MOMENTO 1995 Número 11 Revista del Dpto. de Física U. Nacional de Colombia

UN ALGORITMO PARA INTEGRAR ECUACIONES DIFERENCIALES DE SEGUNDO ORDEN

Marta Spinel de Uribe
Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Física
Santafé de Bogotá D.C., Colombia

Resumen

En este trabajo se desarrolla un algoritmo para integrar una ecuación diferencial de la forma

$$\frac{d^2y}{dx^2} = F(x)\frac{dy}{dx} + G(x)y(x) + H(x) \tag{1}$$

Se demuestra además que cuando $F(x) = 0$, el algoritmo obtenido se reduce al algoritmo de Numerov.

Abstract

An algorithm is developed to integrate a differential equation of the form

$$\frac{d^2y}{dx^2} = F(x)\frac{dy}{dx} + G(x)y(x) + H(x)$$

It is shown that the algorithm so obtained reduces to the Numerov algorithm when $F(x) = 0$.

1. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO

El método consiste en construir apropiadamente series para la primera y segunda derivadas de la función $y(x)$. Las series se obtienen con la ayuda de la serie de Taylor [1] y luego se reemplazan en (1) conservando términos hasta de orden h^5, donde h es el valor del incremento de x.

Para construir la serie para la segunda derivada observamos que la relación

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x_n} = \lim_{h\to 0}\frac{y(x_n+h) - 2y(x_n) + y(x_n-h)}{h^2}, \tag{2}$$

la cual es consecuencia inmediata de la regla de L'Hospital [1], sugiere desarrollar $y(x_n + h)$ y $y(x_n - h)$ en serie de Taylor alrededor de x_n para obtener

$$y(x_n+h)=y(x_n)+h\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_n}+\frac{h^2}{2!}\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x_n}+\frac{h^3}{3!}\left.\frac{d^3y}{dx^3}\right|_{x_n}+\ldots,\qquad(3)$$

$$y(x_n-h)=y(x_n)-h\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_n}+\frac{h^2}{2!}\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x_n}-\frac{h^3}{3!}h\left.\frac{d^3y}{dx^3}\right|_{x_n}+\ldots,\qquad(4)$$

y de (3) y (4) obtener

$$\frac{y(x_n+h)-2y(x_n)+y(x_n-h)}{h^2}=2\sum_{m=1}^{\infty}\frac{h^{2(m-1)}}{(2m)!}\left.\frac{d^{2m}y}{dx^{2m}}\right|_{x_n}.\qquad(5)$$

Despejando $\frac{d^2y}{dx^2}$ de (5) se obtiene la siguiente relación:

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x_n}=\frac{y(x_n+h)-2y(x_n)+y(x_n-h)}{h^2}-\frac{2}{4!}h^2\left.\frac{d^4y}{dx^4}\right|_{x_n}-\frac{2}{6!}h^4\left.\frac{d^6y}{dx^6}\right|_{x_n}+O(h^6).\qquad(6)$$

Esta será la serie que utilizaremos para $\frac{d^2y}{dx^2}$.

La serie para la primera derivada se puede obtener de (3) ó (4). Sin embargo, (6) sugiere la conveniencia de una serie de rápida convergencia que sólo involucre derivadas impares. Esta se puede obtener al restar (4) de (3), atendiendo también lo sugerido por la relación

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_n}=\lim_{h\to 0}\frac{y(x_n+h)-y(x_n-h)}{2h}.$$

Más precisamente, de (3) y (4),

$$\frac{y(x_n+h)-y(x_n-h)}{2h}=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{h^{2m}}{(2m+1)!}\left.\frac{d^{2m+1}y}{dx^{2m+1}}\right|_{x_n},$$

y despejando $\frac{dy}{dx}$ de esta última expresión obtenemos la serie

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_n}=\frac{y(x_n+h)-y(x_n-h)}{2h}-\frac{h^2}{3!}\left.\frac{d^3y}{dx^3}\right|_{x_n}-\frac{h^4}{5!}\left.\frac{d^5y}{dx^5}\right|_{x_n}+O(h^6),\qquad(7)$$

que será la que utilizaremos como serie de la primera derivada. Al reemplazar (6) y (7) en la ecuación diferencial (1), conservando términos hasta el orden h^5, se obtiene el algoritmo deseado.

2. CONSTRUCCIÓN DEL ALGORITMO

En lo que sigue, y para simplificar la notación, utilizaremos las siguientes convenciones:

$$y(x_n) = y_n, \qquad x_n + h = x_{n+1}, \qquad x_n - h = x_{n-1}. \tag{8}$$

El orden de la derivada lo indicaremos con un superíndice, como se hace habitualmente. Con estas convenciones, la ecuación diferencial (1), calculada en x_n, se escribe

$$y_n'' = F_n y_n' + G_n y_n + H_n. \tag{9}$$

Si en (9) reemplazamos las derivadas por sus series y multiplicamos todo por h^2, se obtiene

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} - \frac{2}{4!} h^4 y_n^{iv} =$$

$$h^2 F_n \left\{ \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} - \frac{h^2}{3!} y_n''' \right\} + h^2 G_n y_n + h^2 H_n + O(h^6). \tag{10}$$

Para calcular la cuarta derivada en el miembro de la izquierda de la ecuación (10) utilizaremos (9). Así,

$$y_n^{iv} = \frac{d^2}{dx^2}\{ F y' + G y + H \}\Big|_{x_n} = \frac{d^2}{dx^2}\{ F y' \}\Big|_{x_n} + \frac{d^2}{dx^2}\{ G y \}\Big|_{x_n} + H_n'', \tag{11}$$

y recurriendo nuevamente a las series para la primera y segunda derivada vemos, de

$$\frac{d^2}{dx^2}\{ F y' \}\Big|_{x_n} = \{ F_n'' y' + 2F_n' y_n'' + F_n y_n''' \}.$$

que

$$h^4 \frac{d^2}{dx^2}\{F y'\}\Big|_{x_n} = h^4 \left\{ F_n'' \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} + 2F_n' \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} + F_n y_n''' \right\} + O(h^6) \tag{12}$$

Análogamente,

$$h^2 \frac{d^2}{dx^2}\{ G y \}\Big|_{x_n} = \{ G_{n+1} y_{n+1} - 2G_n y_n + G_{n-1} y_{n-1} \} + O(h^6). \tag{13}$$

Reemplazando (12) y (13) en (11), luego de factorizar y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, se concluye

$$\frac{h^4}{12}y_n^{iv} = y_{n+1}\left\{\frac{h^3}{24}F_n'' + \frac{h^2}{6}F_n' + \frac{h^2}{12}G_{n+1}\right\} + y_n\left\{-\frac{h^2}{3}F_n' - \frac{h^2}{6}G_n\right\} +$$

$$y_{n-1}\left\{-\frac{h^3}{24}F_n'' + \frac{h^2}{6}F_n' + \frac{h^2}{12}G_{n-1}\right\} + \frac{h^4}{12}F_n y_n''' + \frac{h^4}{12}H_n'' + O(h^6). \qquad (14)$$

En cuanto a y_n''', de (1) se obtiene

$$y_n''' = \frac{d}{dx}\{\,F y' + G y + H\,\}\Big|_{x_n} = F_n y_n'' + \{\,F_n' + G_n\,\}y_n' + G_n' y_n + H_n',$$

y utilizando (6) y (7), se llega a la relación

$$h^4 F_n y_n''' = h^4 F_n\left\{F_n\left(\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2}\right) +\right.$$

$$\left.(F_n' + G_n)\left(\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}\right) + G_n' y_n + H_n'\right\} + O(h^6). \qquad (15)$$

Se obtienen así expresiones para todas las derivadas de $y(x)$, y el algoritmo resultará entonces de reemplazar (14) y (15) en (10). Haciendo esto y factorizando y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, se obtiene

$$y_{n+1}\left[24 + h^3\{-F_n'' + F_n(F_n' + G_n)\} + h^2\{-4F_n' - 2G_{n+1} + 2F_n^2\} - 12hF_n\right] =$$

$$y_n\left[48 + h^2\{-8F_n' + 4F_n^2 + 20G_n\} - 2h^4 G_n' F_n\right] +$$

$$y_{n-1}\left[-24 + h^3\{-F_n'' + F_n(F_n' + G_n)\} + h^2\{4F_n' + 2G_{n-1} - 2F_n^2\} - 12hF_n\right]$$

$$-2h^4 F_n H_n' + 2h^4 H_n'' + 24h^2 H_n + O(h^6). \qquad (16)$$

3. CÁLCULOS

Para someter a prueba el algoritmo consideremos la ecuación diferencial

$$y'' = -2y' - 10y \qquad (17)$$

A pesar de que $H(x) = 0$, esta ecuación es apropiada para este propósito, pues los errores que se pueden cometer al deducir un algoritmo como el del presente trabajo sólo pueden ocurrir en el reemplazo de las derivadas, ya que en ninguna otra parte se hacen aproximaciones.

Si las condiciones iniciales son $y(0) = 3$, $y'(0) = 0$, la solución conocida de (17) es [1]:

$$y(x) = 3.1622776\ e^{-x} \cos(3x - 0.3217505), \tag{18}$$

donde la fase aparece expresada en radianes.

Teniendo en cuenta que $F = -2$, $G = -10$ y $H = 0$, al aplicar (16) se obtiene:

$$y_{n+1} = \frac{y_{n-1}\left\{ 5h^3 - 7h^2 + 6h - 6 \right\} + y_n\left\{ 12 - 46h^2 \right\}}{5h^3 + 7h^2 + 6h + 6}. \tag{19}$$

Eligiendo $h = 0.01$, e incluyendo sólo los datos correspondientes a valores enteros de x, se obtienen los siguientes resultados:

x	$y(x)$ según ecuación (19)	$y(x)$ según ecuación (18)
0		3
1	-1.040678814	-1.0406785
2	0.3520202015	0.3520199
3	-0.1155694647	-0.1155693
4	0.03653955596	0.0365394
5	-0.01097463189	-0.0109746
6	0.003048784382	0.00304877
7	$-7.354667469 \times 10^{-4}$	-7.35461×10^{-4}
8	$1.231027736 \times 10^{-4}$	1.231×10^{-4}
9	$9.867059949 \times 10^{-6}$	9.86774×10^{-6}
10	$-2.384727436 \times 10^{-5}$	-2.38475×10^{-5}

los cuales muestran un ajuste muy significativo.

4. ALGORITMO DE NUMEROV

Si tenemos una ecuación diferencial de segundo orden de la forma

$$y''(x) = G(x)y(x) + H(x) \tag{20}$$

utilizando los dos primeros términos de la serie (6) se obtiene

$$\frac{y_{n+1}-2y_n+y_{n-1}}{h^2}-\frac{h^2}{12}y_n^{iv}=G_n\,y_n+H_n+O(h^6),$$

y

$$\frac{y_{n+1}-2y_n+y_{n-1}}{h^2}-\frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\{G\,y\}\bigg|_{x_n}-\frac{h^2}{12}H_n''=G_n\,y_n+H_n+O(h^6),$$

de lo cual

$$y_{n+1}\left\{12-h^2G_{n+1}\right\}=y_n\left\{24+10h^2G_n\right\}+y_{n-1}\left\{-12+h^2G_{n-1}\right\}+$$
$$h^4H_n''+12h^2H_n+O(h^6).$$

Por lo tanto, el algoritmo (16) se reduce al de Numerov [2] cuando $F(x)=0$.

5. CONCLUSIONES

El algoritmo de Numerov es ampliamente usado en Física, en la resolución de la parte espacial de la ecuación de Schrödinger, resultante de la separación de variables. Es decir, permite calcular los estados propios de la energía con resultados muy exactos, ya que conserva términos del orden $O(h^5)$. Esto quiere decir, por ejemplo, que si h = 0.01 la precisión del algoritmo de Numerov es del orden de 10^{-10}. En vista de lo anterior, podemos considerar a (16) como una generalización de éste, pero con la ventaja de que (16) se aplica a ecuaciones de segundo orden que contienen términos en la primera derivada.

Este trabajo presenta así algunas posibilidades novedosas de elaborar algoritmos para integrar ecuaciones diferenciales ordinarias.

Bibliografía

[1] Kreyszig E 1963 *Advanced Engineering Mathematics* Wiley N Y

[2] Guerrero de Mesa A 1990 *Ondas y Oscilaciones* Edición preliminar, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.

[3] Sheid F 1968 *Análisis Numérico* Schaum McGraw-Hill, N Y

Este trabajo ha sido elaborado como parte de un proyecto de investigación financiado por la Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia (Bogotá) y el CINDEC.