

# SOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES POR REDUCCIÓN A FORMA CUASI LINEAL

Luis P. Lara\*, César O. Stoico\*\*, Mario A. Castagnino†

\*Depto. de Física, Fac. de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Rosario  
Av. Pellegrini 250, (2000) Rosario - Argentina  
e-mail: lplara@arnet.com.ar

†Instituto de Física Rosario -CONICET-UNR  
Bv. 27 de Febrero, 210 bis (2000) Rosario - Argentina

\*\*Fac. de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario  
Suipacha 250, (2000) Rosario - Argentina

En este trabajo se presenta un método alternativo para la solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias las cuales deben expresarse en una forma cuasi lineal. El método está basado en las teorías de las ecuaciones diferenciales lineales y es exacto para las mismas. Se comparan las soluciones de diversos problemas con las obtenidas por los métodos de Runge Kutta.

We present an alternative method to obtain solution of differential equations, which can be expressed in a quasi-linear form. The method is essentially based on the linear equations theory and is exact for these equations. We compare the solutions of different problems with the Runge Kutta solutions.

## I. INTRODUCCIÓN

La formulación matemática de muchos problemas en física, química, ingeniería e investigación operativa se realiza, en gran parte, utilizando ecuaciones diferenciales. Estas ecuaciones, en muchos problemas de interés, son no lineales, no homogéneas y con coeficientes variables. En tales casos, soluciones analíticas son difíciles de obtener existiendo para ello métodos aproximados.<sup>(1)(2)</sup> Un buen resumen de los distintos métodos de cálculo existentes se puede encontrar en las referencias (3) y (4). En este trabajo se muestra que es posible obtener soluciones numéricas usando la teoría de ecuaciones lineales. Esencialmente, se propone un método de cálculo de un paso. Cuando las ecuaciones son lineales a coeficientes constantes la solución es exacta.

El artículo está organizado de la siguiente manera: la formulación del problema es presentada en la sección II. En la sección III se presenta el operador evolución; las expresiones explícitas para ecuaciones diferenciales de segundo grado son presentadas en la sección IV. La discusión de la convergencia numérica se realiza en la sección V. Ejemplos de aplicación se desarrollan en la sección VI y, por último, las conclusiones se desarrollan en la sección VII.

## II. FORMA CUASILINEAL

Existe un amplio espectro de métodos analíticos para resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias pero muchas veces se debe recurrir a soluciones numéricas como ocurre con frecuencia en los problemas no lineales.

En este trabajo se consideran las ecuaciones diferenciales de orden  $n$  resueltas respecto de la derivada de mayor orden, la cual se escribe como:

$$x^{(n)}(t) = F(t, x, x^1, \dots, x^{(n-1)})$$

con las siguientes condiciones iniciales:

$$x^{(j)}(t_0) = x_0^{(j)}, j = 0, \dots, n-1$$

Se considerará sólo aquellas ecuaciones diferenciales que se pueden reducir a una forma cuasi lineal<sup>(5)</sup>

$$\sum_{j=0}^n a_j x^{(j)}(t) = f, \quad (1)$$

donde

$$a_j = a_j(x, x^{(1)}, \dots, x^{(n-1)}, t) \quad j = 0, \dots, n, \quad (2)$$

$$f = f(x, x^{(1)}, \dots, x^{(n-1)}, t), \quad (3)$$

y  $a_j$  y  $f$  son funciones continuas respecto a  $t$  y al conjunto de variables  $(x, x^{(1)}, \dots, x^{(n)})$ . Como en otros métodos numéricos clásicos, la condición de derivabilidad de  $a_j$  y  $f$  no son necesarias.

## III. LINEALIZACIÓN Y OPERADOR EVOLUCIÓN

Descompongamos el dominio de la variable  $t$  en intervalos  $I_i : (t_i, t_{i+1})$ ,  $i = 0, 1, \dots, m$  donde  $t_{i+1} = t_i + h$  y  $h_i > 0$  es el paso en el intervalo  $I_i$ . En cada intervalo  $I_i$  se define la ecuación asociada a (1) por

$$\sum_{j=0}^n a_{ij} z_i^{(j)}(t) = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, m, \quad (4)$$

donde  $z_i(t)$  es la función que estima a  $x(t)$  en el intervalo  $I_i$ , las constantes  $a_{ij}$  y  $f_i$  están definidas por

$$a_{ij} = a_j(z_i(t), z_i^{(1)}(t_i), \dots, z_i^{(n-1)}(t_i), t_i) \quad (5)$$

$$f_i = f(x(t_i), \dots, x^{(n-1)}(t_i), t_i) \quad i = 1, \dots, m.$$

Para integrar la ecuación lineal (4) en el intervalo  $I_0$  se comienza con la condición inicial en  $t = t_0$  y se obtiene su solución analítica. Con esta solución analítica se pueden evaluar las condiciones iniciales en  $t = t_1$  para entonces determinar la nueva solución en el intervalo  $I_1$  y así sucesivamente. Luego, para cada intervalo  $I_i$  se ha obtenido la solución aproximada de  $x(t)$  definida por:

$$z_i(t) = \sum_{k=1}^n c_{ik} \phi_{ik}(t) + z_{ip}(t), \quad (6)$$

donde  $\{\phi_{ik}(t)\}$  es el conjunto de  $n$  soluciones linealmente independiente de la ecuación homogénea asociada a (4) y  $z_{ip}(t)$  es una solución particular de la ecuación diferencial no homogénea. Las constantes  $c_{ik}$  se determinan resolviendo el sistema lineal en  $c_{ik}$  usando las condiciones iniciales en  $t = t_i$

$$z_i^{(j)}(t_i) = \sum_{k=1}^n c_{ik} \phi_{ik}^{(j)}(t_i) + z_{ip}^{(j)}(t_i), \quad j = 0, \dots, n-1 \quad (7)$$

donde se han usado las condiciones iniciales

$$z_0^{(j)}(t_0) = x^{(j)}(t_0), \quad j = 0, \dots, n-1. \quad (8)$$

Es de notar que este sistema tiene solución ya que el conjunto  $\{\phi_{ik}\}$  es un conjunto linealmente independiente. De esta manera, se ha obtenido una aproximación analítica de  $x(t)$  en el  $i$ -ésimo intervalo para la ecuación (6). Para calcular la solución en los intervalos  $I_{i+1}$  las condiciones iniciales  $z_{i+1}^{(j)}(t = t_{i+1})$  ( $j = 0, \dots, n-1$ ) se determinan a partir de la solución  $z_i(t)$  obtenida para el  $i$ -ésimo intervalo. Formalmente se representa como:

$$z_i^{(j)}(t_{i+1}) = G_j(t_i, z_i(t_i), z_i^{(1)}(t_i), \dots, z_i^{(n-1)}(t_i)) \quad (9)$$

donde  $G_j$  representa el operador evolución temporal que a un estado en el tiempo  $t_i$  le pone en correspondencia el estado del sistema en el tiempo  $t_{i+1}$ . Para  $j=0$  (9) puede escribir en una forma más compacta como:

$$z_{i+1} = P_i z_i, \quad (10)$$

en donde  $P_i$  es el operador evolución en la  $i$ -ésima iteración.

Se ha determinado, de esta forma, la solución de la ecuación (1) en forma aproximada.

#### IV. ECUACIONES DIFERENCIALES DE SEGUNDO ORDEN HOMOGÉNEAS

Como una aplicación del método propuesto (M P), y sin perder generalidad de la sección III se consideran las ecuaciones diferenciales de segundo orden homogéneas

$$\ddot{x}(t) + f(x(t), \dot{x}(t), t) \dot{x}(t) + g(x(t), \dot{x}(t), t) x(t) = 0 \quad (11)$$

donde el punto denota diferenciación respecto a la variable  $t$ .

Los pasos a seguir son: obtener una solución general discreta de la ecuación (11) y la construcción de un algoritmo considerando las funciones  $f(x, \dot{x}, t)$  y

$g(x, \dot{x}, t)$  continuas. Para este fin, usando el procedimiento iterativo expuesto en la sección III, usando las ecuaciones (6) y (7), se obtienen las

ecuaciones iterativas para  $z_i$  y su derivada  $\dot{z}_i$  las cuales son

$$z_{i+1} = \left[ \left( \cosh(h\Lambda_i) + \frac{f_i \sinh(h\Lambda_i)}{2\Lambda_i} \right) z_i + \frac{\sinh(h\Lambda_i)}{\Lambda_i} \dot{z}_i \right] \exp - \frac{hf_i}{2}, \quad (12)$$

$$\dot{z}_{i+1} = \left[ -g_i \frac{\sinh(h\Lambda_i)}{\Lambda_i} z_i + \left( \cosh(h\Lambda_i) - \frac{f_i \sinh(h\Lambda_i)}{2\Lambda_i} \right) \dot{z}_i \right] \exp - \frac{hf_i}{2}, \quad i = 1, \dots, m, \quad (13)$$

en donde  $h$  es el paso de integración,  $z_i$  es la estimación de  $x$  en  $t = t_i$  y

$$\Lambda_i = \sqrt{\frac{f_i^2}{4} - g_i}$$

donde  $f_i$  y  $g_i$  son los coeficientes de la ecuación (11) evaluados en  $t = t_i$ .

En particular, para  $\Lambda_i = 0$  se obtiene

$$z_{i+1} = \left[ \left( 1 + \frac{f_i h}{2} \right) z_i + h \dot{z}_i \right] \exp - \frac{hf_i}{2} \quad (14)$$

$$\dot{z}_{i+1} = \left[ -g_i h z_i + \left( 1 - \frac{f_i h}{2} \right) \dot{z}_i \right] \exp - \frac{hf_i}{2} \quad (15)$$

Como se puede ver, el método iterativo resulta más simple que un método de Runge Kutta de cuarto orden y aún más simple que uno de cuarto orden de Continuación Analítica Continua en donde se necesitan evaluar las derivadas de  $f$  y  $g$  <sup>(7)</sup>.

Para mejorar la convergencia, se puede aproximar a  $f_i$  y  $g_i$  por sus valores medios en el intervalo  $I_i$ . Para estudiar esta aproximación se

denotará con  $F$  tanto a  $f(x, \dot{x}, t)$  como a  $g(x, \dot{x}, t)$  y

con  $\hat{F}$  la aproximación a  $F(t = t_i) = F_i$ . Se presentan tres casos, a saber:

- i) Cuando  $F$  es sólo una función explícita de  $t$ , es decir  $F = F(t)$  entonces:

$$\hat{F}_i = \frac{1}{t_{i+1} - t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} F(t') dt' \quad (16)$$

la cual se puede obtener por simple integración.

- ii) Cuando  $F = F(x)$  o  $F = F(x)$  las que se denotarán en forma genérica como  $F = F(u)$ , en este caso

$$\hat{F}_i = \frac{1}{u_{i+1} - u_i} \int_{u_i}^{u_{i+1}} F(v) dv, \quad (17)$$

en donde  $u_{i+1} = u_i + u_i h$

- iii) Cuando la integración no puede ser resuelta en forma analítica, luego

$$\hat{F}_i = \frac{1}{2} \left[ F(x_i, x_i, t_i) + F(x_{i+1}, x_{i+1}, t_{i+1}) \right], \quad (18)$$

donde  $x_{i+1} = x_i + x_i h$  y  $x_{i+1}$  se obtiene de (11)

$$\text{resultando } x_{i+1} = x_i - \left[ f(x_i, x_i, t_i) x_i + g(x_i, x_i, t_i) x_i \right] h$$

## V. CONVERGENCIA NUMÉRICA

No se dispone de un resultado analítico para obtener la condición de convergencia pero es claro que, cuando  $h \rightarrow 0$ , el resultado numérico tiende a la solución exacta; si bien esto no es un criterio útil. En su lugar, puede utilizarse un criterio "pragmático" para determinar la confiabilidad de la solución y del operador evolución. Ya que la solución depende del parámetro  $h$ , se debe estudiar la sensibilidad de la solución al variar dicho parámetro y determinar un apropiado paso de integración en función del grado de precisión deseado como generalmente es hecho en los métodos numéricos.

Si se cuenta con al menos una constante de movimiento, ésta no debe usarse para reducir el orden de la ecuación sino que se debe tomar como una variable de control. De esta manera, el paso de integración se puede determinar por la mínima variación de la constante de movimiento de acuerdo al grado de precisión requerido por el problema en cuestión.

## VI. APLICACIONES

Como aplicación del método propuesto se resuelven cuatro ecuaciones diferenciales y su solución es comparada con las obtenidas usando el método de Runge Kutta de cuarto orden (RK4)<sup>(6)(1)</sup> y con el método de Continuación Analítica Continua (CACxx)<sup>(7)</sup> de segundo y tercer orden. En todos los cálculos se utilizó doble precisión y el compilador FORTRAN 90.

## OSCILADOR ARMÓNICO

Como primer ejemplo se estudia el oscilador armónico cuya ecuación diferencial es:

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0 \quad (19)$$

De acuerdo a lo expuesto, la solución será exacta para cualquier frecuencia  $\omega$ . Por otra parte, si se integra la ecuación (19) usando CAC o RK4 el paso

de integración debe ser menor que el período  $P = \frac{2\pi}{\omega}$

para obtener una buena aproximación. Se integró la ecuación (19) para  $\omega = 10$  con paso  $h = 0,1$  y con las

condiciones iniciales  $x(0) = 0,0$  y  $\dot{x}(0) = 0,1$  en el dominio  $0 \leq t \leq 100$ . Para comparar los distintos métodos se define el error relativo  $\varepsilon_r(\%) = 100 (x_i - x_a(x_i)) / x_a(x_i)$  donde  $x_a(x_i)$  es la solución analítica evaluada en  $t = t_i$ . Los resultados son presentados en la tabla 1 donde se puede apreciar que usando RK4 el error es inaceptable mientras que en el método propuesto es nulo.

Tabla 1

$t_i$	0,5	1,0	10,0	20,0	30,0	50,0	100,0
MP	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
RK4	-0,2	-14,0	-5,0	-72,0	-100	107,0	-100

## OSCILADOR NO LINEAL

Del punto anterior de esta sección puede inferirse que el método propuesto será extremadamente eficiente para estudiar ecuaciones diferenciales lineales a coeficientes constantes perturbadas por términos no lineales.

Por lo expuesto, se estudia a continuación el oscilador no lineal<sup>(8)</sup> con un potencial dado por

$$v(x) = \frac{1}{2} x^2 + \frac{\alpha}{4} x^4 \quad \text{el cual posee una constante de}$$

movimiento dada por  $E = \frac{1}{2} \dot{x}^2 + v(x)$  la cual será

usada para controlar la precisión numérica de la solución.

La ecuación de Newton para este movimiento unidimensional es:

$$\ddot{x}(t) + (1 + \alpha x^2(t)) x(t) = 0, \quad (20)$$

donde  $\alpha$  es una constante.

Usando las ecuaciones (17) y (20) los coeficientes de la ecuación lineal asociada a (20) en el intervalo  $(t_i, t_{i+1})$  son, de acuerdo a la sección IV

$$g_i = 1 + \alpha \left( x_i^2 + h x_i + \frac{h^2}{3} \right),$$

$$f_i = 0$$

La solución discreta se obtiene iterando las ecuaciones (12) a (15). Se define la función  $E_i$  como

$$E_i = \frac{1}{2} x_i^2 + v(x_i)$$

En la tabla 2 se comparan las diferencias relativas de  $E_i$  respecto a la constante de movimiento  $E$  mediante  $e_r(\%) = 100 (E_i - E) / E$ . Las condiciones iniciales son  $x(t=0) = 1$ ,  $\dot{x}(t=0) = 1$ . El dominio es  $0 \leq t \leq 100$ . El paso de integración tomado es  $h = 0,01$  con un valor de la constante  $\alpha = 5$ .

Tabla 2

$t_i$	10,0	20,0	40,0	60,0	80,0	100,0
MP	0,0052	0,0018	0,011	0,013	0,021	0,026
CAC2	0,016	0,0033	0,066	0,068	0,13	0,14
CAC3	-0,003	-0,006	-0,011	-0,017	-0,022	-0,028

Del análisis de la tabla 2 se concluye que el método propuesto es más satisfactorio que el método CAC2. La precisión de los resultados son equivalentes a los obtenidos con el CAC3<sup>(7)</sup> pero el tiempo de CPU con MP resultó ser significativamente menor.

### ECUACIÓN DE Van der Pol

Como tercer ejemplo se estudia la ecuación de Van der Pol<sup>(8)(9)</sup> que es una ecuación diferencial a coeficientes variables, a saber:

$$\ddot{x}(t) - \varepsilon(1 - x^2(t)) \dot{x}(t) + ax(t) = 0. \quad (21)$$

Una solución numérica de esta ecuación puede encontrarse en la referencia (7).

Los coeficientes de la ecuación asociada a (21) en el intervalo  $I_i$  se calculan usando las ecuaciones (16) y (21) de acuerdo a la sección IV obteniéndose:

$$f_i = -\frac{\varepsilon}{3} (3 - h^2 \dot{x}_i - 3 h x_i \dot{x}_i - 3 x_i^2)$$

$$g_i = 1$$

Las condiciones iniciales utilizadas son  $x(t=0) = 1$  y  $\dot{x}(t=0) = 1$  en el dominio  $0 \leq t \leq 100$  con parámetros  $\varepsilon = 0,1$ ,  $a = 1$  y paso de integración  $h = 0,01$ . Los resultados se presentan en la tabla 3.

A los fines de comparación, se toma la solución obtenida por el método RK4 como la más confiable (estabilizado con siete cifras significativas) por lo que se define el error relativo como  $\varepsilon_r(\%) = 100 (x_i - x_{RK4i}) / x_{RK4i}$ . Los resultados se exponen en tabla 3. La tabulación de la solución mediante M P y RK4 se muestran con cinco cifras significativas en la tabla 3.

Tabla 3

$x_i$	20,0	40,0	60,0	80,0	100,0
MP	1,1707	0,11131	-1,7999	-1,5556	0,43471
RK4	1,7107	0,11132	-1,8000	-1,5557	0,43470
$\varepsilon_{ri}(\%)$	0,000	0,009	-0,006	-0,006	0,002

En este problema no lineal se ve que el método M P coincide con RK4. También en este caso los tiempos de CPU han sido menores.

### OSCILADOR CUÁNTICO

Como cuarto ejemplo se presenta el problema de autovalores de la ecuación de Schrödinger<sup>(10)</sup>:

$$H \Psi = E \Psi, \quad (22)$$

y, en particular, se estudia el oscilador cuántico unidimensional cuya ecuación adimensional es:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + (e - x^2)\phi = 0, \quad (23)$$

donde  $e$  es el autovalor y  $\phi$ , la función de onda, es tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \phi dx < \infty,$$

y cuya solución analítica es:

$$e_k = 2k + 1, \quad (24)$$

$$\phi_k = \alpha_k \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) H_k(x), \quad (25)$$

donde  $H_k(x)$  son los polinomios de Hermite<sup>(11)</sup> de orden  $k$  y  $\alpha_k$  es la constante de normalización.

Como es conocido en los problemas de autovalores, la ecuación diferencial es estructuralmente inestable ante variaciones del parámetro  $e$  y la solución numérica obtenida es inestable para grandes valores de  $x$ .

Se estudia el estado correspondiente a  $k = 2$  cuya solución analítica es:

$$\phi_2(x) = 2(2x^2 - 1) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \quad (26)$$

donde  $e_2 = 5$ .

De las ecuaciones (23) y (17) se encuentran los coeficientes que se deben usar para evaluar las ecuaciones (12) a (15):

$$f_i \equiv 0, \quad (27)$$

$$g_i = 5 - x_i^2 - h x_i - \frac{h^2}{3}.$$

Se define el error relativo de la solución numérica ( $z_i$ ) respecto de la solución analítica expresada por la ecuación (26) como:

$$\varepsilon_r(\%) = 100(z_i - \phi_{2i}) / \phi_{2i}.$$

En la tabla 4 se presentan los resultados de la función de onda, y los errores relativos utilizando los métodos MP y RK4. Las condiciones iniciales son

$\phi_2(x=0) = -2$ ,  $\phi_2'(x=0) = 0$ , el intervalo de integración es  $0 \leq x \leq 4,8$  y el paso de integración es  $h = 0,001$ .

Tabla 4

$x_i$	2,0	3,0	4,0	4,5	4,6	4,7	4,8
$\phi_i$	1,893	0,377	0,020	0,003	0,002	0,001	0,011
MP	9E-6	2E-4	0,042	1,5	3,4	8,2	17,0
RK4	-2E-5	-4E-4	-0,08	-3,0	-6,7	-15,0	-35,0

De la tabla 4 se concluye que el método propuesto es más preciso y, además, se utiliza menor tiempo de cómputo. Notar la inestabilidad numérica propia de los problemas de autovalores para  $x > 4,6$  y que el método MP resultó ser más robusto.

## VII. CONCLUSIONES

Se puede concluir de lo expuesto, que las ventajas del método propuesto en relación a métodos existentes son:

- i) Cuando las ecuaciones son lineales y los coeficientes constantes la solución resultante de aplicar el método expuesto es exacta, siendo nulos los errores de truncación. Esto representa una gran ventaja con respecto a otros métodos cuando existe una perturbación no lineal pequeña a la ecuación diferencial original.
- ii) La implementación de un programa en una biblioteca científica es tan simple como en cualquier método tradicional.
- iii) En los ejemplos mencionados, el tiempo de cómputo es menor que con los métodos RK4 o CAC3 y la precisión es del orden del método RK4.

## Referencias

- 1 - W. Press, B. Flannery et al., "Numerical Recipes", Cambridge University Press (New York, 1986).
- 2 - J. Vigo - Aguiar, J. M. Ferrandiz, Comput. Phys. 12 (5), 467, (1998)
- 3 - A. C. Hindmarsh, L. R. Petzold, Comput. Phys. 9 (1), 43 (1995)
- 4 - A. C. Hindmarsh, L. R. Petzold, Comput. Phys. 9 (2), 148 (1995).
- 5 - R. Courant, D. Hilbert; "Methods of Mathematical Physics", vol. II, Interscience Publishers (New York, 1962).
- 6 - D. Kincaid, W. Cheney, "Análisis Numérico", Addison-Wesley Iberoamericana (México, 1994)
- 7 - H. Davis, "Introduction to Non Linear Differential Equations and Integral Equations", Dover (New York, 1980)
- 8 - S. Strogatz, "Nonlinear Dynamics and Chaos", Addison-Wesley Publishing Company (New York, 1994)
- 9 - T. Parker, L. Chua, "Practical Numerical Algorithms for Chaotic Systems", Springer Verlag (New York, 1989)
- 10 - L. Landau, E. Lifshitz, "Mecánica Cuántica No-Relativista", Reveté (Barcelona, 1967)
- 11 - M. Abramowitz et al., "Handbook of Mathematical Functions", Dover Publications (New York, 1979)