

Capítol 7

Solucions aproximades i estudi qualitatiu

Tema 7 de l'assignatura Mètodes Numèrics de l'Enginyeria Química de la UPC. Versió revisada el 20 de desembre del 2007.

©Dret de còpia propietat de Jaume Amorós Torrent. Es permet usar i difondre aquest text amb finalitats no comercials, sempre que es citin l'autor i l'origen, per exemple mantenint-hi aquest avís. Per a qualsevol altre ús heu de demanar autorització a l'autor a

<http://www.ma1.upc.edu/~amoros>

7.1 Solucions locals

Problema Quan una edo té coeficients no constants

$$a_n(x)y^n + \dots + a_1(x)y' + a_0(x)y = f(x)$$

no sabem/podem trobar-ne una solució exacta en la majoria de casos.

Solució Calcular solucions aproximades. Com ho fem? *Localment*, a través del mètode de la sèrie de potències: usem l'edo per anar trobant la sèrie de Taylor de la solució.

Exemple 7.1 (Equació d'un pèndol de debò).

$$\begin{cases} y'' + \sin(y) = 0 \\ y(0) = 1, y'(0) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
y'' &= -\sin y \Rightarrow y''(0) = -\sin(y(0)) = -\sin 1 \simeq -0,8415 \\
y''' &= -\cos y \cdot y' \Rightarrow y'''(0) = -\cos(y(0)) \cdot y'(0) = 0 \\
y^{(4)} &= -\sin y \cdot y' - \cos y \cdot y'' \Rightarrow y^{(4)}(0) = \sin 1 \cdot \cos 1 \simeq 0,4547 \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Exemple 7.2.

$$x^2 y' + y = 0$$

$$\begin{aligned}
\text{Si } y &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n + \dots \\
y' &= a_1 + 2a_2 x + \dots + n a_n x^{n-1} + \dots
\end{aligned}$$

Aleshores,

$$\begin{aligned}
x^2 y' + y &= (a_1 x^2 + 2a_2 x^3 + \dots + n a_n x^{n+1} + \dots) + \\
&+ (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n + \dots) = 0
\end{aligned}$$

\Rightarrow Els coeficients del terme independent, de x , de x^2 , de $x^n \forall n \geq 1$ han de ser 0. Així tenim

$$\begin{aligned}
a_0 &= 0 \text{ (únic terme independent)} \\
a_1 &= 0 \text{ (únic coeficient de grau 1)} \\
a_1 + a_2 &= 0 \Rightarrow a_2 = 0 \\
2a_2 + a_3 &= 0 \Rightarrow a_3 = 0 \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Per tant, $a_n = 0$ per tot n i $y(x) = 0$.

Però aquesta no és l'única solució de l'edo!:

$$x^2 \frac{dy}{dx} + y = 0 \Rightarrow \frac{dy}{y} = -\frac{dx}{x^2} \Rightarrow \ln(y) = \frac{1}{x} + C, C \in \mathbb{R}$$

És a dir, la solució general és $y(x) = D e^{\frac{1}{x}}$, $D \in \mathbb{R}$

Quina és la diferència entre els exemples 7.1 i 7.2? L'equació de l'exemple 7.1 està definida per tot $x \in \mathbb{R}$, mentre que la derivada de l'equació de l'exemple 7.2 desapareix quan $x = 0$.

Quan posem l'equació 2 en forma normal, obtenim $y' = -\frac{1}{x^2}y$, que té una *singularitat* en $x = 0$ pel coeficient de y . Aquest és l'únic problema que hem de vigilar.

Definició 7.3. Si tenim una edo en forma normal

$$y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}),$$

diem que un punt $x = x_0$ és *singular* si $f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)})$ té una singularitat en $x = x_0$ (denominador que s'anul·la, terme que va a infinit...).

Diem que $x = x_0$ és un valor *regular* si no és singular.

Ara, la demostració del teorema de Cauchy que vam explicar es pot adaptar, i dóna:

Teorema 7.4. Si $y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)})$ és una edo amb f analítica real i $x = x_0$ és un punt regular per l'edo, tota la sèrie de potències en $x - x_0$ de y que obtenim de l'edo té un radi de convergència $\rho > 0$.

Observació 7.5. El radi de convergència d'una d'aquestes solucions no pot passar mai del valor singular de x més proper.

Corol·lari 7.6 (Error comès en aquestes aproximacions). Si tenim un PVI

$$\begin{cases} y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \\ y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y_1, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1} \end{cases}$$

i calculem les derivades $y^{(n)}(x_0), \dots, y^{(N)}(x_0)$, la solució aproximada

$$\bar{y}(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + \dots + \frac{y^{(N)}(x_0)}{N!}(x - x_0)^N$$

té un error

$$|y(x) - \bar{y}(x)| = \left| \frac{y^{(N+1)}(\theta)}{(N+1)!}(x - x_0)^{N+1} \right| = O\left((x - x_0)^{N+1}\right) \quad (\theta \in (x_0, x))$$

Demostració. L'error és el residu en la sèrie de Taylor. □

Exemple 7.7 (Continuació de l'exemple 7.1).

$$\begin{cases} y'' + \sin(y) = 0 \\ y(0) = 1, y'(0) = 0 \end{cases}$$

Hem vist: $y''(0) = -\sin 1$, $y'''(0) = 0$, $y^{(4)}(0) = \sin 1 \cdot \cos 1$

Per tant,

$$\bar{y}(x) = 1 - \frac{\sin 1}{2}x^2 + \frac{\sin 1 \cdot \cos 1}{4!}x^4$$

és solució aproximada en un entorn de $x = 0$, amb error $O(x^5)$ (molt petit mentre x sigui proper a 0).

7.2 Mètodes iteratius

Problema Calcular la sèrie de potències d'una solució $y(x)$ en $x = x_0$ dóna una aproximació molt bona de $y(x)$ a prop de x_0 , però, a mesura que ens allunyem, l'error

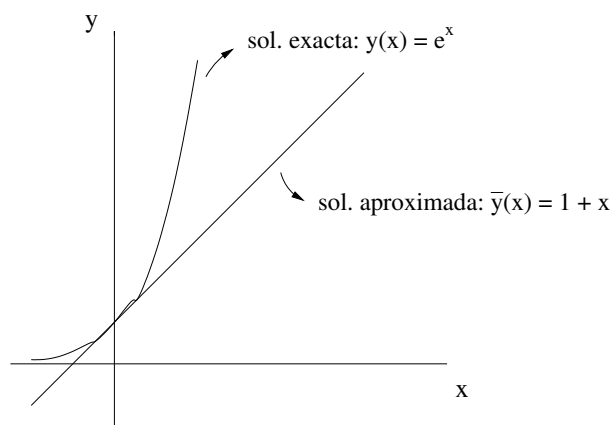
$$\left| \frac{y^{(N+1)}(\theta)}{(N+1)!} (x - x_0)^{N+1} \right|$$

creix.

Exemple 7.8.

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

$\Rightarrow y'(0) = 1$ i tenim



L'error $|y(x) - \bar{y}(x)|$ creix exponencialment sigui quin sigui el grau del polinomi de Taylor de $y(x)$ que calculem.

Solució Els mètodes iteratius:

Pas 1: Calculem els primers termes de la sèrie de Taylor de la solució $y(x)$

Pas 2: Aproximem la solució per la sèrie de Taylor truncada $\bar{y}(x)$ des de x_0 fins a $x_0 + h$

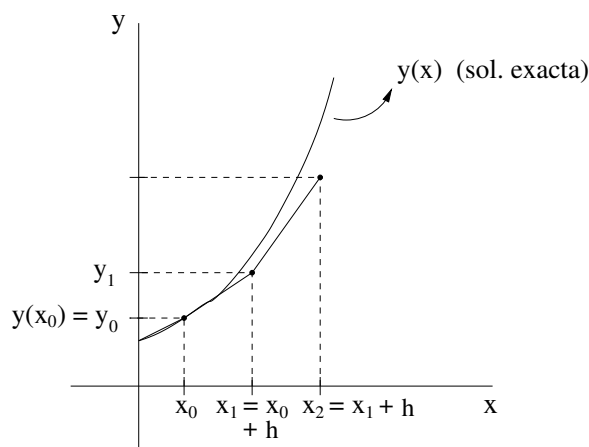
Pas 3: En $x_0 + h$ calculem les condicions inicials que ens dóna $\bar{y}(x)$ (com si fos un spline) i tornem a començar pel pas 1

Exemple original: el mètode d'Euler per edos d'ordre 1

Pas 1: Es calcula la sèrie de Taylor de $y(x)$ fins a ordre 1

Pas 2: Aquesta $\bar{y}(x)$ és la recta tangent, que seguim de x_0 a $x_0 + h$

Pas 3: En $x_0 + h$ repetim el procés i anem fent una poligonal, amb pas en x constant h



Deduïm ara la fórmula del mètode d'Euler. Suposem que tenim un PVI:

$$(*) \quad \begin{cases} y'(x) = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Com calculem la recta tangent a $y(x)$ en $x = x_0$? Sabem que passa per (x_0, y_0) i que té pendent $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$ (donada per l'edo (*)), és a dir, la recta tangent és

$$\bar{y}(x) - y_0 = y'(x_0)(x - x_0)$$

Així, $\bar{y}(x) = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0)$.

Seguim aquesta tangent de x_0 a $x_1 = x_0 + h$, on obtenim

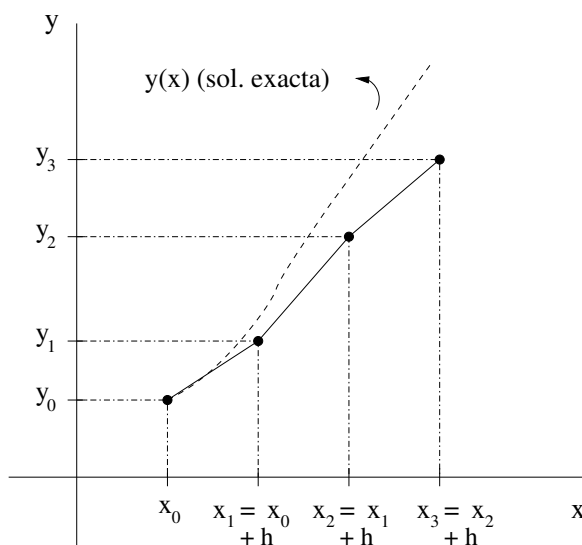
$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0) \cdot h$$

Ara, tornem a seguir de x_1 a $x_2 = x_1 + h$ la tangent a la solució per (x_1, y_1) i tenim

$$y_2 = y_1 + f(x_1, y_1) \cdot h, \text{ on } y_2 = \bar{y}(x_2)$$

I anem continuant:

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 + h, & y_3 &= y_2 + f(x_2, y_2) \cdot h \\ x_4 &= x_3 + h, & y_4 &= y_3 + f(x_3, y_3) \cdot h \\ & & & \vdots \end{aligned}$$



La línia poligonal per $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3) \dots$ és el graf de $\bar{y}(x)$ que aproxima $y(x)$.

Exemple 7.9.

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta d'aquesta edo és la funció $y(x) = e^x$. Calculem la solució aproximada per $x \in [0, 1]$ pel mètode d'Euler.

Triem h per anar de $x = 0$ a $x = 1$ en 4 passos: $h = \frac{1-0}{4} = 0,25$.

Els valors de x on calcularem solucions aproximades són

$$x_0 = 0, \quad x_1 = x_0 + h = 0,25, \quad x_2 = x_1 + h = 0,5, \quad x_3 = 0,75, \quad x_4 = 1$$

Calculem ara els corresponents valors de y segons el mètode d'Euler:

$$y_0 = 1 \quad (\text{és la condició inicial})$$

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0) \cdot h = y_0 + y_0 \cdot h = 1 + 1 \cdot 0,25 = 1,25$$

$$y_2 = y_1 + f(x_1, y_1) \cdot h = y_1 + y_1 \cdot h = 1,25 + 1,25 \cdot 0,25 = 1,25^2 = 1,5625$$

$$y_3 = y_2 + f(x_2, y_2) \cdot h = y_2 + y_2 \cdot h = 1,25^2 + 1,25^2 \cdot 0,25 = 1,25^3 \simeq 1,9531$$

$$y_4 = y_3 + f(x_3, y_3) \cdot h = y_3 + y_3 \cdot h = 1,25^3 + 1,25^3 \cdot 0,25 = 1,25^4 \simeq 2,4414$$

Podem repetir l'exercici amb pas $h = \frac{1}{N}$, per N qualsevol, anant de $x = 0$ a $x = 1$. Aleshores, obtindrem

$$x_N = 1, \quad y_N = \left(1 + \frac{1}{N}\right)^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e = e^1$$

Així, el mètode d'Euler es torna exacte quan el pas $h \rightarrow 0$.

Mètode d'Euler vectorial

Aquest mètode serveix per calcular solucions aproximades de sistemes d'edos d'ordre 1. Recordem que podem convertir qualsevol edo d'ordre $n > 1$ en un sistema d'ordre 1, de manera que el mètode vectorial serveix per totes les edos en forma normal.

Si tenim el sistema:

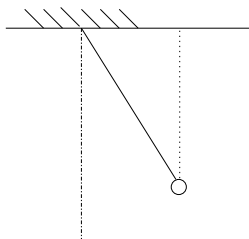
$$\begin{cases} \frac{d\vec{y}}{dt} = F(t, \vec{y}) & \text{amb } \vec{y}, F \text{ de } \mathbb{R}^n \\ \vec{y}(t_0) = \vec{y}_0 & \text{(la condició inicial)} \end{cases}$$

la recepta, amb pas h , és la següent:

$$\begin{aligned} t_1 &= t_0 + h, & \vec{y}_1 &= \vec{y}_0 + F(t_0, \vec{y}_0) \cdot h \\ t_2 &= t_1 + h, & \vec{y}_2 &= \vec{y}_1 + F(t_1, \vec{y}_1) \cdot h \\ t_3 &= t_2 + h, & \vec{y}_3 &= \vec{y}_2 + F(t_2, \vec{y}_2) \cdot h \\ & & & \vdots \end{aligned}$$

Exemple 7.10 (PVI del pèndol).

$$\begin{cases} \ddot{y} + \sin x = 0 \\ y(0) = 1 & \text{(posició inicial)} \\ \dot{y}(0) = 0 & \text{(velocitat inicial)} \end{cases}$$



Convertim l'edo d'ordre 2 en un sistema d'ordre 1:

- Incògnites:

$$\begin{aligned} y_1(t) &= y(t) \\ y_2(t) &= \dot{y}(t) \end{aligned}$$

- Equacions:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= y_2 \\ \frac{dy_2}{dt} &= \ddot{y}(t) = -\sin y = -\sin y_1 \end{aligned}$$

- Sistema:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\sin y_1 \end{pmatrix}$$

- Condicions inicials:

$$\vec{y}(0) = \begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0) \\ \dot{y}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ara apliquem el mètode d'Euler vectorial per calcular la solució aproximada per $t \in [0, \pi]$ en 4 passos.

El pas és $h = \frac{\pi-0}{4} = \frac{\pi}{4}$ i $F(t, \vec{y}) = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\sin y_1 \end{pmatrix}$

$$t_0 = 0, \quad \vec{y}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{la condició inicial})$$

$$\begin{aligned} t_1 = \frac{\pi}{4}, \quad \vec{y}_1 &= \vec{y}_0 + F(t_0, \vec{y}_0) \cdot h = \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + F\left(0, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right) \cdot h = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -\sin 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{\pi}{4} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ -\sin 1 \cdot \frac{\pi}{4} \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ -0,6609 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} t_2 = \frac{\pi}{2}, \quad \vec{y}_2 &= \vec{y}_1 + F(t_1, \vec{y}_1) \cdot h \simeq \\ &\simeq \begin{pmatrix} 1 \\ -0,6609 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0,6609 \\ -\sin 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{\pi}{4} \simeq \begin{pmatrix} 0,4809 \\ -1,3218 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} t_3 = \frac{3\pi}{4}, \quad \vec{y}_3 &= \vec{y}_2 + F(t_2, \vec{y}_2) \cdot h \simeq \\ &\simeq \begin{pmatrix} 0,4809 \\ -1,3218 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1,3218 \\ -\sin 0,4809 \end{pmatrix} \cdot \frac{\pi}{4} \simeq \dots \end{aligned}$$

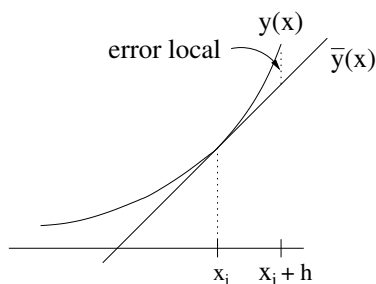
Discussió de l'error en el mètode d'Euler

Distingim dos menes d'error:

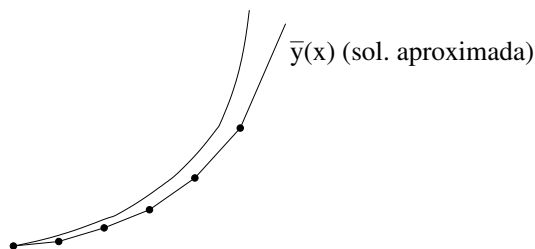
Error local En cada pas, partim d'un PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_j) = y_j \end{cases}$$

i, enlloc de la solució exacta $y(x)$, calculem la tangent:



Error global El mètode d'Euler comença en un punt (x_0, y_0) de la solució exacta, però a partir de $j = 1$ els punts (x_j, y_j) ja no són de la solució per culpa dels errors anteriors. Així, l'error s'acumula:



Calculem l'ordre de magnitud d'aquests errors:

- 1) L'error local és $O(h^2)$

Demostració. Si $y(x)$ és la solució exacta de

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

en desenvolupar $y(x)$ en sèrie de Taylor en $x = x_0$ tenim

$$\begin{aligned} y(x) &= y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + O(x - x_0)^2 = \\ &= \underbrace{y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0)}_{\text{solució aproximada } \bar{y}(x) \text{ d'Euler}} + O(x - x_0)^2 \end{aligned}$$

Així, per $x \in [x_0, x_0 + h]$, $|y(x) - \bar{y}(x)| = O(x - x_0)^2$ i, per tant, fins $x = x_0 + h$, $|y(x) - \bar{y}(x)| \leq O(h^2)$ \square

- 2) Error global

Aquest error només l'indiquem. Si $\bar{y}(x)$ és la poligonal d'Euler, és a dir, la solució aproximada de

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

en $x \in [a, b]$ amb pas h , l'error global $|y(x) - \bar{y}(x)|$ en tot $[a, b]$ és $O(h)$.

Per què?

- l'error local és $O(h^2)$ en cada pas
- fem $N = \frac{b-a}{h} = O(h^{-1})$ passos
- quan anem de x_j a x_{j+1} , l'error que tenim en y_{j+1} és del mateix ordre de magnitud que el de y_j (ho veurem a la secció que ve)

És conseqüència de la fórmula de l'error

Teorema 7.11. *Si calculem la solució aproximada d'Euler $\bar{y}(x)$ per un PVI*

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & f \in \mathcal{C}^1 \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

per $x \in [a, b]$, quan el pas $h \rightarrow 0$ tenim $\bar{y}(x) \xrightarrow{h \rightarrow 0} y(x)$ (la solució aproximada va a l'exacta).

I en el mètode d'Euler vectorial?

$$\begin{cases} \frac{d\vec{y}}{dt} = F(t, \vec{y}) & F \in \mathcal{C}^1 \\ \vec{y}(t_0) = \vec{y}_0 \end{cases}$$

L'error va igual:

- error local: $O(h^2)$
- error global: $O(h)$
- la solució aproximada $\bar{\vec{y}}(t)$ convergeix cap a $\vec{y}(t)$ quan el pas h va a 0.

Mètodes de Runge-Kutta

- En cada pas, en comptes de calcular la sèrie de Taylor fins a ordre 1 de la solució, calculem la sèrie de Taylor fins a ordre $k > 1$ (diem que k és l'ordre del mètode)
- Així tenim:
 - error local: $O(h^{k+1})$ (residu de la sèrie de Taylor)
 - error global: $O(h^k)$ (en acumular l'error local de $O(h^{-1})$ passos)

- A més: en comptes de calcular el polinomi d'ordre k $\bar{y}(x)$ a partir de $y(x_0), y'(x_0), \dots, y^{(k)}(x_0)$ i avaluar-lo en $x = x_0 + h$, fem una variant d'interpolació per trobar $\bar{y}(x_0 + h)$ a partir de \bar{y} en valors de x intermitjos

(Recordem: un polinomi de grau k queda determinat pel seu valor en $k + 1$ punts)

Runge-Kutta d'ordre 2: el mètode de Heun (RK2)

Considerem el PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Triem un pas h ; volem una solució aproximada $y_1 = \bar{y}(x_0 + h)$.

Fem:

$$\begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(x_0, y_0) \\ k_2 &= h \cdot f(x_0 + h, y_0 + k_1) \\ y_1 &= y_0 + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned}$$

En general, per passar de (x_j, y_j) a (x_{j+1}, y_{j+1}) fem:

$$\begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(x_j, y_j) \\ k_2 &= h \cdot f(x_j + h, y_j + k_1) \quad (x_{j+1} = x_j + h) \\ y_{j+1} &= y_j + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned}$$

Per què aquest mètode té ordre d'error local 3? Cal estudiar les sèries de Taylor de cada terme en h :

$$\begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(x_0, y_0) = h \cdot y'(x_0) \quad (y(x) \text{ és la solució de } y' = f(x, y)) \\ k_2 &= h \cdot f(x_0 + h, \underbrace{y_0 + k_1}_{\bar{y}(x_0+h) \text{ en mèt. Euler}}) = \\ &= h \cdot f(x_0 + h, y(x_0 + h) - O(h^2)) \end{aligned}$$

Fent el desenvolupament de Taylor respecte la segona variable (veure secció 3),

$$\begin{aligned} k_2 &= h \left[f(x_0 + h, y(x_0 + h)) + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot O(h^2) \right] = \\ &= h \cdot y'(x_0 + h) + O(h^3) \end{aligned}$$

Així,

$$\begin{aligned}\frac{k_2 - k_1}{h^2} &= \frac{y'(x_0 + h) - y'(x_0)}{h} + O(h) = \\ &= y''(x_0 + \frac{h}{2}) + O(h) = y''(x_0) + O(h)\end{aligned}$$

on en la segona igualtat hem fet servir la fórmula de diferències centrades per derivar y' (i hem utilitzat que $O(h) + O(h^2) = O(h)$), i en la tercera igualtat hem desenvolupat $y''(x_0 + \frac{h}{2})$ (i hem usat que $O(h) + O(h) = O(h)$).

Ara,

$$\begin{aligned}y_0 + \frac{k_1 + k_2}{2} &= y_0 + k_1 + \frac{k_2 - k_1}{2} = \\ &= y_0 + y'(x_0)h + \frac{1}{2}h^2(y''(x_0) + O(h)) = \\ &= \underbrace{y(x_0) + y'(x_0)h + \frac{1}{2}y''(x_0)h^2}_{\text{sèrie de Taylor de } y(x) \text{ fins ordre 2}} + O(h^3)\end{aligned}$$

Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4)

Els mètodes de Runge-Kutta d'ordre superior no són únics. El que presentem aquí és molt popular.

Considerem el PVI:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Volem estimar $y(\underbrace{x_0 + h}_{x_1})$ amb error $O(h^5)$.

Fem:

$$\begin{aligned}k_1 &= h \cdot f(x_0, y_0) \\ k_2 &= h \cdot f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 &= h \cdot f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_2) \\ k_4 &= h \cdot f(x_0 + h, y_0 + k_3)\end{aligned}$$

i finalment:

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = y(x_1) + O(h^5)$$

Per passar de (x_j, y_j) a (x_{j+1}, y_{j+1}) , amb $x_{j+1} = x_j + h$, cal aplicar la mateixa fórmula, canviant (x_0, y_0) per (x_j, y_j) .

Exemple 7.12. Tornem a la nostra "rata de laboratori" amb solució $y(x) = e^x$.

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Volem $y(1)$, aplicant el mètode RK4 amb només un pas ($h = 1$):

$$\begin{aligned} k_1 &= 1 \cdot f(0, 1) = 1 \quad (\text{aquí, } f(x, y) = y) \\ k_2 &= 1 \cdot f(1/2, 1, 5) = 1,5 \\ k_3 &= 1 \cdot f(1/2, 1 + 0,75) = 1,75 \\ k_4 &= 1 \cdot f(1, 1 + 1,75) = 2,75 \\ y_1 &= 1 + \frac{1}{6}(1 + 3 + 3,5 + 2,75) = 2,7083 \end{aligned}$$

El valor exacte és $y(1) = e \simeq 2,7183$.

Anem a comparar aquest càlcul de $y(1) = e$ amb el que havíem obtingut anteriorment. En el mètode d'Euler en 4 passos (pàgina 114),

$$y(1) \simeq 2,4414, \quad \text{error relatiu} \simeq 10\%$$

En el mètode RK4 d'un pas (avaluant f en 4 punts),

$$y(1) \simeq 2,7083, \quad \text{error relatiu} \simeq 0,4\% \quad (\text{molt millor!})$$

I per edos d'ordre superior? Les podem transformar en sistemes d'ordre 1, i aplicar els mètodes de Runge-Kutta vectorials.

Les fórmules són les mateixes que les dels RK2, RK4 vists aquí, només cal canviar la notació com en el mètode d'Euler.

$$x_j \leftrightarrow t_j, \quad y \leftrightarrow \vec{y}, \quad f(x, y) \leftrightarrow F(x, \vec{y}) \quad (F \text{ a valors vectorials})$$

Exercici 10. Aplicar el RK4 amb un sol pas per calcular $y(\pi)$ del PVI

$$\begin{cases} \ddot{y} + \sin y = 0 \\ y(0) = 1 \quad \dot{y}(0) = 0 \end{cases}$$

7.3 Estabilitat i rigidesa

Estabilitat

Tornem al tema de l'error en el càlcul de solucions de PVI. Aquests errors els dividim en:

- error local: a causa del mètode d'aproximació que fem
- error global: a causa dels errors locals anteriors acumulats, o que coneixem la condició inicial amb error...

Com es propaga aquest error global?

Exemple 7.13. Vegem alguns exemples de propagació de l'error.

1)

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta és $y(x) = e^x$.

Si el valor inicial que tenim és $\bar{y}(0) = 1 + \epsilon$, encara que resolguem exactament el PVI

$$\begin{cases} \bar{y}' = \bar{y} \\ \bar{y}(0) = 1 + \epsilon \end{cases}$$

tenim $\bar{y}(x) = (1 + \epsilon)e^x$ i un error $|y(x) - \bar{y}(x)| = \epsilon \cdot e^x$ que creix exponencialment.

2)

$$\begin{cases} y' = e^x \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta és $y(x) = e^x$.

Si resolem el problema amb condició inicial amb error

$$\begin{cases} \bar{y}' = e^x \\ \bar{y}(0) = 1 + \epsilon \end{cases}$$

La solució és $\bar{y}(x) = e^x + \epsilon$, i l'error no creix: $|\bar{y}(x) - y(x)| = \epsilon$.

3)

$$\begin{cases} y' = -y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La solució exacta és $y(x) = e^{-x}$.

Si tenim el PVI amb error

$$\begin{cases} \bar{y}' = -\bar{y} \\ \bar{y}(0) = 1 + \epsilon \end{cases}$$

la solució és $\bar{y}(x) = (1 + \epsilon)e^{-x}$, i l'error és: $|y(x) - \bar{y}(x)| = \epsilon \cdot e^{-x} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$ (l'error decreix exponencialment!).

Definició 7.14. Diem que un PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

és *estable* si per algun radi $\delta > 0$, si $|\bar{y}_0 - y_0| < \delta$ (per una pertorbació prou petita de la condició inicial) la solució del PVI inexacte

$$\begin{cases} \bar{y}' = f(x, \bar{y}) \\ \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

compleix que l'error $|y(x) - \bar{y}(x)|$ és decreixent en x_0 .

Diem que el PVI és *inestable* si no és estable.

Variants

- 1) Diem que una solució $\tilde{y}(x)$ de $y' = f(x, y)$ és estable per $x \in [a, b]$ si el PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(c) = d \end{cases}$$

per $c \in [a, b]$ i $d = \tilde{y}(c)$ és sempre estable.

- 2) Estabilitat per sistemes d'ordre 1
Un PVI

$$\begin{cases} \frac{d\vec{y}}{dt} = F(t, \vec{y}) \\ \vec{y}(t_0) = \vec{y}_0 \end{cases}$$

és estable si per tota pertorbació prou petita de la condició inicial (\vec{y}_0 amb $\|\vec{y}_0 - \vec{y}_0\| < \delta$, δ prefixat), l'error $\|\vec{y}(t) - \vec{y}(t)\|$ decreix en t_0 .

Ens els exemples anteriors, 3) és estable, 2) també, però pels pèls, i 1) és inestable.

Interpretació Quan calculem una solució aproximada $\bar{y}(x)$ per un mètode iteratiu (Euler, RK...), en cada pas del mètode resolem (aproximadament) un PVI, però a partir del segon pas és segur que la condició inicial té error. Si els PVI que anem trobant són estables, l'error acumulat $|\bar{y}(x) - y(x)|$ decreix i la solució $\bar{y}(x)$ final serà bona.

Si els PVI que anem trobant són inestables, l'error $|\bar{y}(x) - y(x)|$ creix en cada pas, i serà difícil que la solució $\bar{y}(x)$ sigui una aproximació bona de $y(x)$ després d'uns quants passos.

Exemple 7.15. Vegem alguns exemples d'edo's lineals a coeficients constants:

1) $y'' + 3y' + 2y = 0$

Equació característica: $m^2 + 3m + 2 = 0$ Arrels: $m = -1, -2$ Solució general: $y(x) = c_1e^{-x} + c_2e^{-2x}$ Si coneixem els valors de c_1, c_2 de la nostra solució amb error, tenim

$$\begin{aligned} |\bar{y}(x) - y(x)| &= |\bar{c}_1e^{-x} + \bar{c}_2e^{-2x} - c_1e^{-x} - c_2e^{-2x}| = \\ &= |(\bar{c}_1 - c_1)e^{-x} + (\bar{c}_2 - c_2)e^{-2x}| \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \end{aligned}$$

És a dir, l'error decreix a mesura que x creix i l'edo d'aquest exemple és estable amb qualsevol condició inicial.

2)

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

La solució general del sistema és

$$\vec{y}(t) = c_1 e^{2t} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\text{VEP de VAP } 2} + c_2 e^{-t} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix}}_{\text{VEP de VAP } -1}$$

Pertorbar les condicions inicials equival a pertorbar c_1, c_2 . L'error, aleshores, és

$$\|\vec{y}(t) - \bar{\vec{y}}(t)\| = \underbrace{\| (c_1 - \bar{c}_1)e^{2t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \|}_{\text{creix exp. quan } t \rightarrow \infty} + \underbrace{\| (c_2 - \bar{c}_2)e^{-t} \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} \|}_{\text{va a 0 exp. quan } t \rightarrow \infty}$$

Així, podem fer pertorbacions de c_1 tan petites com vulguem i l'error creix exponencialment. Per tant, aquests PVI són tots inestables.

La regla general que il.lustren aquests exemples és

Proposició 7.16. *Si una edo/sistema d'ordre 1 lineal a coeficients constants té alguna arrel/VAP λ amb $Re \lambda > 0$, els PVI amb aquesta edo són tots inestables. Si té totes les arrels/VAP's amb $Re \lambda < 0$, els PVI amb qualsevol condició inicial són estables.*

Ara hem de discutir el cas general. Estudiem primer les edo's:

Proposició 7.17. *El PVI*

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

amb $f \in C^1$ és:

- estable, si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) < 0$
- inestable, si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) > 0$

Demostració. Sigui $\bar{y}(x)$ la solució amb condició inicial pertorbada

$$\begin{cases} \bar{y}' = f(x, \bar{y}) \\ \bar{y}(x_0) = y_0 + \delta \end{cases}$$

on δ és l'error inicial.

Desenvolupem en sèrie de Taylor $y(x), \bar{y}(x)$:

$$\begin{aligned} y(x) &= \underbrace{y(x_0)}_{y_0} + \underbrace{y'(x_0)}_{f(x_0, y_0)}(x - x_0) + O(x - x_0)^2 \\ \bar{y}(x) &= \underbrace{\bar{y}(x_0)}_{y_0 + \delta} + \underbrace{\bar{y}'(x_0)}_{f(x_0, y_0 + \delta)}(x - x_0) + O(x - x_0)^2 \\ \bar{y}(x) - y(x) &= \delta + [f(x_0, y_0 + \delta) - f(x_0, y_0)](x - x_0) + O(x - x_0)^2 = \\ &= \delta + [f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \cdot \delta + O(\delta^2) - f(x_0, y_0)](x - x_0) + \\ &+ O(x - x_0)^2 \end{aligned}$$

Si desenvolupem f respecte de y (i tractem x_0 com a paràmetre fixat),

$$\bar{y}(x) - y(x) = \delta \cdot [1 + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)(x - x_0)] + \underbrace{O(\delta^2)(x - x_0) + O(x - x_0)^2}_{\text{no afecten al signe quan } \delta, x - x_0 \text{ petits}}$$

Així, si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) < 0$, per $x - x_0 > 0$ petit l'error $|\bar{y}(x) - y(x)| < \delta$.

Si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) > 0$, per $x - x_0 > 0$ petit tenim $|\bar{y}(x) - y(x)| > \delta$.

En tots dos casos, prenem $x - x_0$ petit per poder menysprear el terme de la cua $O(x - x_0)^2$. \square

Proposició 7.18 (Estabilitat per un sistema d'edos d'ordre 1). *Si tenim un PVI*

$$\begin{cases} \frac{d\vec{y}}{dt} = F(t, \vec{y}) & F : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n \quad C^1 \\ \vec{y}(t_0) = \vec{y}_0 \end{cases}$$

i denotem

$$J_y = \frac{\partial F}{\partial y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial y_n} \\ \frac{\partial F_2}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial F_2}{\partial y_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial F_n}{\partial y_n} \end{pmatrix}$$

(una mena de "Jacobiana" si ens oblidem de la variable t).

Aleshores, el PVI és

- estable, si $\operatorname{Re} \lambda < 0$ per tot VAP λ de J_y
- inestable, si J_y té algun VAP amb $\operatorname{Re} \lambda > 0$

La demostració d'aquesta última proposició va igual que en el cas d'una edo.

Exemple 7.19. Vegem alguns exemples d'aplicacions de la proposició:

1)

$$\begin{cases} y' = -\frac{1}{x^2}y \\ y(1) = 2 \end{cases}$$

Aquí,

$$f(x, y) = -\frac{1}{x^2}y, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = -\frac{1}{x^2} \quad \text{i} \quad \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = -\frac{1}{1} < 0$$

Per tant, el PVI és estable (si coneixem la condició inicial amb error petit, l'error $|\bar{y}(x) - y(x)|$ decreix encara més a mesura que $x > 1$ creix).

2)

$$\begin{cases} y' = \tan(y/x) \\ y(\pi/4) = 1 \end{cases}$$

Aquí,

$$\begin{aligned} f(x, y) &= \tan(y/x) \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= \frac{1}{\cos^2(y/x)} \cdot \frac{1}{x} \\ \frac{\partial f}{\partial y}(\pi/4, 1) &= \frac{1}{\cos^2(4/\pi)} \cdot \frac{4}{\pi} > 0 \end{aligned}$$

\Rightarrow PVI inestable

A més, veiem que la solució $y(x)$ serà inestable sempre que $x > 0$; si calculem $\bar{y}(x)$ per un mètode iteratiu, tindrem un error $|\bar{y}(x) - y(x)|$ creixent...

3)

$$\begin{cases} \ddot{y} + \sin y = 0 \\ y(0) = v_0, \quad y'(0) = v_1 \end{cases}$$

Convertim l'edo en un sistema

$$y_1(t) = y(t), \quad y_2(t) = \dot{y}$$

Així,

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = y_2 \\ \frac{dy_2}{dt} = \dot{y} = -\sin y = -\sin y_1 \end{cases}$$

amb condició inicial $\begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \end{pmatrix}$

Ara, $F(t, \vec{y}) = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\sin y_1 \end{pmatrix}$ i, per tant, $J_y = \frac{\partial F}{\partial y} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos y_1 & 0 \end{pmatrix}$

Si en calculem els VAP's,

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -\cos v_1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + (\cos v_1) = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \sqrt{\cos v_1}$$

Mentre $\cos y_1 > 0$, tenim un VAP de cada signe per J_y ; en conseqüència, la solució és inestable.

Mentre $\cos y_1 < 0$, J_y té VAP's imaginaris purs; en aquest cas, no podem dir si el problema és estable o inestable perquè el creixement de l'error dependrà de termes superiors de la sèrie de Taylor. El que sí podem afirmar és que el creixement o decreixement de l'error quan $\cos y_1 < 0$ serà lent.

Control de pas

Quan tenim un PVI (una edo o un sistema)

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

i el resollem aproximadament per un mètode iteratiu (Euler, RK4...):

- Mentre els successius PVI amb $y(x_0) = y_0, y(x_1) = y_1, \dots$ surtin estables, tenim l'error sota control fent el pas h petit.
- Si ens trobem en algun punt de la solució amb un $y(x_j) = y_j$ inestable, l'error $|\bar{y}(x) - y(x)|$ passa a créixer, normalment de manera exponencial en $x - x_j$. Cal fer el pas h molt petit.

La manera de gestionar el pas h i tenir alguna esperança que $\bar{y}(x)$ approximi la solució correcta $y(x)$ és usar alguna estratègia de control de pas.

Mètode típic: el RK14 amb control de pas

Idea Per cada pas h , calcularem $\bar{y}(x_0 + h)$ a partir de $\bar{y}(x_0)$ usant el mètode d'Euler (RK1) i un RK4. Compararem els dos resultats, i si la diferència entre ells és més gran del que considerem admissible, repetirem el càlcul amb pas h més petit.

Algorisme detallat

- Tenim un PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

- Fixem l'error local màxim ϵ , i el pas inicial h .
- Calculem $\bar{y}(x_0 + h)$ dues vegades (usant RK1 i usant RK4) amb pas h .
- Si la diferència entre els dos valors de $\bar{y}(x_0 + h)$ és menor que ϵ , triem el valor donat pel RK4, l'admetem, multipliquem h per 1.2 i passem al PVI amb $y(x_1) = y_1$, on y_1 és el valor calculat.
- Si la diferència entre els dos valors calculats de $\bar{y}(x_0 + h)$ és més gran que ϵ , no ens fiem de cap d'ells. Multipliquem el pas h per 0.5 i tornem a començar el càlcul de la solució a partir de $y(x_0) = y_0$ amb el nou pas.

Aquest procés continua fins que haguem anat de x_0 al valor final de x que vulguem.

Exemple 7.20. Els mètodes per resoldre edo's de MATLAB són d'aquesta mena:

- ode45: RK4 + RK5 amb control de pas.
- ode15: Euler + RK5 amb control de pas

Rigidesa (stiffness)

Ens falta per discutir una darrera complicació de la resolució iterativa d'edos: diem que un PVI és estable quan l'error $|\bar{y}(x) - y(x)|$ en un mètode iteratiu decreix *per pas* h *prou petit*. Però segons quin mètode numèric usem, el pas h el podem necessitar molt petit, o no tant (quan el mètode és més ràpid).

Exemple teòric Tornem a mirar com es propaga l'error en un mètode d'Euler de pas h fixat:

$$\text{PVI exacte: } \begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad \text{PVI aproximat: } \begin{cases} \bar{y}' = f(x, \bar{y}) \\ \bar{y}(x_0) = y_0 + \delta \end{cases}$$

Comparem les solucions:

$$\begin{aligned} y(x_0 + h) &= \underbrace{y(x_0)}_{y_0} + \underbrace{y'(x_0)}_{f(x_0, y_0)} \cdot h + O(h^2) \\ \bar{y}(x_0 + h) &= \underbrace{\bar{y}(x_0)}_{y_0 + \delta} + \underbrace{\bar{y}'(x_0)}_{f(x_0, y_0 + \delta)} \cdot h + O(h^2) \\ \bar{y}(x_0 + h) - y(x_0 + h) &= \delta + [f(x_0, y_0 + \delta) - f(x_0, y_0)]h + O(h^2) \end{aligned}$$

Desenvolupant f respecte de y (i deixant x_0 com a paràmetre fix),

$$\begin{aligned} \bar{y}(x_0 + h) - y(x_0 + h) &= \delta + [f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \cdot \delta + O(\delta^2) - f(x_0, y_0)]h + \\ &+ O(h^2) = \delta \cdot [1 + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \cdot h] + \underbrace{O(\delta^2) \cdot h + O(h^2)}_{\text{cua menyspreable}} \end{aligned}$$

Quant al terme $1 + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \cdot h$, com que h és fixat, si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \ll 0$ el valor absolut de δ pot créixer!!!

Exemple concret: $h = 0.01$, $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = -500$ i l'error passa de δ a -4δ .

Definició 7.21 (vaga). Diem que un PVI és *rígid* (stiff) si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \ll 0$ (o, per un sistema d'edos, si $J_y = \frac{\partial F}{\partial y}$ té algun VAP λ amb $\text{Re } \lambda \ll 0$).

Aquesta definició no és precisa perquè no deixa clar a partir de quan $\frac{\partial f}{\partial y}$ és massa negatiu. Això depèn del context, però, en general, podem dir que el PVI és rígid pel pas h si $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \cdot h < -2$.

Exemple 7.22.

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = ty_1^2 - 2y_1y_2 + y_2 \\ \frac{dy_2}{dt} = -5y_1 - y_2 + \sin t \end{cases}$$

$$\text{condició inicial: } \vec{y}(0) = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Calculem $\frac{\partial F}{\partial y}$:

$$F(t, \vec{y}) = \begin{pmatrix} ty_1^2 - 2y_1y_2 + y_2 \\ -5y_1 - y_2 + \sin t \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \begin{pmatrix} 2ty_1 - 2y_2 & -2y_1 + 1 \\ -5 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial F}{\partial y}(0, (3, 2)) = \begin{pmatrix} -4 & -5 \\ -5 & -1 \end{pmatrix}, \text{ que té VAP's } -7.72 \text{ i } 2.72$$

Per tant, el PVI té rigidesa per $h > 2/7.72 \simeq 0.26$.

Si tenim un PVI que és estable però rígid, ens anirà millor resoldre'l amb un *mètode implícit*. Però això és una altra història...

En MATLAB, `ode15s` és una comanda pensada per resoldre problemes rígids (combina Euler implícit i RK5).

El mètode d'Euler implícit(o cap endarrera)

La recepta (algorisme) és la següent: si hem calculat fins (x_k, y_k) de la solució aproximada i volem trobar el següent punt (x_{k+1}, y_{k+1}) , imposem

$$y_k = y_{k+1} - hf(x_{k+1}, y_{k+1})$$

És la condició de seguir la tangent del mètode d'Euler, però mirant cap endarrera. La incògnita és y_{k+1} ($x_{k+1} = x_k + h$), però com que apareix dins de f , l'equació és complicada de resoldre!

A la pràctica es resol via Newton-Raphson, o amb `fsolve` de MATLAB... Per això cada pas és més lent que amb el mètode d'Euler directe (l'habitual).

Però si podem trobar y_{k+1} amb error $O(h^2)$, aquest mètode té una propagació de l'error molt diferent de la del mètode directe.

Comparem la solució exacta

$$y_k = y_{k+1} - hf(x_{k+1}, y_{k+1})$$

amb la solució $\bar{y}_{k+1} = y_{k+1} + \epsilon$ d'un problema amb error inicial δ :

$$\begin{aligned} \bar{y}_k &= y_k + \delta = \\ &= \bar{y}_{k+1} - hf(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1}) = \\ &= y_{k+1} + \epsilon - hf(x_{k+1}, y_{k+1} + \epsilon) = \\ &= y_{k+1} + \epsilon - h \left[f(x_{k+1}, y_{k+1}) + \epsilon \frac{\partial f}{\partial y}(x_{k+1}, y_{k+1}) + O(\epsilon^2) \right] \end{aligned}$$

on en l'últim pas hem desenvolupat f respecte de y .

Així,

$$\begin{aligned}\delta &= \bar{y}_k - y_k = \\ &= \bar{y}_{k+1} - hf(x_{k+1}, \bar{y}_{k+1}) - y_{k+1} + hf(x_{k+1}, y_{k+1}) = \\ &= \epsilon - h \left[\epsilon \frac{\partial f}{\partial y}(x_{k+1}, y_{k+1}) + \underbrace{O(\epsilon^3)}_{\text{el menyspreem}} \right]\end{aligned}$$

Per tant,

$$\epsilon \simeq \frac{\delta}{1 - h \frac{\partial f}{\partial y}}$$

L'error ϵ en el pas $k + 1$ és molt més petit que l'error δ en el pas k quan $\partial f / \partial y < 0$. I si $\partial f / \partial y \ll 0$, agafar pas h gran ajuda a fer l'error més petit. Per això, en problemes rígids el mètode d'Euler implícit dona més precisió i un càlcul més ràpid per anar de $x = a$ a $x = b$.

7.4 Punts d'equilibri d'un sistema d'edos

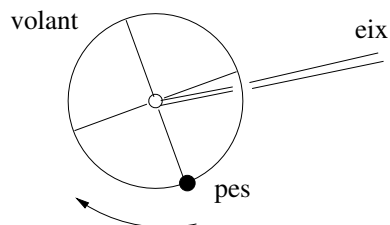
Definició 7.23. Un sistema d'edos d'ordre 1 és *autònom* si és de la forma

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y}), \quad \text{amb } F : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

(és a dir, la F no depèn del temps t).

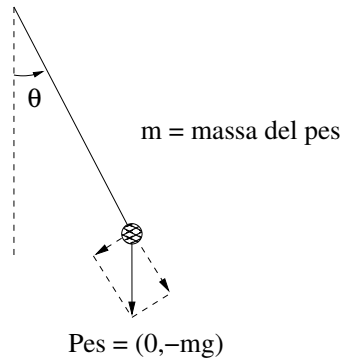
Els sistemes autònoms són molts comuns a la natura. Són sistemes en els quals la força que mou les partícules depèn només de la seva posició, la taxa de reacció depèn només de la concentració dels reactius...

Exemple 7.24 (El pèndol). Fixem un pes a la vora d'un volant que està enganxat a un eix que pot girar sense fregament.



Així obtenim un pèndol que pot donar voltes completes.

Si apartem el pes del punt més baix, la força que mou el sistema en cada moment depèn *només* de la posició del pes. Per tant, és un sistema autònom.



La component tangencial del pes és la que mou el sistema; val

$$\|\vec{F}_{\text{tan}}\| = mg \sin \theta$$

Per tant, si $\theta(t)$ = angle amb eix vertical en temps t , tenim

$$\ddot{\theta} = -\frac{g}{l} \sin \theta$$

Podem convertir l'edo d'ordre 2 en un sistema d'ordre 1 amb incògnites $\theta(t)$, $\omega(t) = \dot{\theta}(t)$ (la velocitat angular). El sistema queda

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ -(g/l) \sin \theta \end{pmatrix}$$

on g = gravetat

l = longitud del radi del volant (per simplificar, podem fer $l = g$)

Aquest sistema és autònom, amb

$$F \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ -(g/l) \sin \theta \end{pmatrix}$$

Exemple 7.25 (Examen gener 2006: una reacció química). En un reactor es fa la transformació de B en C, en presència d'un catalitzador A. La reacció $A + B \rightarrow A + C$ té taxa de reacció $k_1 = 6$ mols/l·minut.

També té lloc la reacció $A + C \rightarrow A + B$ amb taxa $k_2 = 0.5$ mols/l·minut.

Això vol dir que si fem

x_A = concentració de A (en mols/l)

x_B = concentració de B

x_C = concentració de C

se satisfà:

$$\begin{cases} \frac{dx_B}{dt} = \underbrace{-k_1 x_A x_B}_{A+B \rightarrow A+C} + \underbrace{k_2 x_A x_C}_{A+C \rightarrow A+B} \\ \frac{dx_C}{dt} = k_1 x_A x_B - k_2 x_A x_C \end{cases}$$

Les velocitats de transformació depenen de les concentracions dels reactius x_B , x_C , i del paràmetre x_A , però no de quant temps porta la reacció en marxa. Per tant, el sistema és autònom

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6x_A x_B + 0.5x_A x_C \\ 6x_A x_B - 0.5x_A x_C \end{pmatrix}$$

Les solucions més senzilles dels sistemes autònoms són també les més importants.

Definició 7.26. Un *punt d'equilibri* (o *crític*) d'un sistema autònom

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y}) \quad (*)$$

és un punt $P \in \mathbb{R}^n$ tal que $F(P) = \vec{0}$.

Lema 7.27. *Tot punt d'equilibri P és una solució constant $\vec{y}(t) = P$ del sistema autònom (*), i viceversa.*

Demostració.

$$\vec{y}(t) = P \text{ constant} \Leftrightarrow \frac{d\vec{y}}{dt} = 0$$

ja que, si \vec{y} és constant, la derivada és zero.

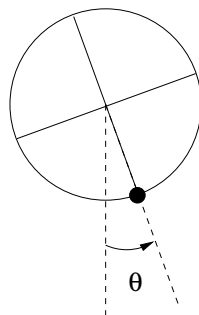
$$\vec{y}(t) = P \text{ solució de (*)} \Leftrightarrow \frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y})$$

Com que $\frac{d\vec{y}}{dt} = 0$, cal que $F(\vec{y}(t)) = F(p) = 0$. □

La importància dels punts d'equilibri és la següent: quan un sistema (físic, químic...) està governat per un sistema d'edos autònom, d'entrada evoluciona. Quan arriba a un equilibri (de balanç de masses, d'energies, de càrrega elèctrica...) és que ha arribat a un punt d'equilibri del sistema d'edos.

Exemple 7.28. Continuem amb els exemples 7.24 i 7.25:

- El pèndol

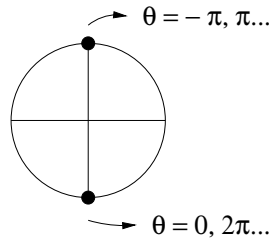


$\omega = \dot{\theta}$ és la velocitat angular

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ -\sin \theta \end{pmatrix} = F \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix}$$

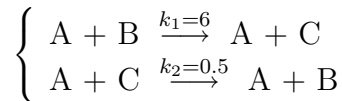
Trobem els punts d'equilibri:

$$F \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} \omega = 0 \text{ (el pèndol no gira)} \\ \sin \theta = 0 \Leftrightarrow \theta = k\pi, k \in \mathbb{Z} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \text{el pes és a baix de tot (} k = 0, 2\pi, 4\pi \dots \text{)} \\ \text{o a dalt de tot (} k = -\pi, \pi, 3\pi \dots \text{)} \end{cases}$$



Són els punts en els quals $\omega(t)$ i $\theta(t)$ es queden constants.

- La reacció



El sistema és

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6x_Ax_B + 0.5x_Ax_C \\ 6x_Ax_B - 0.5x_Ax_C \end{pmatrix}$$

Assumim que el catalitzador A és present, és a dir, que $x_A > 0$. Com que el catalitzador no es transforma en la reacció, x_A és un paràmetre constant.

$$P = \begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} \text{ crític} \Leftrightarrow \begin{cases} -6x_Ax_B + 0.5x_Ax_C = 0 \\ 6x_Ax_B - 0.5x_Ax_C = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow -6x_B + 0.5x_C = 0 \Leftrightarrow x_C = 12x_B$$

I els punts d'equilibri són de la forma $P = x \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}$.

En aquests punts el sistema assoleix un *equilibri*: com que les taxes de reacció de $A + B \rightarrow A + C$, $A + C \rightarrow A + B$ són $k_1 = 6$, $k_2 = 0,5 = k_1/12$ respectivament, quan $x_C = 12x_B$ B es transforma en C al mateix ritme global que C en B, i les concentracions de B, C no varien.

Exercici 11. Amb MATLAB, agafeu el sistema

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6x_A x_B + 0.5x_A x_C \\ 6x_A x_B - 0.5x_A x_C \end{pmatrix}$$

doneu un valor $x_A > 0$ qualsevol, i comproveu que per qualsevol valor inicial $(x_B(0), x_C(0))$ el sistema evoluciona cap a un punt d'equilibri

$$\begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = x \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}$$

El valor de x el podeu deduir del nombre total de mols de B i C, que no varia, de manera que $13x = x_B(0) + x_C(0)$.

Les solucions de sistemes autònoms $\frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y})$ sovint tendeixen a un punt d'equilibri, però en la vida real només tendeixen cap als estables. La definició que un punt d'equilibri P sigui estable és una variant lleu de la que hem donat per a l'estabilitat del problema de valors inicials

$$\begin{cases} \frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y}) \\ \vec{y}(0) = P \end{cases}$$

Definició 7.29. Diem que un punt d'equilibri P d'un sistema autònom $\frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y})$ és

- *asimptòticament estable*, si tota solució amb $\vec{y}(0) = \vec{y}_0$ propera a P compleix $\vec{y}(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} P$ (existeix $\delta > 0$ tal que $\|\vec{y}(0) - P\| < \delta$ implica $\vec{y}(t) \rightarrow P$ quan $t \rightarrow +\infty$)
- *estable*, si tota solució amb $\vec{y}(0) = \vec{y}_0$ proper a P no s'allunya de P quan $t \rightarrow +\infty$ (per tot $\epsilon > 0$, existeix $\delta > 0$ tal que si $\|\vec{y}(0) - P\| < \delta$, aleshores $\|\vec{y}(t) - P\| < \epsilon$ per tot $t > 0$); asimptòticament estable és un cas particular d'estable
- *inestable*, si hi ha solucions $\vec{y}(t)$ amb valor inicial $\vec{y}(0)$ tan proper a P com vulguem, però amb $\vec{y}(t)$ que s'aparta de P quan t creix; P és inestable si no és estable

Exemple 7.30 (Tornem a l'exemple 7.24). Recordem el sistema del pèndol

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ -\sin \theta \end{pmatrix}$$

Els punts d'equilibri $\omega = 0$, $\theta = 0, 2\pi, 4\pi \dots$ (el pes a baix) són estables, perquè qualsevol solució amb $(\theta(t), \omega(t))$ petits no s'apartarà gaire de la posició més baixa (ja que l'energia cinètica + potencial es conserva, de manera que si la velocitat inicial $\omega(0)$ i la posició inicial $\theta(0)$ són petites, el pes mai estarà a gaire alçada).

En canvi, els punts d'equilibri $\omega = 0$, $\theta = \pi, 3\pi, 5\pi, \dots, -\pi, -3\pi \dots$ (el pes a dalt) són inestables, perquè si fem el més lleu moviment al pes, caurà de dalt a baix (i oscil·larà...).

Sovint podem veure quins punts d'equilibri són estables i quins no, simplement estudiant la diferencial de F en P :

Teorema 7.31. *Si $\frac{d\vec{y}}{dt} = F(\vec{y})$ un sistema d'edos d'ordre 1 autònom amb F funció C^2 , i $P \in \mathbb{R}^n$ un punt d'equilibri. Aleshores,*

- 1) *Si $DF(P)$ té tots els VAP's amb $Re \lambda < 0$, P és asimptòticament estable*
- 2) *Si $DF(P)$ té algun VAP amb $Re \lambda > 0$, P és inestable*

Demostració. Només n'indiquem la idea.

Desenvolupem $F(\vec{y})$ en sèrie de Taylor en $\vec{y} = P$:

$$F(\vec{y}) = F(P) + DF(P)(\vec{y} - P) + O(\|\vec{y} - P\|^2)$$

$F(P) = 0$ perquè P és un punt d'equilibri; així,

$$F(\vec{y}) = DF(P)(\vec{y} - P) + O(2)$$

prop de P .

Posem les coordenades per tal que $P = 0$ i el sistema d'edos queda

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = DF(P) \cdot \vec{y} + O(2)$$

Les solucions d'aquest sistema seran aproximadament, en un entorn de P , les del sistema a coeficients constants

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = DF(P) \cdot \vec{y} \quad (*)$$

Ja vàrem dir a la secció anterior que, si $DF(P)$ té algun VAP amb $Re \lambda > 0$, aquest sistema té solucions de la forma

$$\vec{y}(t) = c \cdot e^{(Re \lambda)t} \cdot \vec{u},$$

amb \vec{u} vector constant i c tan petit com vulguem, que s'allunyen de $P = \vec{0}$ quan t creix.

Recíprocament, si tots els VAP's tenen $Re \lambda < 0$, les solucions de (*) són de la forma

$$\vec{y}(t) = c_1 e^{(Re \lambda_1)t} \vec{u}_1 + \dots + c_n e^{(Re \lambda_n)t} \vec{u}_n \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \vec{0}$$

□

Apliquem el teorema als exemples anteriors:

1) El pèndol

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ -\sin \theta \end{pmatrix} = F \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix}$$

$$DF \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos \theta & 0 \end{pmatrix}$$

En els punts $P = ((2k+1)\pi, 0)$, tenim

$$DF(P) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

que té VAP's

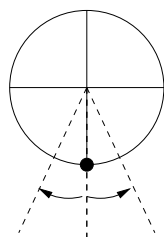
$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = 1, -1$$

Com que un dels VAP's és estrictament positiu, els punts són inestables. En els punts $P = (2k\pi, 0)$, tenim

$$DF(P) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

que té VAP's $\lambda = i, -i$ amb $Re \lambda = 0$. En conseqüència, el teorema no ens diu si són estables o no.

Podem controlar l'estabilitat d'aquests punts amb l'energia total del sistema: com que no hi ha fregament, si el pes té una lleu oscil·lació aquesta no disminueix mai, de manera que aquests punts d'equilibri són estables, però no asimptòticament (amb fregament serien asimptòticament estables).



2) El reactor amb $\begin{cases} A + B \rightarrow A + C \\ A + C \rightarrow A + B \end{cases}$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = x_A \cdot \begin{pmatrix} -6x_B + 0.5x_C \\ 6x_B - 0.5x_C \end{pmatrix} = F(x_B, x_C)$$

$$DF = x_A \cdot \begin{pmatrix} -6 & 0.5 \\ 6 & -0.5 \end{pmatrix}, \text{ amb } x_A > 0$$

que té VAP's $\lambda_1 = -6.5x_A < 0$, $\lambda_2 = 0$

El teorema no ens diu si els punts d'equilibri

$$\begin{pmatrix} x_B \\ x_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_B \\ 12x_B \end{pmatrix}$$

són estables o no. Però, com que aquest sistema és lineal a coeficients constants (x_A és un paràmetre constant), sabem que tota solució és de la forma

$$\begin{pmatrix} x_B(t) \\ x_C(t) \end{pmatrix} = c_1 \cdot e^{-6.5t} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}}_{\text{VAP de VEP } -6.5} + c_2 \cdot e^{0 \cdot t} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}}_{\text{VAP de VEP } 0} \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}$$

D'aquí podem deduir que, si una solució comença amb $\begin{pmatrix} x_B(0) \\ y_B(0) \end{pmatrix}$ pro-

per a $c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}$ (amb \bar{c}_1 petit o \bar{c}_2 proper a c_2), en fer $t \rightarrow +\infty$ va a $\bar{c}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}$, proper a $c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 12 \end{pmatrix}$. Per tant, els punts d'equilibri són estables.