Mètode de Taylor

Voldrem trobar mètodes d'ordre superior.

De forma anàloga al mètode d'Euler, els mètodes de Taylor es basen en aproximar la funció desconeguda $y(x)$ en $[x_n, x_{n+1}]$, $n = 0 \div N-1$, pel desenvolupament de Taylor fins a ordre k de la solució del problema de valor inicial,

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) , & x \in [x_n, x_{n+1}] \\ y(x_n) = y_n \end{cases}$$

al voltant de x_n. S'obté així un mètode d'integració d'ordre k. De fet, el mètode d'Euler no és més que el mètode de Taylor d'ordre 1.

Construïm ara el mètode de Taylor d'ordre 2:

prenem el

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

llavors coneixem $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$

Calculem $y''(x_0)$: primer

$$y''(x) = f_x(x,y) + f_y(x,y)y'(x) = f_x(x,y) + f_y(x,y) f(x,y) \quad (A)$$

llavors

$$y''(x_0) = f_x(x_0, y_0) + f_y(x_0, y_0) f(x_0, y_0)$$

Aproximem ara $y(x)$ per $[x_0, x_1]$ pel seu desenvolupament de Taylor fins ordre 2, al voltant de x_0:

EDO 8

$$y(x) \approx y(x_0) + y'(x_0)(x-x_0) + y''(x_0)\frac{(x-x_0)^2}{2!} =$$

$$= y_0 + f(x_0,y_0)(x-x_0) + \left[f_x(x_0,y_0) + f_y(x_0,y_0)f(x_0,y_0)\right]\frac{(x-x_0)^2}{2}$$

Així en $x=x_1$:

$$y(x_1) \approx y_0 + h f(x_0,y_0) + \frac{h^2}{2}\left[f_x(x_0,y_0) + f_y(x_0,y_0)f(x_0,y_0)\right] \equiv y_1.$$

El procés es segueix de forma recurrent i l'algorisme és:

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + h f(x_n,y_n) + \frac{h^2}{2}\left[f_x(x_n,y_n) + f_y(x_n,y_n)f(x_n,y_n)\right], \; n = 0 \div N-1 \end{cases}$$

que geomètricament, equival a considerar aproximacions per paràbola. És té

Proposició

El mètode de Taylor de 2n ordre just construït té ordre 2.

Prova.-

Aquest mètode és un mètode d'un pas amb

$$\Phi(x,y,h) = f(x,y) + \frac{h}{2}\left[f_x(x,y) + f_y(x,y)f(x,y)\right]$$

Llavors desenvolupant per Taylor al voltant de x, existeix $\eta(x) \in [a,b]$ tal que

$$\left|\frac{y(x+h)-y(x)}{h} - \Phi(x,y,h)\right| = \left|\frac{y(x+h)-y(x)}{h} - f(x,y) - \frac{h}{2}\left[f_x(x,y) + f_y(x,y)f(x,y)\right]\right|$$

$$= \left|y'(x) + y''(x)\frac{h}{2} + y'''(\eta(x))\frac{h^2}{6} - f(x,y) - \frac{h}{2}\left[f_x(x,y) + f_y(x,y)f(x,y)\right]\right| =$$

$$\overline{\overline{(A)}} \left|y'''(\eta(x))\frac{h^2}{6}\right| \leq K.h^2$$ suposant $y \in \mathcal{C}^3([a,b])$

Exemple. Considerem el problema de valors inicials

$$\begin{cases} y'(x) = y(x) \\ y(0) = 1 \end{cases} , \quad x \in [0,1] .$$

Sabem que la solució exacta d'aquest problema és $y(x) = e^x$. Anem però a integrar l'equació en $[0,1]$ pel mètode de Taylor de segon ordre global . Aquí $f(x,y) = y$, $f_x(x,y) = 0$, $f_y(x,y) = 1$, $y_0 = 1$, $a = 0$ i $b = 1$, per tant, l'algorisme esdevé

$$\begin{cases} y_0 = y(0) = 1 \\ y_{n+1} = y_n + hy_n + \frac{h^2}{2}[y_n] = y_n\left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right) \quad n = 0 \div N-1 , \end{cases}$$

d'on per a $h = 0.5$ i per a $h = 0.125$ s'obtenen les taules de valors següents:

$h = 0.5$		
x_n	y_n	$y(x_n)$
0	1	1
0.5	1.62500	1.64872
1	2.64062	2.71828

$h = 0.125$		
x_n	y_n	$y(x_n)$
0	1	1
0.125	1.13281	1.23148
0.250	1.28326	1.28402
0.375	1.45369	1.45499
0.500	1.64676	1.64872
0.625	1.86547	1.86824
0.750	2.11323	2.11700
0.875	2.39390	2.39887
1	2.71184	2.71828

Mètodes de Runge - Kutta

Venen definits per

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{k} c_i K_i^n \end{cases}, \quad n = 0 \div N-1$$

on $k \in \mathbb{N}$ està fixat i les K_i^n són funcions definides per la fórmula recurrent:

$$\begin{cases} K_1^n = f(x_n, y_n) \\ K_i^n = f\left(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} K_j^n\right) \end{cases}, \quad i = 2 \div k$$

amb a_i i b_{ij} constants a determinar de manera que el mètode tingui ordre global màxim.

Observem que es tracta de mètodes d'un pas on

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^{k} c_i K_i^n$$

D'aquesta forma es poden estalviar haver de calcular les derivades parcials successivament de la f, com passa en el mètode de Taylor, i aproximem aquestes derivades per combinacions lineals de $f(x,y)$ avaluats en punts estratègicament escollits a l'interval $[x_n, x_{n+1}]$.

De fet, prenent $k=1$, $c_1=1$, obtenim el mètode d'Euler i podem dir que és un mètode Runge-Kutta d'ordre 1, i s'escriu RK1.

– Prenem ara $k=2$ per tal de construir el RK2:

$$\Phi(x,y,h) = c_1 K_1 + c_2 K_2 = c_1 f(x,y) + c_2 f(x + \underbrace{a_2 h}_{\Delta x}, y + \underbrace{h b_{21} f(x,y)}_{\Delta y}) =$$

$$= c_1 f(x,y) + c_2 f(x+\Delta x, y+\Delta y)$$

Es tracta de determinar les constants c_1, c_2, a_2, b_{21} de forma que amb aquesta Φ, el mètode tingui ordre màxim.

Desenvolupem per Taylor al voltant de (x,y):

$$\Phi(x,y,h) = c_1 f(x,y) + c_2 \Big[f(x,y) + \Delta x f_x(x,y) + \Delta y f_y(x,y) +$$

$$+ \frac{1}{2!}(\Delta x)^2 f_{xx}(x,y) + \Delta x \Delta y f_{xy}(x,y) + \frac{(\Delta y)^2}{2!} f_{yy}(x,y) + \ldots \Big] =$$

$$= c_1 f(x,y) + c_2 \Big[f(x,y) + a_2 h f_x(x,y) + h b_{21} f(x,y) f_y(x,y) +$$

$$+ \frac{1}{2!}(a_2 h)^2 f_{xx}(x,y) + a_2 b_{21} h^2 f(x,y) \cdot f_{xy}(x,y) +$$

$$+ \frac{(h b_{21})^2}{2!} (f(x,y))^2 f_{yy}(x,y) \Big] + O(h^3) =$$

$$= (c_1 + c_2) f(x,y) + h a_2 c_2 f_x(x,y) + h c_2 b_{21} f(x,y) f_y(x,y) +$$

$$+ h^2 \Big[\frac{a_2^2 c_2}{2} f_{xx}(x,y) + a_2 b_{21} c_2 f(x,y) f_{xy}(x,y) +$$

$$\frac{c_2 b_{21}^2 (f(x,y))^2 f_{yy}(x,y)}{2} \Big] + O(h^3)$$

$$\frac{y(x+h)-y(x)}{h}=y'(x)+\frac{h}{2!}y''(x)+\frac{h^2}{3!}y'''(x)+O(h^3)=$$

$$=f(x,y)+\frac{h}{2}\left[f_x(x,y)+f(x,y)f_y(x,y)\right]+$$

$$+\frac{h^2}{3!}\left\{f_{xx}+f_{xy}f+\left[f_x+f_yf\right]f_y+f\left[f_{yx}+f_{yy}f\right]\right\}+O(h^3)=$$

$$=f(x,y)+\frac{h}{2}\left[f_x(x,y)+f(x,y)f_y(x,y)\right]+$$

$$+\frac{h^2}{3!}\Big[f_{xx}(x,y)+2f_{xy}(x,y)f(x,y)+f_x(x,y)f_y(x,y)+(f_y(x,y))^2f(x,y)+$$

$$+(f(x,y))^2f_{yy}(x,y)\Big]+O(h^3)$$

Portant,

$$\frac{y(x+h)-y(x)}{h}-\Phi(x,y,h)=(1-c_1-c_2)f(x,y)+$$

$$+h\left[\left(\frac{1}{2}-a_2c_2\right)f_x(x,y)+\left(\frac{1}{2}-c_2b_{21}\right)f(x,y)f_y(x,y)\right]+$$

$$+h^2\Big[\left(\frac{1}{6}-\frac{a_2^2c_2}{2}\right)f_{xx}(x,y)+\left(\frac{1}{6}-\frac{b_{21}^2c_2}{2}\right)f_{yy}(x,y)(f(x,y))^2+$$

$$+\left(\frac{1}{3}-a_2b_{21}c_2\right)f(x,y)f_{xy}(x,y)+\frac{1}{6}f_x(x,y)f_y(x,y)+\frac{1}{6}(f_y(x,y))^2f(x,y)\Big]$$

$$+O(h^3)$$

Observem, aquí, que el terme $\frac{h^2}{6}\left[f_x f + (f_y)^2 f\right]$ no és nul en general i per tant independentment de com sigui la tria de les constants, si $k=2$, com a màxim l'ordre del mètode serà 2.

Veiem ara que podem aconseguir que l'ordre sigui 2: volem anul·lar el coeficient del terme independent i el del terme en h:

$$\begin{cases} 1 - c_1 - c_2 = 0 \\ \frac{1}{2} - a_2 c_2 = 0 \\ \frac{1}{2} - c_2 b_{21} = 0 \end{cases}$$

que és un sistema compatible indeterminat

Per ~~tant~~ triant c_1, c_2, a_2, b_{21} que el compleixin, el mètode d'integració tindrà ordre 2. Existeixen uns infinitat de mètodes de Runge-Kutta d'ordre 2, però el més conegut, el RK2, s'aconsegueix amb

$$a_2 = b_{21} = 1 \quad , \quad c_1 = c_2 = \frac{1}{2}.$$

Llavors el RK2 és:

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{1}{2} f(x_n, y_n) + \frac{1}{2} f(x_n+h, y_n + hf(x_n, y_n))\right], \\ n = 0 \div N-1 \end{cases}$$

De forma similar, variant k, obtindrem altres mètodes de Runge-Kutta d'ordre superior, dels quals el més conegut és el Runge-Kutta d'ordre 4 o RK4 que s'obté amb k=4 i que ve definit per l'algorisme

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left[K_1^n + 2K_2^n + 2K_3^n + K_4^n\right] \end{cases} , n = 0 \div N-1$$

on

$$\begin{cases} K_1^n = f(x_n, y_n) \\ K_2^n = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} K_1^n\right) \\ K_3^n = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} K_2^n\right) \\ K_4^n = f(x_n + h, y_n + hK_3^n) \end{cases} , n = 0 \div N-1$$

Exemple Considerem el

$$\text{PVI}\begin{cases} y' = y & x\in[0,1] \\ y(0)=1 \end{cases}$$

Sabem que la solució exacta és $y(x)=e^x$. Anem ara a integrar l'EDO a $[0,1]$ amb el RK2 i el RK4.

L'algorisme del mètode RK2 és:

$$\begin{cases} y_0 = y(0) = 1 \\ y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{1}{2}y_n + \frac{1}{2}(y_n + hy_n)\right] = \left(1+h+\frac{h^2}{2}\right)y_n, \ n=0\div N-1 \end{cases}$$

Observem que aquest algorisme coincideix amb el del mètode de Taylor d'ordre 2 (cf. la pàg. EDO-9), però això és casual depèn a com és l'EDO. En aquest cas doncs, la taula de valors és la mateixa que la que havíem obtingut.

L'algorisme del mètode RK4 és:

$$\begin{cases} y_0 = y(0) = 1 \\ y_{n+1} = \left(1+h+\frac{h^2}{2}+\frac{h^3}{6}+\frac{h^4}{24}\right)y_n \quad , \quad n=0\div N-1 \end{cases}$$

ja que $k_1^n = y_n$; $k_2^n = y_n + \frac{h}{2}k_1^n = y_n + \frac{h}{2}y_n = y_n\left(1+\frac{h}{2}\right)$

$$k_3^n = y_n + \frac{h}{2}k_2^n = y_n + \frac{h}{2}\left(y_n + \frac{h}{2}y_n\right) = \left(1+\frac{h}{2}\right)y_n + \frac{h^2}{4}y_n = y_n\left(1+\frac{h}{2}+\frac{h^2}{4}\right)$$

$$k_4^n = y_n + hk_3^n = y_n + hy_n\left(1+\frac{h}{2}+\frac{h^2}{4}\right) = y_n\left(1+h+\frac{h^2}{2}+\frac{h^3}{4}\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left[y_n + 2y_n + hy_n + 2y_n\left(2+h+\frac{h^2}{2}\right) + y_n\left(1+h+\frac{h^2}{2}+\frac{h^3}{4}\right)\right] =$$

$$= \eta_n \left(1 + h + \frac{h^2}{6}(1+1+1) + \frac{h^3}{6}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) + \frac{h^4}{24} \right) =$$

$$= \eta_n \left(1 + h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{6} + \frac{h^4}{24} \right) \checkmark$$

Generalització a sistemes d'equacions diferencials ordinàries

Tots els mètodes exposats són fàcilment generalitzables al cas de sistemes d'equacions diferencials ordinàries, utilitzant la notació vectorial:

$$Y(x) = (y^1(x), \dots, y^m(x)) \quad , \quad x \in [a,b]$$

$$F(x, Y(x)) = \left(f^1(x, y^1(x), \dots, y^m(x)), \dots, f^m(x, y^1(x), \dots, y^m(x)) \right)$$

Per exemple, l'algorisme per al mètode d'Euler esdevé

$$\begin{cases} Y(a) = Y_0(a) \\ Y_{n+1} = Y_n + h F(x_n, Y_n) , \quad n = 0 \div N-1 \end{cases}$$

on $Y_0, \dots, Y_N$ són els vectors aproximació de la solució $Y(x)$. En components, ho escrivim

$$\begin{pmatrix} y^1_{n+1} \\ \vdots \\ y^m_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^1_n \\ \vdots \\ y^m_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} f^1(x_n, y^1_n, \dots, y^m_n) \\ \vdots \\ f^m(x_n, y^1_n, \dots, y^m_n) \end{pmatrix} , \quad n = 0 \div N-1$$

__Exemple__

$$\begin{cases} y_1' = x + y_1 \\ y_2' = y_1 + y_2 \\ Y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

Ara $F(x, Y(x)) = \begin{pmatrix} x + y_1 \\ y_1 + y_2 \end{pmatrix}$

Prenem $h = \frac{1}{4}$ i calculem Y_1, Y_2:

$$Y_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$Y_1 = Y_0 + h\,F(x_0, Y_0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0+1 \\ 1+0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$\simeq Y(\underbrace{x_0 + h}_{x_1}) = Y(\underbrace{0 + \tfrac{1}{4}}_{x_1})$$

$x_1 = 1/4$

$$Y_2 = Y_1 + h\,F(x_1, Y_1) = \begin{pmatrix} 5/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \frac{1}{4} + 5/4 \\ \frac{5}{4} + \frac{1}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13/8 \\ 5/8 \end{pmatrix}$$

$$\simeq Y(\underbrace{x_1 + h}_{x_2}) = Y(\underbrace{x_0 + 2h}_{x_2}) = Y\left(\tfrac{1}{2}\right)$$

Mètodes de multipas

Tornem al cas d'una sola EDO (es generalitza automàticament a un sistema d'EDO).

Considerem el problema de Cauchy o de valor inicial:

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

$x \in [a,b]$, $y \in \mathbb{R}$, $y_0 \in \mathbb{R}$, $f : [a,b] \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ és una funció prou bona per assegurar l'existència i unicitat de solució.

Fins ara hem vist els mètodes d'un sol pas que el càlcul de y_{n+1} només depenia del valor de (x_n, y_n).

Una altra possibilitat és utilitzar més punts anteriors (i per tant, ja calculats) per calcular l'aproximació y_{n+1}; aquesta és l'essència dels mètodes de multipas.