro, esto es, de  $t_0$  a  $t_0+h$ , se deduce de la expansión en serie de Taylor de  $y(t)$  alrededor de  $t = t_0$ . Para pasar de un valor arbitrario  $t_i$  a  $t_{i+1} = t_i+h$ , los algoritmos se basan en la expansión en serie de Taylor de  $y(t)$  alrededor de  $t_i$ .

$$y(t_{i+1}) = y(t_i+h) = y(t_i) + h f [t_i, y(t_i)] + \frac{h^2}{2!} f' [t_i, y(t_i)] + \frac{h^3}{3!} f'' [t_i, y(t_i)] + \frac{h^4}{4!} f''' [t_i, y(t_i)] + \frac{h^n}{n!} f^{(n-1)} [t_i, y(t_i)] + \frac{h^{(n+1)}}{(n+1)!} f^{(n)} [\xi_i, y(\xi_i)] ; \xi_i \in (t_i, t_i + h) \quad (13)$$

Los algoritmos que resultan de despreciar el último término en el 2do. miembro de la Ecuación (13) y de reemplazar  $y(t_{i+1})$  por  $y_{i+1}$  en el lado izquierdo e  $y(t_i)$  por  $y_i$  en el lado derecho para evaluar las derivadas sucesivas de  $y(t)$ , se llaman de orden  $h^n$ . El *error local de truncamiento*  $e_i$ , introducido por una aplicación del desarrollo en serie, está acotado como sigue:

$$|e_i| \leq \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} E \quad (14)$$

donde:

$$E \geq |f^{(n)} [\xi, y(\xi)]|_{m\acute{a}x} ; \xi \in (t_i, t_{i+1})$$

Lamentablemente, en general, la derivación de  $f(t,y)$ , se vuelve muy complicada. Por lo tanto, con excepción del caso más simple,

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h f(t_i) + o(h^2) \quad (15)$$

la expansión directa en serie de Taylor (Ecuación 13) de la función  $y(t)$  no se usa para resolver EDOs. Dado que, usualmente,  $y(t_0)$  es el único valor de  $y(t)$  que se conoce exactamente (se supone que la condición inicial está libre de errores), en la Ecuación (15) debe reemplazarse  $y(t_i)$  por  $y_i$ . Por consiguiente, el algoritmo adopta la forma:

$$y_1 = y(t_0) + h f [t_0, y(t_0)] \quad (16a)$$

que es conocido como Método de Euler, con expresión genérica:

$$y_{i+1} = y_i + h f(t_i, y_i) = y_i + h f_i \quad (16b)$$

donde  $i$  indica el orden temporal (u orden) en que se obtienen los sucesivos valores tabulares de  $y(t)$ .

### XIII.5 MÉTODOS EXPLÍCITOS DE RESOLUCIÓN DE EDOs

Los algoritmos explícitos de resolución de EDOs implican la evaluación explícita de las derivadas y el avance paso a paso en el tiempo sin necesidad de recurrir a procedimientos iterativos. Existen dos métodos muy difundidos y fáciles de usar que utilizan arranque automático. Estos son:

- El Método de Euler
- El Método de Runge-Kutta de 4to. orden

Existen, por otra parte, cientos de algoritmos de esta naturaleza. Muchos de ellos son bastante complejos, difíciles de programar y de supervisar. Aquí se profundizará en los mencionados arriba, ya que son los más utilizados en una gran cantidad de problemas prácticos.

#### XIII.5.1 Método de Euler

En razón que el Método de Euler de simple paso (Ecuaciones (16)) es el más simple y el más ameno para el análisis de la propagación del error, será discutido en detalle, aún cuando limitaciones en su exactitud impiden su uso en algunos problemas prácticos (sistemas *stiff*).

Es posible efectuar una interpretación geométrica simple de la Ecuación (16a). La solución en el intervalo  $[t_0, t_1]$  se supone que sigue la línea tangente a  $y(t)$  en  $t = t_0$  (ver Figura (XIII.1)).

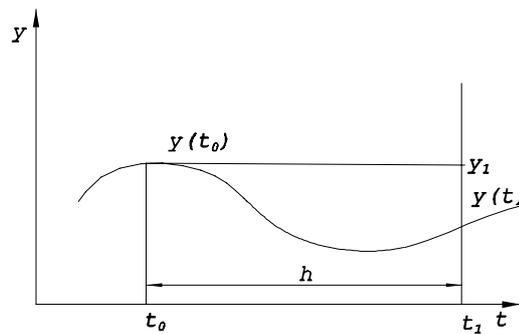


Figura XIII.1: Método de Euler.

Si el método de Euler se aplica repetidamente en forma secuencial a través de los diferentes intervalos, la solución numérica dibuja un polígono cuyos lados poseen pendientes  $f_i$  con  $i = 1, 2, \dots, n-1$ .

*Ejemplo 2:* Sea la EDO expresada por la Ecuación (10) con  $k = 3$ ,

$$\frac{dy}{dt} = 3y$$

sujeta a la condición inicial  $y(t_0 = 0) = y_0 = 1$ . La solución analítica para esa condición inicial es, según vimos:

$$y(t) = e^{3t}$$

En la Tabla (XIII.1) se muestra la solución de Euler para un tamaño de paso  $h = 0.1$  y un límite superior de integración  $t_{10} = 1$ . La columna (2) de la Tabla (XIII.1) contiene los valores calculados  $y_i$  a partir de las Ecuaciones (16), redondeadas a 4 cifras. La columna (3) contiene los valores calculados de la derivada,  $f(t_i, y_i) = f_i$  con cuatro cifras retenidas. La columna (4) muestra las soluciones verdaderas redondeadas a 4 cifras. La columna (5) presenta la evolución del error absoluto total de truncamiento redondeado a 4 cifras para cada valor  $t_i$  (ver Ecuación (7)). En la columna (6) se presenta el error relativo local de truncamiento. Finalmente, en la columna (7) se muestra la evolución del máximo error local de truncamiento calculado a partir de la expansión en serie de Taylor para  $n = 1$  (Ecuaciones (13) y (14)),

$$|e_t| = \frac{h^2}{2!} |f'[\zeta, y(\zeta)]| \quad ; \quad \zeta \in (t_i, t_{i+1}) \quad (17)$$

En el caso de la EDO de referencia resulta que:

$$f'(t,y) = \frac{d^2y}{dt^2} = 9e^{3t}$$

Dado que  $e^{3t}$  es una función monótona creciente de  $t$ , su valor máximo se encuentra en el extremo superior del intervalo  $[t_i, t_{i+1}]$ , por consiguiente:

$$|e_t|_{m\acute{a}x.} = \frac{h^2}{2!} (9e^{3t_{i+1}}) \quad (18)$$

Desafortunadamente, esta cota del error de truncamiento sólo es válida para el

algoritmo determinado por la Ecuación (16a) deducida a partir de la expansión en serie de Taylor (Ecuación (13)),

$$y_{i+1} = y(t_i) + h f [t_i, y(t_i)]$$

Para efectuar la integración general entre  $t_i$  y  $t_{i+1}$ , esto es, los resultados de la columna (3) de la Tabla (XIII.1), el algoritmo se expresa a través de la Ecuación (16b),

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

El valor de  $y_i$  utilizando en cada intervalo, excepto el primero donde  $y_0 = y(t_0)$  es inexacto, siendo el resultado de cálculos previos los cuales involucran los errores de truncamiento acumulados en las etapas anteriores.

Tabla XIII.1: Solución de la ecuación  $dy/dt = 3y$  y mediante el Método de Euler.

Método de Euler						
Ecuación Diferencial		Condición Inicial		Solución Analítica		Paso
$y' = 3y$		$y(t=0) = 1$		$y = \exp(3t)$		$h = 0.1$
$t_i$	$y_i$	$f(t_i, y_i)$	$y(t_i)$	Error Absoluto	Error Relativo (%)	Máximo Error Local de Truncamiento
0.0	1.0000	3.0000	1.0000			
0.1	1.3000	3.9000	1.3499	0.0499	3.69	0.06
0.2	1.6900	5.0700	1.8221	0.1321	7.25	0.08
0.3	2.1970	6.5910	2.4596	0.2626	10.68	0.11
0.4	2.8561	8.5683	3.3201	0.4640	13.98	0.15
0.5	3.7129	11.1388	4.4817	0.7688	17.15	0.20
0.6	4.8268	14.4804	6.0496	1.2228	20.21	0.27
0.7	6.2749	18.8246	8.1662	1.8913	23.16	0.37
0.8	8.1573	24.4719	11.0232	2.8659	26.00	0.50
0.9	10.6045	31.8135	14.8797	4.2752	28.73	0.67
1.0	13.7858	41.3575	20.0855	6.2997	31.36	0.90

En la Tabla (XIII.2) se comparan los resultados obtenidos al aplicar el Método de Euler a la ecuación diferencial del Ejemplo (2) para dos pasos diferentes de integración ( $h=0.1$  y  $h=0.01$ ). Se observa que al reducir el paso de integración en un orden de magnitud, el error relativo que se comete en la evaluación de la solución

para el tiempo  $t_j=1$  se reduce casi 8 veces.

Tabla XIII.2: Comparación de las soluciones para dos pasos diferentes de la ecuación diferencial  $dy/dt = 3$  y obtenidas mediante el Método de Euler.

Paso	Iteraciones	$t_r$	$y_r$	$y(t_r)$	Error Absoluto	Error Relativo (%)
$h = 0.1$	10	1.0	13.786	20.086	6.300	31.364
$h = 0.01$	100	1.0	19.219	20.086	0.867	4.316

### Propagación del error en el Método de Euler

Se examinará a continuación la propagación de los errores locales de discretización en el método de Euler cuando se aplica a problemas de valores iniciales.

Supongamos que  $f(t, y)$  y sus derivadas parciales de primer orden sean funciones continuas y acotadas en la región  $a \leq t \leq b, -\infty \leq y \leq \infty$ . Supongamos además que existe una solución  $y(x)$ . Entonces deben existir constantes  $M$  y  $K$  tales que:

$$|y''(t)| = \left| \frac{\partial f(t, y)}{\partial t} + f(t, y) \frac{\partial f(t, y)}{\partial y} \right| \leq M \quad (19)$$

y

$$|f(t, y^*) - f(t, y)| = \left| \frac{\partial f(t, \alpha)}{\partial y} \right| |y^* - y| \leq K |y^* - y| \quad (20)$$

donde  $y^* < \alpha < y$  para  $(t, y), (t, y^*)$  en la región  $t$ . La Ecuación (20) se deduce directamente del teorema diferencial del valor medio. Si  $\epsilon_i$  representa el error entre la solución exacta y la aproximada (ver Ecuación (7)), entonces el error adicional que se genera al incrementar el paso de integración, resulta:

$$\Delta \epsilon_i = \Delta y_i - \Delta y(t_i) \quad (21)$$

o, en forma equivalente

$$\epsilon_{i+1} - \epsilon_i = y_{i+1} - y_i = [y(t_{i+1}) - y(t_i)] \quad (22)$$

sujeto a la condición  $\epsilon_0 = 0$ . Del algoritmo de Euler se tiene:

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

mientras que de la expansión en serie de Taylor surge:

### Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h f [t_i, y(t_i)] + \frac{h^2}{2!} f' [\xi, y(\xi)] \quad (23)$$

con  $\xi \in (t_i, t_{i+1})$ . Por consiguiente, la Ecuación (21) es equivalente a

$$\Delta \varepsilon_i = h [f (t_i, y_i) - f [t_i, y(t_i)]] - \frac{h^2}{2} f' [\xi, y(\xi)] \quad (24)$$

Entonces, de las Ecuaciones (19) y (20) resulta

$$|\Delta \varepsilon_i| = |\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i| \leq h K |y_i - y(t_i)| + \frac{M}{2} h^2$$

ó

$$|\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i| \leq h K |\varepsilon_i| + \frac{M}{2} h^2 ; i \geq 0 \quad (25)$$

Además, dado que

$$|\varepsilon_{i+1}| \leq |\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i| + |\varepsilon_i| \quad (26)$$

La Inecuación (26) puede reescribirse como

$$|\varepsilon_{i+1}| \leq (1 + h K) |\varepsilon_i| + \frac{M}{2} h^2 ; i \geq 0 \quad (27)$$

Para determinar  $|\varepsilon_i|$ , se debe aplicar repetidamente la Inecuación (27) con el valor de arranque  $\varepsilon_0 = 0$ . Sin embargo, puede probarse por inducción que la Desigualdad (27) tiene una solución general de la forma:

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{M h}{2 K} [(1 + h K)^i - 1] \quad (28)$$

La solución de la Inecuación (27), esto es, la Inecuación (28), se puede simplificar si se tiene cuenta que:

$$(1 + h K) < e^{hK} \quad (29)$$

que se deduce de la expansión en serie de Taylor de  $e^{hk}$ .

Si se sustituye la Inecuación (29) en la (28) se obtiene:

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{M h}{2 K} (e^{ihK} - 1) \leq \frac{M h}{2 K} e^{ihK} \quad (30)$$

Para  $n h = t_n - t_0 = L$ , esto es, el intervalo total constante de integración, la Inecuación (30) puede escribirse como:

$$|\varepsilon_n| \leq \frac{M h}{2 K} e^{LK} \quad (31)$$

Entonces, cuando  $h$  tiende a 0, el error tiende a cero, así:

$$\lim_{h \rightarrow 0} |\varepsilon_n| \leq \lim_{h \rightarrow 0} \frac{M h}{2 K} e^{LK} = 0$$

Esta última expresión es cierta pese al hecho que  $n \rightarrow \infty$  cuando  $h \rightarrow 0$ . Un procedimiento numérico para el que

$$\lim_{h \rightarrow 0} |\varepsilon_i| = 0$$

cuando  $0 \leq i \leq n$ , se dice convergente. Por consiguiente, el Método de Euler converge con un error total de truncamiento:

$$|\varepsilon_i| = |y_i - y(t_i)| = o(h)$$

Obsérvese que, sin embargo, el error local de truncamiento (Ecuación (17)) para el Método de Euler es del orden de  $h^2$ .

Lamentablemente, en problemas prácticos en los cuales se presentan cientos e incluso miles de ecuaciones diferenciales en forma simultánea y con expresiones en general sumamente complejas, es virtualmente imposible aplicar las fórmulas anteriores para estimar a priori una cota al error esperado en función del paso  $h$  seleccionado. Por lo general, ante problemas de tal naturaleza, se recurre a seleccionar pasos sucesivamente decrecientes por métodos de prueba y error, experimentando en las sucesivas soluciones. En particular, se observan las propiedades de las curvas obtenidas como solución (continuidades, etc.) y su verificación respecto del problema modelado (esto es la interpretación física de la solución, etc.).

### XIII.5.2 Métodos de Runge-Kutta

En general, la solución de una EDO por expansión directa en series de Taylor de la función objeto no es práctica si se necesita retener derivadas de orden

superior al primero, ya que, con excepción de los casos más simples, las derivadas de orden superior que se necesita conservar son bastante complicadas. Por otra parte, es necesario destacar que cada problema que se plantea genera una serie específica para su solución. Por lo tanto, cuando se desee trabajar con errores de orden superior, no pueden desarrollarse algoritmos de cálculo análogos al método de Euler, directamente de la expansión en serie de Taylor. Sin embargo, con ingenio, es posible desarrollar un método de paso simple que involucre evaluaciones de derivadas de primer orden y que produzca resultados equivalentes en seguridad a las fórmulas de Taylor de orden superior. Estos algoritmos pertenecen a la familia identificada con el nombre de métodos de Runge-Kutta. Aproximaciones del segundo, tercer y cuarto orden (exactitud equivalente a expansiones en series de Taylor de  $y(t)$  que retienen términos en  $h^2$ ,  $h^3$ , y  $h^4$ , respectivamente) requieren de la estimación de  $f(t,y)$  en dos, tres y cuatro valores de  $t$ , respectivamente, en el intervalo  $[t_i, t_{i+1}]$ . Los métodos de orden  $m > 4$  requieren de las evaluaciones en más de  $m$  puntos próximos.

Todos los métodos de Runge-Kutta tienen algoritmos de la forma:

$$y_{i+1} = y_i + h \Phi(t_i, y_i, h) \quad (32)$$

donde  $\Phi$  representa una aproximación adecuada a  $f(t,y)$  sobre el intervalo  $[t_i, t_{i+1}]$ .

La función  $\Phi$  recibe el nombre de *función incremento*. Debido a que hay una considerable cantidad de álgebra involucrada en el desarrollo de las fórmulas de Runge-Kutta de orden superior, sólo se desarrollará en detalle el más simple de estos procedimientos (el algoritmo de segundo orden).

Consideremos a  $\Phi$  como el promedio pesado de dos evaluaciones,  $k_1$  y  $k_2$  de la derivada sobre el intervalo  $[t_i, t_{i+1}]$ :

$$\Phi = a k_1 + b k_2 \quad (33)$$

que conduce al algoritmo de Runge-Kutta:

$$y_{i+1} = y_i + h (a k_1 + b k_2) \quad (34)$$

Sea entonces:

$$k_1 = f(t_i, y_i) \quad (35)$$

$$k_2 = f[t_i + p h, y_i + q h k_1] \quad (36)$$

donde  $p$  y  $q$  son constantes que deben determinarse. Las cantidades  $h k_1$  y  $h k_2$  tienen

una interpretación geométrica simple que quedará clara una vez que se determinen  $p$  y  $q$ . Para ello, se recurre a expandir  $k_2$  en una serie de Taylor como una función de dos variables, despreciándose aquellos términos en los que el exponente de  $h$  es  $> 1$ :

$$\begin{aligned} k_2 &= f [t_i + p h, y_i + q h f (t_i, y_i)] \\ &= f (t_i, y_i) + p h f_t (t_i, y_i) + q h f (t_i, y_i) f_y (t_i, y_i) + o(h^2) \end{aligned} \quad (37)$$

Reemplazando las Ecuaciones (35) y (37) en la Ecuación (34), se obtiene:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h [ a f (t_i, y_i) + b f (t_i, y_i)] + \\ &+ h^2 [b p f_t (t_i, y_i) + b q f (t_i, y_i) f_y (t_i, y_i)] + o(h^3) \end{aligned} \quad (38)$$

donde  $f_t$  y  $f_y$  representan las derivadas parciales de la función  $f$  con respecto a  $t$  e  $y$  respectivamente.

Ahora, a partir de la expansión de la función objeto  $y(t)$  alrededor de  $t = t_i$  en serie de Taylor, buscamos otra expresión que nos permita, por igualación de coeficientes, encontrar las relaciones que necesitamos. Sea la expansión:

$$\begin{aligned} y(t_i+h) = y(t_{i+1}) &= y(t_i) + h f [t_i, y(t_i)] + \frac{h^2}{2!} f' [t_i, y(t_i)] + \\ &+ \frac{h^3}{3!} f''[\xi, y(\xi)] \end{aligned} \quad (39)$$

con  $\xi \in (t_i, t_{i+1})$ . Aplicando la regla de la cadena (Ecuación (9)) para el cálculo de la derivada, resulta que:

$$f' [t_i, y(t_i)] = f_t [t_i, y(t_i)] + f [t_i, y(t_i)] f_y [t_i, y(t_i)]$$

Reemplazando ahora esta última expresión en la Ecuación (39), se tiene:

$$\begin{aligned} y(t_i+h) &= y(t_{i+1}) \\ &= y(t_i) + h f [t_i, y(t_i)] + \frac{h^2}{2!} [f_t [t_i, y(t_i)] + f [t_i, y(t_i)] f_y [t_i, y(t_i)]] + \\ &+ \frac{h^3}{3!} f''[\xi, y(\xi)] \end{aligned} \quad (40)$$

con  $\xi \in (t_i, t_{i+1})$ . Comparando las Ecuaciones (38) y (40), y si se igualan los términos con potencias iguales de  $h$ , obtenemos las siguientes relaciones:

Potencia de h	Expansión de y(t)	Algoritmo de Runge-Kutta
0	y(t <sub>i</sub> )	y <sub>i</sub>
1	f [t <sub>i</sub> ,y(t <sub>i</sub> )]	(a + b) f [t <sub>i</sub> ,y(t <sub>i</sub> )]
2	(½) {f <sub>1</sub> [t <sub>i</sub> , y(t <sub>i</sub> )] + f <sub>2</sub> [t <sub>i</sub> , y(t <sub>i</sub> )] f <sub>1</sub> [t <sub>i</sub> ,y(t <sub>i</sub> )]}	b {p f <sub>1</sub> [t <sub>i</sub> , y(t <sub>i</sub> )] + q f <sub>2</sub> [t <sub>i</sub> , y(t <sub>i</sub> )] f [t <sub>i</sub> , y(t <sub>i</sub> )]}

Puesto que asumimos  $y_i = y(t_i)$  y dado que se busca la igualdad de los coeficientes de  $h^2$  para toda función  $f(t,y)$  adecuadamente diferenciable, podemos plantear:

$$a + b = 1$$

$$b p = \frac{1}{2}$$

$$b q = \frac{1}{2}$$

de donde

$$a = 1 - b \tag{41a}$$

$$p = \frac{1}{2 b} \tag{41b}$$

$$q = \frac{1}{2 b} \tag{41c}$$

Dado que las tres ecuaciones (41) contienen 4 incógnitas ( $a, b, p$  y  $q$ ), el sistema es indeterminado, esto es, una variable, por ejemplo  $b$ , puede elegirse arbitrariamente. Las elecciones más comunes son  $b = 0.5$  o bien  $b = 1$ .

**Caso :**  $b = 0.5$

Para  $b = 0.5$  se obtiene  $a = 0.5, p = 1$  y  $q = 1$ . Entonces, el algoritmo (32) adopta la forma:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \left\{ f(t_i, y_i) + f[t_i + h, y_i + h f(t_i, y_i)] \right\} \tag{42}$$

que también puede escribirse como:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, \bar{y}_{i+1})] \quad (43)$$

donde

$$\bar{y}_{i+1} = y_i + h f(t_i, y_i) \quad (44)$$

El algoritmo de simple paso determinado por las Ecuaciones (43) y (44) recibe el nombre de *Método Mejorado de Euler* o *Método de Heun* cuya interpretación geométrica se muestra en la siguiente figura:

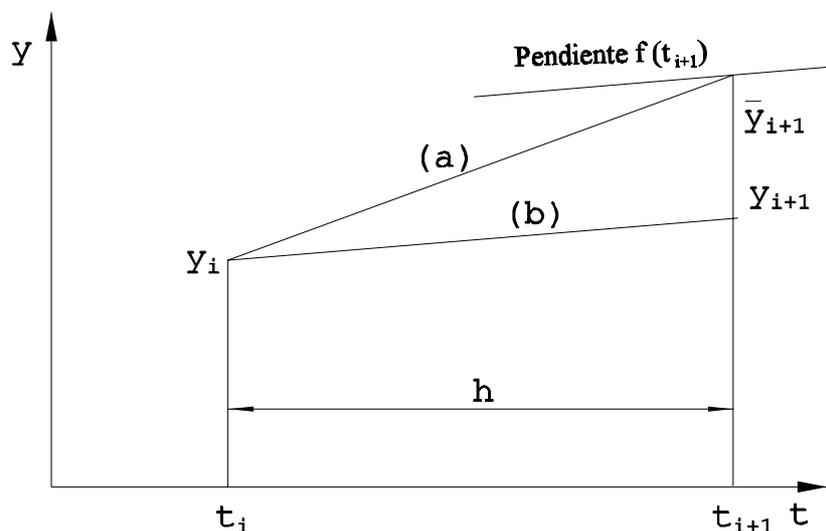


Figura XIII.2: Procedimiento de Runge-Kutta de 2do. orden (Método de Heun).

El *Método de Runge-Kutta de 2do. Orden* básicamente es el *Método de Euler* empleado secuencialmente dos veces. En efecto, en primer lugar se utiliza la Ecuación (44) para predecir  $\bar{y}_{i+1}$ , esto es, una estimación preliminar de  $y_{i+1}$ . El valor  $\bar{y}_{i+1}$  es la ordenada en  $t = t_{i+1}$  de la recta (a) que pasa a través de  $(t_i, y_i)$  con pendiente  $k_1 = f(t_i, y_i)$ . En segundo lugar, se obtiene un valor mejorado de  $y_{i+1}$  a partir de la Ecuación (43). La pendiente de la recta (b) utilizada para este propósito es el promedio pesado de las aproximaciones de  $f$  en los dos extremos del intervalo. Obsérvese que la derivada verdadera en  $t_{i+1}$  es  $f(t_{i+1}, y_{i+1})$ , que es aproximada por  $f(t_{i+1}, \bar{y}_{i+1})$ , dado que  $y(t_{i+1})$  es desconocida.

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

El algoritmo de Euler (Ecuación (44)) puede visualizarse como una *ecuación predictora* de  $\bar{y}_{i+1}^{(1)}$  (la primera aproximación de  $y_{i+1}$ ), mientras que la Ecuación (43) puede considerarse como una *ecuación correctora* para mejorar la estimación de  $y_{i+1}$ . La Ecuación (43) puede utilizarse de manera iterativa para generar una secuencia de valores  $y_{i+1}$  corregidos,  $\bar{y}_{i+1}^{(2)}$ ,  $\bar{y}_{i+1}^{(3)}$ , ...,  $\bar{y}_{i+1}^{(m)}$ . En este caso, las Ecuaciones (43) y (44) conducen al más simple de los denominados métodos corrector-predictor que se describen más adelante.

**Caso :  $b = 1$**

Para  $b = 1$  se obtiene  $a = 0$ ,  $p = 0.5$  y  $q = 0.5$ . Luego, la Ecuación (32) adopta la forma:

$$y_{i+1} = y_i + h f \left( t_i + \frac{h}{2}, \bar{y}_{i+1/2} \right) \quad (45)$$

donde

$$\bar{y}_{i+1/2} = y_i + \frac{h}{2} f(t_i, y_i) \quad (46)$$

El algoritmo de simple paso determinado por las Ecuaciones (45) y (46) se denomina *Método Mejorado de la Poligonal* o *Método Mejorado de Euler*, como se ilustra en la Figura (XIII.3).

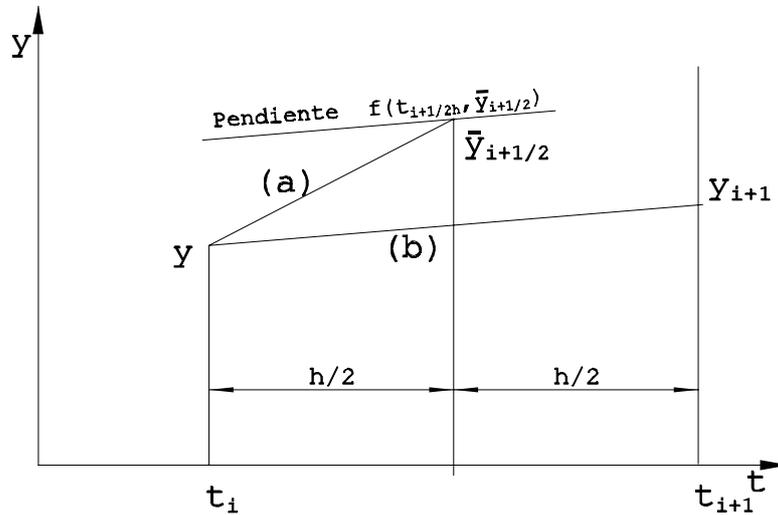


Figura XIII.3: Método Mejorado de la Poligonal.

Nuevamente, el Método de Euler se aplica secuencialmente dos veces. En primer lugar, a partir de la Ecuación (46) se obtiene una aproximación de  $y_{i+1/2}$  en el punto medio  $t_i + h/2$ . En segundo lugar, la Ecuación (45) evalúa  $f(t,y)$  en  $t = t_i + h/2$ ,  $y = \bar{y}_{i+1/2}$  y utiliza a este valor como derivada promedio sobre el intervalo total.

Los métodos de Runge-Kutta de orden tres y superiores se desarrollan en forma análoga. Sea la función incremento  $\Phi$  para el método de 3er. orden:

$$\Phi = a k_1 + b k_2 + c k_3$$

donde  $k_1, k_2$  y  $k_3$  aproximan a la derivada en varios puntos del intervalo de integración  $[t_i, t_{i+1}]$ . En este caso tenemos:

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f(t_i + p h, y_i + p h k_1)$$

$$k_3 = f[t_i + r h, y_i + s h k_2 + (r - s) h k_1]$$

donde todas las constantes deben ser determinadas de tal forma de plantear la aproximación:

$$y_{i+1} = y_i + h (a k_1 + b k_2 + c k_3) \quad (47)$$

Las constantes  $a, b, c, p, r$  y  $s$ , se determinan igual que antes:

- 1<sup>ero</sup>) Se expanden  $k_2$  y  $k_3$  en series de Taylor alrededor de  $(t_i, y_i)$  como funciones de dos variables.
- 2<sup>do</sup>) La función objeto  $y(t)$  se expande en serie de Taylor alrededor de  $t = t_i$ .
- 3<sup>ero</sup>) Se igualan los coeficientes de los términos que incluyen a potencias de  $h$  de orden 0, 1, 2 y 3 para producir una fórmula con error de truncamiento de  $o(h^4)$ .

Nuevamente, se genera un sistema de ecuaciones con más incógnitas que ecuaciones,

$$a + b + c = 1$$

$$b p + c r = \frac{1}{2}$$

$$b p^2 + c r^2 = \frac{1}{3}$$

$$c p s = \frac{1}{6}$$

Como el sistema es indeterminado, dos de las constantes  $a, b, c, p, r$  y  $s$  se eligen arbitrariamente. Para un conjunto de constantes seleccionadas por Kutta, el método de 3<sup>er.</sup> orden es:

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

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{1}{2} h, y_i + \frac{1}{2} h k_1\right)$$

$$k_3 = f(t_i + h, y_i + 2 h k_2 - h k_1)$$
(48)

Obsérvese que si  $f = f(t)$ , entonces la ecuación (48) se reduce a la regla de integración de Simpson. Todas las fórmulas de 4to. orden son de la forma:

$$y_{i+1} = y_i + h (a k_1 + b k_2 + c k_3 + d k_4)$$
(49)

donde  $k_1, k_2, k_3$  y  $k_4$  son valores aproximados de la derivada, calculados en el intervalo  $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ . Se utilizan diversos algoritmos de 4to. orden. El siguiente se atribuye a Kutta:

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

$$k_1 = f(t_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_i + \frac{1}{2} h, y_i + \frac{1}{2} h k_2\right)$$

$$k_4 = f(t_i + h, y_i + h k_3)$$
(50)

Ejemplo 3: Sea la ecuación diferencial ordinaria

$$y' = -2y + t$$

sujeta a la condición inicial  $y(t=0) = 1$ . La solución analítica de esta ecuación es:

$$y = \frac{1}{4} [5 \exp(-2t) - 1] + \frac{t}{2}$$

En la Tabla (XIII.3) se presentan los resultados numéricos de la ecuación diferencial luego de aplicar el algoritmo de Runge-Kutta de 4to. orden (Ecuación (50)) para un tamaño de paso  $h = 0.1$  y un límite superior de integración  $t_{10} = 1$ .

Tabla XIII.3: Solución de la ecuación  $dy/dt = -2y + t$  mediante el Método de Runge-Kutta.

Método de Runge-Kutta de 4to. Orden (Ecuación (50))							
Ecuación		Condición Inicial		Solución Analítica		Paso	
$y' = -2y + t$		$y(t=0) = 1$		$1/4 [5 \exp(-2t) - 1] + t/2$		$h = 0.1$	
Iteración	$t_i$	$hk_1$	$hk_2$	$hk_3$	$hk_4$	$y_i$	$y(t_i)$
0	0					1	1
1	0.1	-0.2000	-0.1750	-0.1775	-0.1545	0.823417	0.823413
2	0.2	-0.1547	-0.1342	-0.1363	-0.1174	0.687905	0.687900
3	0.3	-0.1176	-0.1008	-0.1025	-0.0871	0.586021	0.586015
4	0.4	-0.0872	-0.0735	-0.0749	-0.0622	0.511668	0.511661
5	0.5	-0.0623	-0.0511	-0.0522	-0.0419	0.459857	0.459849
6	0.6	-0.0420	-0.0328	-0.0337	-0.0252	0.426500	0.426493
7	0.7	-0.0253	-0.0178	-0.0185	-0.0116	0.408253	0.408246
8	0.8	-0.0117	-0.0055	-0.0061	-0.0004	0.402377	0.402371
9	0.9	-0.0005	0.0046	0.0041	0.0087	0.406629	0.406624
10	1	0.0087	0.0128	0.0124	0.0162	0.419174	0.419169

Conocidas variantes del método de 4<sup>to</sup>. orden atribuidas a Kutta son:

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{6} [k_1 + 2(1 - 1/\sqrt{2})k_2 + 2(1 + 1/\sqrt{2})k_3 + k_4] \\
 k_1 &= f(t_i, y_i) \\
 k_2 &= f(t_i + 1/2 h, y_i + 1/2 h k_1) \\
 k_3 &= f(t_i + 1/2 h, y_i + (-1/2 + 1/\sqrt{2})h k_1 + (1 - 1/\sqrt{2})h k_2) \\
 k_4 &= f(t_i + h, y_i - 1/\sqrt{2}h k_2 + (1 + 1/\sqrt{2})h k_3)
 \end{aligned}
 \tag{51}$$

Si  $f(t,y)$  es sólo función de  $t$ , la fórmula anterior no expresa otra cosa que la regla de integración de Simpson. Otra combinación muy conocida de valores para el método de cuarto orden es:

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{8} (k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4) \\
 k_1 &= f(t_i, y_i) \\
 k_2 &= f(t_i + \frac{1}{3} h, y_i + \frac{1}{3} h k_1) \\
 k_3 &= f(t_i + \frac{2}{3} h, y_i - \frac{1}{3} h k_1 + h k_2) \\
 k_4 &= f(t_i + h, y_i + h k_1 - h k_2 + h k_3)
 \end{aligned}
 \tag{52}$$

Dentro de este contexto, fórmulas del orden superior pueden obtenerse aplicando la metodología desarrollada.

#### Errores de truncamiento en el método de Runge-Kutta

Debido a la forma en que se obtienen las expresiones, el error de truncamiento local en un método de orden  $p$  tiene la forma:

$$e_t = K h^{p+1} + o(h^{p+2})
 \tag{53}$$

donde la constante  $K$  depende la función  $f(t,y)$  y de sus derivadas parciales de orden superior de una manera usualmente complicada. Para valores pequeños de  $h$ , el primer término domina el valor del error y es posible determinar, aunque no de una manera simple, cotas al valor de  $K$ . En general, tales cotas dependen de las cotas para

$f(t,y)$  y sus derivadas parciales, y del particular método de Runge-Kutta utilizado.

En orden de elegir un tamaño razonable de paso, se requiere estimar el error que se comete en cada paso de integración. Por un lado, el tamaño de paso debe ser suficientemente pequeño como para alcanzar la exactitud requerida, y por otro lado, suficientemente grande para mantener bajo control a los errores de redondeo (función del número de operaciones aritméticas efectuadas) y evitar un número excesivamente grande de evaluaciones de derivadas. Esta última consideración es muy importante, especialmente cuando la EDO es muy complicada y cada derivada requiere de un sustancial tiempo de cálculo. En efecto, en un método de orden  $p$ , deben evaluarse para cada paso,  $p$  derivadas de la función.

Una simplificación es considerar que en la Ecuación (53)  $K$  es constante; siendo el primer término el dominante. De esta forma, se puede demostrar, por

$$e_i \cong K h^5 \cong \frac{16}{15} (y_{n+1,2} - y_{n+1,1}) \quad (54)$$

ejemplo para  $p = 4$ , que una aproximación al error local de truncamiento se expresa: donde  $n$  es el paso de integración y los índices 1 y 2 indican evaluaciones para diferentes incrementos  $h_1$  y  $h_2$  respectivamente. En general la evaluación paso a paso es muy engorrosa y sólo se realiza cada cierta cantidad de pasos. Por otro lado, se han propuesto otros procedimientos para estimar el error, pero no son de utilidad en todos los casos.

Otro criterio a analizar es la *estabilidad*. Una solución se dice inestable si los errores introducidos en una etapa o paso (por ejemplo, por redondeo en las operaciones o por truncamiento o errores en la condición inicial especificada) se propagan a través de los próximos pasos sin cota alguna (divergen).

Para ciertos casos (dependiendo de la función y el estado inicial adoptado) pueden encontrarse comportamientos inestables (divergencia). A estos casos, que en general no dependen del algoritmo utilizado, sino de la función y de la condición inicial, se los llama de inestabilidad intrínseca o inherente. Por otro lado, para ciertas funciones y condiciones iniciales propuestas, dependiendo del método de integración usado, podemos o no encontrar inestabilidad. A este tipo se lo denomina inestabilidad parcial. Este fenómeno deriva de la longitud del paso adoptado.

Se puede demostrar que la cantidad  $[1+h(\partial f/\partial y)]$  llamada factor de propagación del paso, es fundamental en la propagación del error. Por lo tanto, si es positivo en un cierto intervalo, el error se incrementará sucesivamente. Esto se puede manejar mediante elecciones de  $h$  muy pequeños para mantener el factor cercano a uno. De otra forma, si consideramos que  $h(\partial f/\partial y)$  debe mantenerse esencialmente constante, tenemos otro criterio para elegir el valor de  $h$  durante la integración.

### XIII.6 MÉTODOS DE MÚLTIPLE PASO

Hasta aquí hemos analizado sólo métodos paso a paso que se basan en la estimación (extrapolación) de los valores de la función en el punto  $(i+1)$ , a partir de las derivadas y/o valores de la función en el punto  $i$ . Sin embargo, existen además otras familias de métodos que involucran en el cálculo el valor de la derivada en puntos anteriores  $i-1$ ,  $i-2$ , etc. A estos métodos se los denomina también explícitos o métodos predictores.

Existen además otras familias de métodos que involucran en el cálculo el valor de la derivada en el punto  $(i+1)$ , esto es  $f_{i+1}=f(t_{i+1}, y_{i+1})$ , que depende del valor de la función en el punto que se desea calcular,  $y_{i+1}$ , el cual no se conoce. Ello implica que debe recurrirse a métodos iterativos. Es por eso que a estos métodos se los denomina también implícitos a diferencia de los explícitos anteriormente mencionados. Para entender el mecanismo de estos algoritmos, primero repasemos la metodología utilizada en los métodos paso a paso explícitos, hasta ahora vistos. En general, dada una expresión:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

con la condición inicial  $y_0 = y(t_0)$ . Utilizando, por ejemplo, el Método de Euler a través de integraciones sucesivas tenemos:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \int_{t_0}^{t_0+h=t_1} f(t_0, y_0) dt \\ y_2 &= y_1 + \int_{t_1}^{t_1+h} f(t_1, y_1) dt \\ &\quad \cdot \\ &\quad \cdot \\ y_{i+1} &= y_i + \int_{t_i}^{t_i+h} f(t_i, y_i) dt \end{aligned}$$

o sea que

$$y_{i+1} = y_0 + \sum_{n=0}^i \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t_n, y_n) dt \quad (55a)$$

Para una integración que involucra  $(k+1)$  intervalos que terminan en el punto  $t_{i+1}$ , esta última expresión puede escribirse como:

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{t_{i-k}}^{t_{i+1}} \Psi_i(t) dt \quad (55b)$$

donde  $\Psi_i(t)$  es una función escalonada con ordenadas  $f_i = f(t_i, y_i)$  sobre los intervalos semiabiertos  $[t_j, t_{j+1})$ ;  $j = i - k, \dots, i$ . La integral en la Ecuación (55b) puede asimilarse como el área bajo la curva indicada en la Figura (XIII.4).

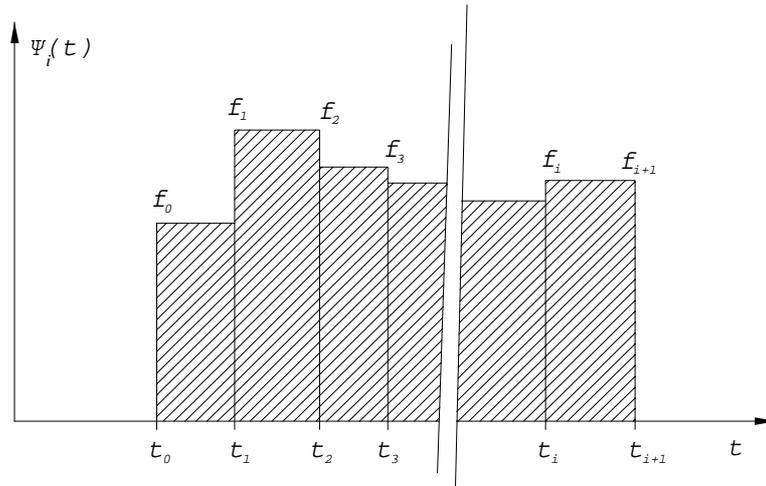


Figura XIII.4: Integración múltiple paso.

Como puede apreciarse, todos los métodos múltiple paso pueden describirse a través de la siguiente ecuación:

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{t_{i-k}}^{t_{i+1}} \Phi(t) dt \quad (56)$$

donde  $\Phi$  es un polinomio de interpolación, que pasa por los puntos  $(t_i, f_i)$ , apropiado para efectuar la integración aproximada. De esta manera, puede ahora razonarse en un sentido amplio, toda vez que para interpolar polinomios tenemos varias metodologías (Lagrange, Newton, etc.), basadas en general en tres estrategias características para determinar los coeficientes del polinomio de grado  $p$ :

$$\Phi = \sum_{n=0}^p a_n t^n$$

Las mismas son: la interpolación por diferencias hacia adelante, hacia atrás o

centradas. Si se suponen a todos los puntos igualmente espaciados ( $\Delta t = h$ ), cuando nos basamos en diferencias hacia adelante, nos comenzamos en el extremo izquierdo del intervalo (ver Figura (XIII.4)), tomando  $\Delta t_1 = (t_1 - t_0)$ ,  $\Delta t_2 = (t_2 - t_1)$ , y así sucesivamente.

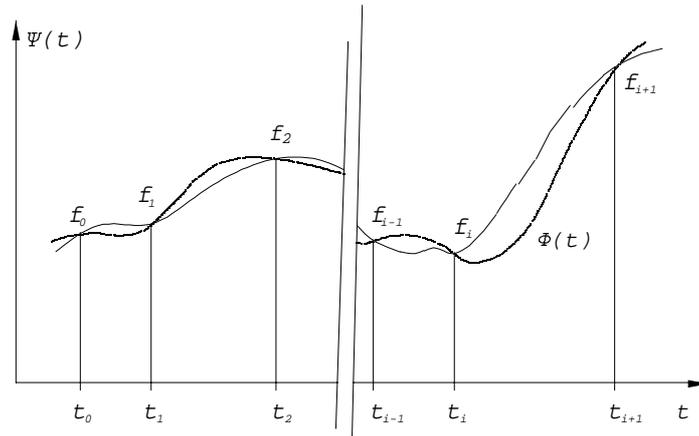


Figura XIII.5: Integración abierta múltiple paso.

Conocidos los puntos  $t_0, t_1, \dots, t_i$ , se busca el polinomio que pase por todos los puntos, extrapolando el valor de  $(t_{i+1}, f_{i+1})$  (ver Figura (XIII.5)). A esta fórmula de integración se la conoce como *fórmula de integración abierta*, y es muy sencillo demostrar (aplicando la fórmula de interpolación de Newton para polinomios de grado  $p$ ) las siguientes expresiones:

Para  $p = 3$ :

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (55 f_i - 59 f_{i-1} + 37 f_{i-2} - 9 f_{i-3}) \quad (57)$$

$$\varepsilon = o(h^5)$$

O bien para  $p = 5$ :

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3}{10} h (11 f_i - 14 f_{i-1} + 26 f_{i-2} - 14 f_{i-3} + 11 f_{i-4}) \quad (58)$$

$$\varepsilon = o(h^7)$$

Si en cambio utilizamos fórmulas de integración cerradas, el polinomio de interpolación ahora no sólo debe pasar por los puntos conocidos  $(t_0, t_1, \dots, t_i)$  sino además por  $(t_{i+1}, f_{i+1})$ . Aquí utilizamos las fórmulas de diferencias hacia atrás, basándonos en el extremo derecho del intervalo  $\Delta t_1 = (t_{i+1} - t_i)$ ,  $\Delta t_2 = (t_i - t_{i-1})$ , y así sucesivamente. Nuevamente, es fácil demostrar a partir del procedimiento de Newton para interpolación de un polinomio de grado  $p$  usando diferencias finitas (propagación hacia atrás), las siguientes fórmulas para la estimación:

Para  $p = 3$ :

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

$$\varepsilon = o(h^5)$$
(59)

O bien para  $p = 5$ :

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} (7 f_{i+1} + 32 f_i + 12 f_{i-1} + 32 f_{i-2} + 7 f_{i-3})$$

$$\varepsilon = o(h^7)$$
(60)

Como puede observarse, en estas dos últimas expresiones para el cálculo de  $y_{i+1}$ , debemos disponer en el miembro derecho, de los valores de  $f_{i+1}$ , que a su vez dependen de  $y_{i+1}$ . Esto nos conduce a la necesidad de un método iterativo, que implica más esfuerzo de cálculo, pero permite, en general, reducir el error de integración.

### XIII.7 MÉTODOS PREDICTORES-CORRECTORES

Para aplicar los métodos predictores o de interpolación abierta, son necesarios los primeros valores, por ejemplo  $f_i, f_{i-1}, f_{i-2}$  y  $f_{i-3}$  e  $y_i$  en la Ecuación (57). Éstos pueden obtenerse arrancando a partir de la condición inicial  $y(t_0)$  por medio de los métodos explícitos de Euler, Runge-Kutta, etc. Generados los primeros valores contiguos al punto inicial o de arranque, puede entonces aplicarse cualquiera de los métodos de interpolación o predictores. En efecto, a partir de los primeros puntos  $0, 1, \dots, i$ , se calcula la función en  $(i+1)$  sin necesidad de iteraciones (por ejemplo, Ecuaciones (57) o (58)). En cambio, ya vimos, que para utilizar las Ecuaciones (59) y (60) debe recurrirse a métodos iterativos, propios de los métodos implícitos o de interpolación cerrada. Ello implica que debe adoptarse (además de los cálculos que recurren a métodos explícitos para la fase de arranque) un valor inicial para iniciar la serie de iteraciones, el cual puede incidir fuertemente en el tiempo de cómputo y en la posibilidad de convergencia misma. Es por ello que se requiere para la

aplicabilidad de los métodos implícitos una pertinente manera de inicializar (estimar) el valor de  $y_{i+1}$  o  $f_{i+1}$ . Una forma inteligente de hacerlo es utilizar los métodos predictores para encontrar un valor (estimación) de  $y_{i+1}$ , y tomar a éste como inicialización en un método corrector. Esta estrategia origina una gama de métodos llamados predictores-correctores. Obviamente, estos métodos tienen la ventaja de minimizar el número de iteraciones de los métodos de interpolación cerrada, y además, conservan un error menor que los de interpolación abierta. Sin embargo, implican un número importante de evaluaciones. Como regla general, se considera que en la etapa iterativa (correctora), se deben emplear a la sumo dos o tres iteraciones, por lo que el paso  $h$  debe ser lo suficientemente pequeño para lograr buenas estimaciones en la etapa estimativa (predictora), y garantizar una convergencia rápida. Por otro lado, el paso debe ser lo suficientemente largo como para minimizar el error de redondeo acumulado por el número de operaciones a realizar, a la vez de reducir el tiempo de cómputo para cubrir el horizonte de tiempo de integración especificado.

Como veremos en las aplicaciones particulares en el Capítulo XIV, en general, para procesos simples, ya sea descritos por una ecuación o por un sistema de ecuaciones diferenciales de elevada magnitud, en la mayoría de los casos, los métodos sencillos de un sólo paso (Euler, Runge-Kutta de cuarto orden, etc.) son más que suficientes y compiten muy bien en tiempo de cálculo con los métodos implícitos o los predictores-correctores. Sin embargo, para casos en los cuales un sistema de ecuaciones diferenciales presenta un comportamiento *stiff*, que por definición involucra a variables cuya velocidad de cambio es muy diferente a otras (constantes de tiempo muy diferentes en la dinámica de un sistema físico, por ejemplo), resulta de aplicación indispensable la familia de métodos implícitos, con estrategias predictivas-correctivas (Capítulo XV). En la práctica, es conveniente seleccionar para las etapas correctivas y predictivas algoritmos del mismo orden de error, y además, en la etapa de arranque del método, utilizar valores del incremento  $h$  muy pequeños (etapa de estimación de los primeros valores con los cuales disparar el método predictivo), y durante la integración, utilizando criterios como los derivados a partir de fórmulas similares a la Ecuación (55), ir incrementando el paso según sea posible.

Un método predictor-corrector muy conocido es el método de Adams-Moulton, cuya etapa de predicción se calcula de la siguiente forma:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (55 f_i - 59 f_{i-1} + 37 f_{i-2} - 9 f_{i-3}) \quad (61)$$

$$\varepsilon = o(h^5)$$

y la etapa correctora:

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (9 f_{i+1} + 19 f_i - 5 f_{i-1} + f_{i-2}) \quad (62)$$

$$\varepsilon = o(h^5)$$

Existen muchos otros propuestos, tales como el Método de Milne, el de Hamming, etc. Todos ellos se basan en una filosofía general similar a la recientemente bosquejada.

Por otra parte, combinando los principios de los métodos simples de un paso, en los cuales se realiza la evaluación de las derivadas de la función durante el paso de integración, y los de los métodos multipaso, en los cuales se utiliza información de los pasos previos, puede obtenerse una familia de métodos muy potentes. Uno de ellos es muy utilizado, en particular cuando el sistema es *stiff*, conociéndose como Método de Gear. Para profundizar en estos temas se recomienda al lector la literatura referenciada al final del capítulo.

### XIII.8 SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES

Planteamos ahora la solución del siguiente sistema de  $n$  ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, con variables independientes  $y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$ :

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dt} &= f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ \frac{dy_n}{dt} &= f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{aligned} \quad (63)$$

con las siguientes condiciones iniciales:

$$\begin{aligned}
 y_1(t_0) &= y_1^0 \\
 y_2(t_0) &= y_2^0 \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 y_n(t_0) &= y_n^0
 \end{aligned}$$

Dado que utilizamos para la solución del sistema un algoritmo numérico, cada una de las Ecuaciones (63) podría tratarse en forma independiente, a partir del punto inicial conocido. Más aún, para cada ecuación del sistema, se podría plantear una estrategia (método) de resolución diferente, ya que se aplican en paralelo y simultáneamente, en cada paso de integración. Esto generalmente es válido tanto para los métodos implícitos como explícitos. No obstante, por criterios de practicidad se utiliza en lo posible el mismo método para todo el sistema. En efecto, derivar ecuaciones para estimar una cota de error resulta muy tedioso, y virtualmente imposible. Por otra parte, cuando se utilizan los métodos multipaso, se debe recurrir a métodos iterativos con sistemas de ecuaciones no lineales, con todos los inconvenientes que ello implica, en particular en la convergencia del sistema.

En síntesis, la filosofía es similar, pero ahora todas las etapas del algoritmo implican un álgebra matricial (recordar el análisis del Capítulo IV) para resolver sistemas de ecuaciones no-lineales. Además, la estimación de la cota del error, su dependencia con el paso, la anticipación de estabilidad del método, etc., se complican sustancialmente. En la práctica, se experimenta con distintos pasos a los efectos de verificar la performance del método y optimizar el desempeño del mismo, dado un sistema de ecuaciones a resolver. Cuando se utilizan métodos multipaso, predictores-correctores, en los cuales se plantea el cambio del paso  $h$  durante la integración, los criterios para realizarlos son similares a los métodos utilizados para una sola ecuación, pero más dificultosos de aplicar.

Por otra parte, al igual que lo discutido en el Capítulo IV al referirnos a la forma de las matrices de coeficientes de un sistema de ecuaciones de elevada dimensión, que en muchos problemas de ingeniería es rala, (por ejemplo, cascadas múltiple-etapa, elementos estructurales en mecánica, etc.), deben aplicarse todas las técnicas ya discutidas que permitan manipular el sistema y obtener soluciones en pocas iteraciones a los efectos de minimizar el tiempo de cálculo. Esto es sumamente importante en los casos en los cuales el sistema es *stiff* y altamente no-lineal, ya que aquí debe recurrirse a métodos multipaso similares a los discutidos anteriormente.

Por último, cabe recordar que los métodos discutidos en este capítulo no sólo

se aplican a sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. En efecto, si enfrentamos la solución de un sistema de segundo orden, por ejemplo:

$$\frac{dy^2}{dt} = f(y', y, t) \quad (64)$$

podemos plantear, mediante sustitución de variables, lo siguiente:

$$\frac{dy}{dt} = u = f(u, t, y) \quad (65)$$

entonces,

$$\frac{du}{dt} = f'(u, y, t) \quad (66)$$

Por lo que la Ecuación (64) se ha convertido en el sistema constituido por las Ecuaciones (65) y (66). Este razonamiento es válido cualquiera sea el orden de la ecuación diferencial (64), según vimos en la Sección II.

### PROBLEMAS PROPUESTOS

- P1) Encontrar la solución del siguiente problema de valores iniciales, utilizando los primeros cuatro términos de la serie de Taylor, para  $t = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$  y  $1.0$ :

$$y' = \frac{1}{2} (1 + t) y^2$$

$$y(0) = 1$$

- P2) Resolver el Problema (1) aplicando el Método de Euler.
- P3) Utilizar el Método de Heun (Ecuaciones (43) y (44)) para resolver la EDO del Problema (1) y comparar los resultados obtenidos con los del Problema (2).
- P4) Escribir un programa que utilice el Método de Euler para resolver la EDO:  $f(t, y) = t + y$  con la condición inicial  $y(t_0) = y(0) = 0$ . Integrar la ecuación en el intervalo  $0 \leq t \leq t_{\max}$  utilizando diferentes tamaños de paso,  $h$ . Imprimir

### Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

los resultados después de  $k$  pasos (por ejemplo, para  $t = t_0, t_k, t_{2k}, \dots$ ) y comparar los resultados con la solución analítica.

- P5) Reescribir el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias como un sistema de EDO's:

$$\frac{d^3y}{dt^3} = t^2 y \frac{d^2y}{dt^2} - y \frac{dz}{dt}$$

$$\frac{d^3z}{dt^3} = t z \frac{dz}{dt} + \frac{dy}{dt}$$

- P6) Considerar la EDO

$$\frac{dy}{dt} = 100y - 101e^{-t} - 100$$

con la condición inicial  $y(0) = 2$ . Si se ignoran los errores de redondeo, mostrar que el error de discretización de la solución de esta ecuación mediante el Método de Euler es:

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i (1 + 100h) - \frac{h^2}{2} e^{\xi_{i+1}}$$

con  $t_i < \xi_i < t_{i+1}$ , o

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_0 (1 + 100h)^i - \frac{h^2}{2} [e^{-\xi_i} + (1 + 100h) e^{-\xi_{i-1}} + \dots + (1 + 100h)^{i-1} e^{-\xi_1}]$$

Considere la solución de la ecuación en el intervalo  $0 \leq t \leq 1$ . Investigue la estabilidad del Método de Euler en la solución de la ecuación dada para un error inicial  $\varepsilon_0 = 0.0001$  y para diversos tamaños de paso  $h = 0.01, 0.001$ , etc.

- P7) Resolver la EDO del Problema (1) aplicando el Método de Runge-Kutta de 3er. orden (Ecuación (48)). Luego, utilizar el algoritmo de 4to. orden.

Comparar los resultados.

P8) Integrar la EDO:

$$\frac{dy}{dt} - 3t^4 - t + 2 = 0$$

$$\text{con } y(0) = 0$$

desde  $t_0 = 0$  hasta  $t_{10} = 5$  utilizando el Método de Runge-Kutta de 3er. orden, con un tamaño de paso  $h = 0.5$ .

P9) En el Problema (8), estimar un límite superior para el error total en el valor calculado de  $y$  para  $t_{10} = 5$ . Suponer que el error de redondeo es despreciable, esto es, el error total está dado por el error total de truncamiento:

$$\varepsilon_{10} = y_{10} - y(t_{10})$$

P10) Desarrollar una formulación general para los métodos de Runge-Kutta de 4to. orden, comparables al descrito en detalle para los métodos de 2do. orden y delineado para los métodos de 3er. orden. Si se parte de la Ecuación (49) y se expande cada uno de los  $k_i$  con  $i = 1, 2, 3, 4$  en series de Taylor como función de dos variables y se igualan los coeficientes de cada *potencia de  $h \leq 4$*  en la Ecuación (49) con aquellos de la misma potencia de  $h$  en la Ecuación (13), ¿cuál es el sistema de ecuaciones que describe a los parámetros de cuarto orden comparable con las Ecuaciones (41) para los métodos de 2do. orden? ¿Cuántos parámetros deben especificarse para determinar un método particular de 4to. orden? Mostrar que las Ecuaciones (50), (51) y (52) satisfacen el sistema de ecuaciones desarrollado previamente.

P11) El Método de Milne es un método predictor-corrector para resolver EDO's con error de truncamiento de  $o(h^5)$ . Requiere conocer la solución  $y$  y el valor de su derivada  $y'$ , en los primeros cuatro pivotes, para aplicarlo y continuar la solución del mismo. Estos valores de  $y$  pueden obtenerse desarrollando la función en serie de potencias o aplicando alguno de los métodos de Euler o Runge-Kutta. Resolver la EDO del Problema (1) utilizando el algoritmo propuesto por Milne:

$$y_{i+1, p} = y_{i-3} + \frac{4}{3} h (2 f_{i-2} - f_{i-1} + 2 f_i)$$

$$y_{i+1, c} = y_{i-1} + \frac{1}{3} h (f_{i-1} + 4 f_i + f_{i+1})$$

para  $t = 0.4, 0.5, 0.6$  y  $0.7$ . Utilizar la solución exacta dada para  $t = 0.0, 0.1, 0.2$  y  $0.3$ . Comparar los resultados con los obtenidos en los Problemas (1) y (7).

P12) Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$y' = y + z$$

$$z' = z - y$$

con las condiciones iniciales  $y(0) = 0.1$  y  $z(0) = 0.2$ .

#### **BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA**

- ▶ Carnahan, B., H. A. Luther, y J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1969).
- ▶ Cohen, A. M., J. F. Cutts, R. Fielder, D. E. Jones, J. Ribbans, y E. Stuart, *Análisis Numérico*, Editorial Reverté S. A., Barcelona (1977).
- ▶ Hamming, R. W., *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw-Hill, New York (1962).
- ▶ Hildebrand, F. B., *Introduction to Numerical Analysis*, McGraw-Hill Inc., New York (1956).
- ▶ Hornbeck, R. W., *Numerical Methods*, Quantum Publishers, Inc., New York.
- ▶ Lapidus, L., *Digital Computation for Chemical Engineers*, McGraw-Hill Inc, New York (1962).
- ▶ Luthe, R., A. Olivera y F. Schutz, *Métodos Numéricos*, Editorial Limusa, México (1978).
- ▶ Milne, W. E., *Numerical Solution of Differential Equations*, John Wiley and Sons, New York (1953).

---

#### **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- ▶ O'Neill, P. V., *Advanced Engineering Mathematics*, 3ra. Ed., Wadsworth, Inc., USA (1991).
- ▶ Perry, J. H., *Chemical Engineers Handbook*, McGraw-Hill, USA.
- ▶ Ralston, A. y P. Rabinowitz, *First Course in Numerical Analysis*, McGraw-Hill Inc., New York (1978).