TEMA VII

RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

7.1. Introducción.

El modelo matemático de muchos sistemas físicos nos lleva frecuentemente a una ecuación diferencial. En muchas ocasiones, cuando no es posible obtener una solución analítica, debemos contentarnos con una solución numérica.

En este capítulo trataremos de encontrar una solución numérica a ecuaciones diferenciales de primer orden que tienen la forma

$$y' = f(x, y)$$
 con la condición inicial $y(x_0) = y_0$,
siendo $y = y(x)$ y $y' = \frac{dy}{dx}$

Ecuaciones diferenciales de orden superior pueden ser reducidas a un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden tal como veremos al final de este capítulo.

Los métodos numéricos no aportan la forma analítica y = y(x), sino un conjunto de valores y_n que responde a la solución aproximada para la abscisa x_n (n = 0,...,N). En adelante utilizaremos la siguiente notación:

 $y(x_n) \rightarrow \text{ solución exacta en el punto } x_n$ $y_n \rightarrow \text{ solución aproximada aportada por el método numérico en el punto } x_n$

Los métodos numéricos de resolución de ecuaciones diferenciales nos llevarán a una ecuación que nos suministra y_n y a la que se llama ecuación en diferencias.

Los métodos de resolución numérica de ecuaciones diferenciales los podemos clasificar como:

Métodos de un solo paso: El valor y_{n+1} se obtiene a partir del anterior y_n .

Métodos multipaso: El valor y_{n+1} se obtiene a partir de los valores y_n , y_{n-1} , ..., y_{n-p+1} (p pasos).

Por otro lado también podemos tener la clasificación:

Método de fórmula en diferencia explicita:

Ejemplo: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ con $h = x_{n+1} - x_n$, donde el valor que deseamos, y_{n+1} , está puesto explícitamente en función de valores conocidos. A la ecuación que nos da y_{n+1} se le llama ecuación en diferencias.

Método de fórmula en diferencia implícita:

Ejemplo: $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$ con $h = x_{n+1} - x_n$. Ahora el valor a calcular, y_{n+1} , está a la izquierda y a la derecha de la ecuación en diferencias.

Una ecuación en diferencias debe cumplir:

- a) Que tenga solución única.
- b) Que la solución tienda a la exacta, cuando $h = x_{n+1} x_n$ tienda a cero.
- c) Que su solución sea calculable prácticamente.

Sobre los errores de los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias se ha escrito mucho; pero, contrariamente a como sucede con la integración numérica en la que cada fórmula de integración vienen acompañada con una fórmula de error que de manera relativamente simple es capaz de suministrar una cota de error, en los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales, el estudio del error no se puede concretar en la mayoría de los casos en expresiones de tipo práctico y, aunque los estudios de error no dejan de ser interesantes, por su poco interés práctico serán dejados al margen en este curso introductorio.

7.2. El método de la serie de Taylor.

Este es el método inicial, en el que de alguna forma, se apoyan el resto de los métodos.

Recordemos que de la ecuación diferencial y' = f(x, y), con su condición inicial $y(x_0) = y_0$, queremos obtener y = y(x) y, en nuestro caso, por ser los métodos utilizados métodos numéricos, sólo aspiramos a conocer y(x) en un conjunto finito de valores de x.

Como sabemos, el desarrollo de Taylor toma la forma

$$y(x) = y(x_0) + \frac{h}{1!}y'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \dots + \frac{h^r}{r!}y^{(r)}(\xi)$$

con $h = x - x_0$ y $\xi \in [x_0, x]$.

La ecuación en diferencias asociada es

$$y_x = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \dots + \frac{h^{r-1}}{(r-1)!}y^{(r-1)}(x_0)$$

En la expresión anterior:

 $y(x_0) = y_0$ por la condición inicial,

 $y'(x_0) = f(x_0, y(x_0))$ por la propia ecuación diferencial,

 $y''(x_0),...,y^{(r-1)}(x_0)$ se obtienen derivando y' = f(x,y).

El error que se comete al truncar el desarrollo en serie viene dado por

$$R_r = \frac{h^r}{r!} y^{(r)}(\xi) \quad \text{con} \quad \xi \in [x_0, x].$$

VII-2

Para evaluar el error hay que obtener $y^{(r)}(\xi)$ pero la función y(x) es desconocida por lo que no podemos encontrar una cota de error calculando $\max\left\{y^{(r)}(\xi)\right\}$ en $\left[x_0,x\right]$. Sólo se puede obtener un indicador del error con $y^{(r)}(x_0)$.

Ejemplo 1:

Vamos a utilizar a lo largo de este capítulo la ecuación diferencial y la condición de contorno:

$$\frac{dy}{dx} = -2x - y \qquad \text{con} \qquad y(0) = -1.$$

Esta ecuación diferencial es fácilmente resoluble analíticamente y podremos comparar los valores exactos con los numéricos. La ecuación diferencial anterior es de tipo lineal de $1^{\rm er}$ orden de la forma

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$

que tiene como solución

$$y e^{\int P(x)dx} = \int Q(x) e^{\int P(x)dx} dx + C.$$

Para nuestro caso particular

$$y e^{\int dx} = \int -2x e^{\int dx} dx + C \Rightarrow y e^x = -2 \int x e^x dx + C$$

Con
$$\int x e^{ax} dx = \frac{e^{ax}}{a} \left(x - \frac{1}{a} \right)$$
 nos queda

$$ye^{x} = -2\{e^{x}(x-1)\} + C \Rightarrow y = -2(x-1) + Ce^{-x} \Rightarrow y = -2x + 2 + Ce^{-x}$$
.

Imponiendo la condición inicial $y(0)=-1 \Rightarrow -1=2+C \Rightarrow C=-3$, y la solución analítica queda

$$y(x) = -3e^{-x} - 2x + 2.$$

Ahora intentamos la solución numérica quedándonos, en el desarrollo en serie de Taylor, en el orden 4⇒

$$y_x = y(0) + y'(0)h + y''(0)\frac{h^2}{2} + y'''(0)\frac{h^3}{6} + y^{IV}(0)\frac{h^4}{24}$$

donde

y(0) = -1, por la condición inicial.

y' = -2x - y, por la propia ecuación diferencial $\Rightarrow y'(0) = 1$.

$$y'' = -2 - y' \Rightarrow y''(0) = -2 - y'(0) \Rightarrow y''(0) = -3$$
.

$$y''' = -y'' \Rightarrow y'''(0) = -y''(0) \Rightarrow y'''(0) = 3$$
.

$$y^{IV} = -y''' \Rightarrow y^{IV}(0) = -y'''(0) \Rightarrow y^{IV}(0) = -3.$$

Por tanto

$$y_x = -1 + h - 1.5h^2 + 0.5h^3 - 0.125h^4$$

siendo $x \equiv h$ ya que $h = x - x_0$ y en nuestro caso $x_0 = 0$. En la tabla siguiente se comparan las soluciones numéricas y analíticas para diferentes valores de x.

X	y_x (numérica)	y(x) (analítica)	$y_x - y(x)$	$R_5(0)$
0.0	-1.00000	-1.00000	0	0
0.1	-0.91451	-0.91451	0	$2.5 \cdot 10^{-7}$
0.2	-0.85620	-0.85619	1.10^{-5}	$8.0 \cdot 10^{-6}$
0.3	-0.82251	-0.82245	6.10^{-5}	$6.0 \cdot 10^{-5}$
0.4	-0.81120	-0.81096	$2.4 \cdot 10^{-4}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$
0.5	-0.82031	-0.81959	$7.2 \cdot 10^{-4}$	$7.8 \cdot 10^{-4}$

El error viene dado por $R_5(\xi) = \frac{h^5}{5!} y^V(\xi)$, con $y^V(x) = -y^{IV}(x)$, pero estas funciones sólo son conocidas en cero $\Rightarrow y^V(0) = 3$ y $R_5(0) = \frac{h^5}{5!}3$, que no es una cota de error, sino un indicador de la magnitud del error. En la tabla también se incluye este indicador.

Ejemplo 2:

El método de la serie de Taylor se aplica con facilidad a ecuaciones de orden superior. Por ejemplo si se tiene

$$y'' = 3 + x - y^2$$
 con $y(0) = 1$ y $y'(0) = -2$,

tomando la ecuación en diferencias, de nuevo hasta 4º orden, con $h=x-x_0=x-0=x\Longrightarrow$

$$y_h = y(0) + y'(0)h + y''(0)\frac{h^2}{2} + y'''(0)\frac{h^3}{6} + y^{IV}(0)\frac{h^4}{24}$$

Los términos a la derecha del signo igual vienen dados por

$$y(0) = 1$$
.

$$y'(0) = -2$$
.

 $y''(x) = 3 + x - y^2 \Rightarrow y''(0) = 2$, por propia ecuación diferencial.

$$y'''(x) = 1 - 2yy' \Rightarrow y'''(0) = 5$$
.

$$y^{IV}(x) = -2(y'y' + yy'') \Rightarrow y^{IV}(0) = -12$$
.

Con lo que

$$y_x = 1 - 2h + h^2 + \frac{5}{6}h^3 - \frac{1}{2}h^4$$
.

Por su parte el error viene dado por $R_5(\xi) = \frac{h^5}{5!} y^V(\xi)$, con

$$y^{V}(x) = -2(2y'y'' + y'y'' + yy''') \Rightarrow y^{V}(0) = -2(-2^{3} - 2^{2} + 5) = 14 \Rightarrow R_{5}(0) = \frac{7}{60}h^{5}.$$

En la tabla recogemos las soluciones y los indicadores de error. En este caso, la solución exacta no es fácil de calcular.

X	y_x (numérica)	$R_5(0)$
0.0	1.0000000	0
0.1	0.8107833	1.16·10 ⁻⁶
0.2	0.6458666	$3.73 \cdot 10^{-5}$
0.3	0.5084500	$2.84 \cdot 10^{-4}$
0.4	0.4005333	$1.20 \cdot 10^{-3}$
0.5	0.3229167	$3.64 \cdot 10^{-3}$

7.3. El método de Euler.

En el método visto en el apartado anterior, el error que cometemos es proporcional a h. Otro posible problema del método descrito es el cálculo de las sucesivas derivadas que pueden complicarse significativamente.

Si hacemos h lo suficientemente pequeño, podríamos quedarnos con menos términos en el desarrollo de Taylor. El método de Euler se basa en esta idea: Hacemos h muy pequeño y nos quedamos en 1^{er} orden de aproximación, aplicando reiteradamente el procedimiento lineal, utilizando los resultados que vamos obteniendo.

Es decir, si

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{1!}y'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(\xi_n)$$
 con $\xi_n \in [x_n, x_{n+1}]$,

la ecuación en diferencias será

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n$$
 ó $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$ con $n = 0, 1, ..., N$

y será conocida la etapa cero por las condiciones iniciales $y(x_0) = y_0$.

El error tiene una parte debida al truncamiento de la serie de Taylor que vendrá dado por $\frac{h^2}{2!}y''(\xi_n)$, que nos sirve como indicador del error cometido, pero ahora existe otro tipo de error generado al pasar de una etapa a otra por el hecho de utilizar $f(x_n, y_n)$ en lugar de $f(x_n, y(x_n))$. Este último término no es evaluable al desconocer el valor exacto $y(x_n)$; sólo conocemos un valor próximo a él, la solución numérica y_n .

Ejemplo:

Vamos a volver a resolver y' = -2x - y con la condición y(0) = -1.

Utilizando la ecuación en diferencias $y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$, nos queda en nuestro caso

$$y_{n+1} = y_n - h(2x_n + y_n)$$

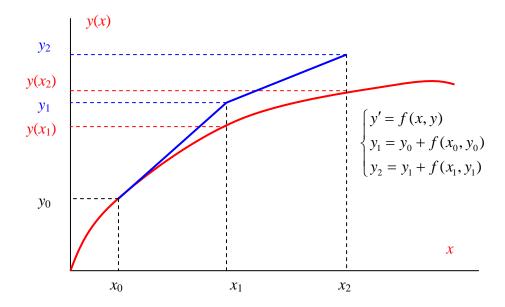
Si como en el caso anterior hacemos h=0.1 y calculamos para los mismos puntos, se obtienen los siguientes resultados:

n	\mathcal{X}_n	y_n (numérica)	$y(x_n)$ (analítica)	$y_n - y(x_n)$
0	0.0	-1.000000	-1.000000	0.000
1	0.1	-0.900000	-0.914512	0.015
2	0.2	-0.830000	-0.856192	0.026
3	0.3	-0.787000	-0.822455	0.035
4	0.4	-0.768300	-0.810960	0.043
5	0.5	-0.771470	-0.819592	0.048

El error es considerablemente superior al caso anterior, como es lógico; pero es que no hemos hecho h lo suficientemente pequeño. Este método es para implementarlo en un ordenador, si hacemos h=0.0001 y recorremos desde x=0.0 hasta x=0.5 en 5000 pasos, obtenemos unos resultados comparables a los del método de Taylor.

7.4. <u>Método de Euler modificado, método de Euler-Cauchy o método del predictor </u> <u>-corrector.</u>

El problema del método de Euler es su falta de exactitud, y su ventaja, su sencillez. Todo esto se entiende bien de su interpretación geométrica que vemos en la siguiente gráfica.



En el método de Euler, como vemos en su ecuación en diferencias

$$y_{n+1} = y_n + h y_n',$$

utilizamos la pendiente al principio del intervalo, y'_n , para determinar el incremento de la función. Esta técnica sólo es correcta para el caso que la función fuese lineal. Lo que necesitaríamos sería la pendiente media que nos llevase de (x_0, y_0) a $(x_1, y(x_1))$ y no a (x_1, y_1) , y así en cada uno de los subintervalos.

Por tanto encontraríamos una mayor exactitud si utilizásemos la ecuación en diferencias

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{y'_n + y'_{n+1}}{2}$$
,

donde hemos sustituido la pendiente al inicio del intervalo, y'_n , por la media geométrica del principio y del final, $\frac{y'_n + y'_{n+1}}{2}$.

El problema está en que antes de conocer y'_{n+1} , necesitamos conocer y_{n+1} , ya que a y'_{n+1} llegamos a través de la expresión y' = f(x, y).

El método de Euler modificado utiliza todas las ideas anteriores de la siguiente forma:

- 1°) Con $y_{n+1} = y_n + h y_n'$, estimamos un valor inicial de y_{n+1} (valor predictor).
- 2°) Con y_{n+1} y y' = f(x, y), calculamos y'_{n+1} .
- 3°) Con $y_{n+1} = y_n + h \frac{y'_n + y'_{n+1}}{2}$, calculamos un nuevo valor de y_{n+1} (valor corregido).

4°) Si la diferencia entre los valores predicho y corregido es elevada, se puede volver al punto 2° con el valor corregido, volver a calcular un nuevo y'_{n+1} y obtener un nuevo y_{n+1} , dos veces corregido.

Sobre el error en el método de Euler modificado: En el método de Euler inicial, con la ecuación en diferencias $y_{n+1} = y_n + h y'_n$, es claro que al quedarnos en 1^{er} orden del desarrollo, el error es del orden $O(h^2)$.

Si derivamos la ecuación anterior y despejamos y'', añadiendo el termino de error:

$$y'_{n+1} = y'_n + h y''_n + O(h^2) \Rightarrow y''_n = \frac{y'_{n+1} - y'_n}{h} + O(h)$$
,

para sustituirla en la ecuación en diferencias de la serie de Taylor para 2º orden:

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n + \frac{1}{2} h^2 y''_n + O(h^3)$$

obtenemos

$$y_{n+1} = y_n + h y_n' + \frac{1}{2} h^2 \left[\frac{y_{n+1}' - y_n'}{h} + O(h) \right] + O(h^3)$$

que podemos poner en la forma

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{y'_n + y'_{n+1}}{2} + O(h^3)$$

que resulta ser el método de Euler modificado o de Euler-Cauchy. Por tanto, en este método, el error cometido es inferior al de Euler inicial.

Ejemplo:

Resolución, por el método de Euler-Cauchy, de la ecuación diferencial y' = -2x - y con la condición y(0) = -1.

Siguiendo el esquema expuesto anteriormente:

- 1. $y_{n+1} = y_n + h y'_n \rightarrow \text{Se evalúa } y_{n+1} \text{ como predictor.}$
- 2. $y'_{n+1} = -2x_{n+1} y_{n+1} \rightarrow \text{Se evalúa } y'_{n+1}$.

3.
$$y_{n+1} = y_n + h \frac{y'_n + y'_{n+1}}{2}$$
 \rightarrow Se evalúa y_{n+1} corregido.

Aplicando los pasos anteriores, hacemos la siguiente tabla (h = 0.1):

x_n	y _n (inicial)	$y_n' = -2x_n - y_n$	$y_{n+1}^p = y_n + h y_n'$	$y'_{n+1} = -2x_{n+1} - y_{n+1}$	$y_{n+1}^{c} = y_{n} + \frac{y_{n+1}' + y_{n+1}'}{2}$	y(x) (analítico)
0.0	-1.0000	1.0000	-0.9000	0.7000	-0.9150	-1.0000
0.1	-0.9150	0.7150	-0.8435	0.4435	-0.8571	-0.9145
0.2	-0.8571	0.4571	-0.8114	0.2114	-0.8237	-0.8562
0.3	-0.8237 ←	0.2237	-0.8013	0.0013	-0.8124	-0.8225
0.4	-0.8124	0.1241	-0.8112	-0.1888	0.8212	-0.8110
0.5	-0.8212 ←					-0.8196

En el proceso anterior hemos obtenido un valor y_{n+1} predictor y otro y_{n+1} corregido, pero si la diferencia entre los dos valores nos parece excesiva podemos volver a corregir las veces que estimemos oportunas. Vamos a hacer el ejemplo anterior corrigiendo un par de veces:

x_n	y _n (inicial)	$y_n' = -2x_n - y_n$	$y_{n+1}^p = y_n + h y_n'$	$y'_{n+1} = -2x_{n+1} - y_{n+1}$	$y_{n+1}^{c} = y_{n} + \frac{y_{n}' + y_{n+1}'}{2}$	y(x) (analítico)
0.0	-1.0000	1.0000	-0.9000	0.7000	-0.9150	-1.0000
			− 0.9150 ←	0.7150	-0.9143	
			-0.9143	0.7143	0.9143	
0.1	-0.9143 ←	0.7143	-0.8429	0.4429	0.8564	-0.9145
			-0.8564	0.4564	0.8558	
			-0.8558	0.4558	0.8558	
0.2	-0.8558					-0.8562

Vemos en el ejemplo que con la 1ª corrección obtenemos un mejor resultado, pero la 2ª corrección suele se bastante innecesaria.

7.5. Métodos de Runge-Kutta.

• Para entender el funcionamiento de estos métodos partiremos de la identidad

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x) dx$$
.

La ecuación anterior es una identidad ya que

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx = \int_{x}^{x_{n+1}} \frac{dy}{dx} dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} dy = y(x_{n+1}) - y(x_n)$$

Recordemos, también, antes de seguir adelante, que queremos resolver la ecuación diferencial y' = f(x, y).

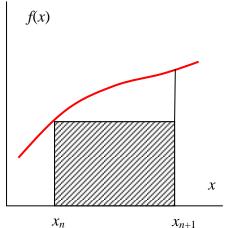
• Si la integral de nuestra ecuación la aproximamos por $hf(x_n, y(x_n))$, obtenemos

$$y(x_{n+1}) \simeq y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

o la ecuación en diferencias

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$$

que no es más que el método de Euler visto anteriormente. En este caso el error es del orden de $O(h^2)$.



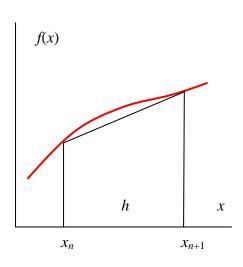
• Intentemos hacer la integral de una forma más exacta, utilizando la fórmula del trapecio

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)dx \simeq \frac{h}{2} [f(x_{n+1}) + f(x_n)] \Longrightarrow$$

$$y(x_{n+1}) \simeq y(x_n) + \frac{h}{2} [f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))]$$

que nos lleva a la ecuación en diferencias

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [y'_n + y'_{n+1}]$$



donde y'_{n+1} puede ser estimada a partir de una evaluación anterior con el método de Euler

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

y este método de Runge-Kutta es idéntico al de Euler-Cauchy.

En este caso, como el resto en la fórmula del trapecio estaba dada por $r=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$, siendo $r \propto (b-a)^3=h^3$, el error ha disminuido su orden, siendo ahora del orden de $O(h^3)$.

• Otra forma de realizarla de manera aproximada la integral es la siguiente:

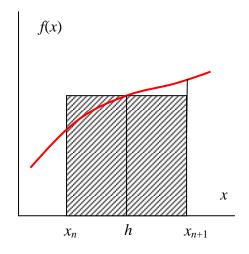
$$\int_{x_{n}}^{x_{n+1}} f(x)dx = hf(x_{n+\frac{1}{2}})$$

de forma que

$$y(x_{n+1}) \simeq y(x_n) + h f(x_{n+\frac{1}{2}}, y(x_{n+\frac{1}{2}}))$$

que nos lleva a la ecuación en diferencias

$$y_{n+1} = y_n + h y'_{n+\frac{1}{2}}$$



donde, para estimar $y'_{n+\frac{1}{2}}$, debe de evaluarse previamente $y_{n+\frac{1}{2}}$ mediante la expresión de Euler

$$y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)$$

A la pareja de expresiones

$$\begin{cases} y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + h y'_{n+\frac{1}{2}} = y_n + h f(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}) \end{cases}$$

se le denomina "*Método de la tangente mejorada*" y tiene un comportamiento similar al de Euler-Cauchy.

• Si seguimos haciendo la integral de manera más sofisticada, iremos encontrando otros métodos de Runge-Kutta, pero estos dos matemáticos alemanes propusieron la siguiente metodología para encontrar las fórmulas en diferencia:

Partimos de la expresión genérica

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{p} w_i k_i$$

donde p es un número entero, llamado rango del algoritmo, w_i son constantes a determinar y los k_i vienen dados por

$$k_i = h f(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{i=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad \text{con} \quad \alpha_1 = 0,$$

es decir

$$k_{1} = h f(x_{n}, y_{n})$$

$$k_{2} = h f(x_{n} + \alpha_{2}h, y_{n} + \beta_{21}k_{1})$$

$$k_{3} = h f(x_{n} + \alpha_{3}h, y_{n} + \beta_{31}k_{1} + \beta_{32}k_{2})$$
...

Fijado el rango p, quedan por determinar w_i , α_i y β_{ij} , y, para determinar estos parámetros, comparamos la expresión genérica que estamos proponiendo con el desarrollo de Taylor de $y(x_n)$, comparando, término a término, los que tengan igual h^r con r = 1, 2, ..., m.

• Vamos a comenzar a hacer esto que hemos descrito por el caso más simple, p=1.

Con rango 1, la expresión de Runge -Kutta queda

$$y_{n+1} = y_n + w_1 k_1 = y_n + w_1 h f(x_n, y_n)$$

Por otro lado, el desarrollo de Taylor hasta 1^{er} orden queda

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h y'(x_n) + \cdots$$

Asimilando $y(x_n)$ a y_n y con $y'(x_n) = f(x_n, y_n)$, nos queda $w_1=1$ y la expresión del desarrollo de Runge –Kutta no es más que

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

que es el método de Euler.

Pasamos ahora a rango 2, p = 2. El desarrollo de Runge –Kutta queda

$$y_{n+1} = y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2 =$$

$$= y_n + w_1 h f(x_n, y_n) + w_2 h f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} k_1) =$$

$$= y_n + w_1 h f(x_n, y_n) + w_2 h f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} h f(x_n, y_n))$$

Con la finalidad de obtener los diferentes parámetros, desarrollamos el último sumando de la expresión anterior, teniendo en cuenta que es una función de dos variables; es decir

$$f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} h f(x_n, y_n)) = f(x_n, y_n) + \alpha_2 h \left[\frac{\partial f}{\partial x}\right]_{x_n, y_n} + \beta_{21} h f(x_n, y_n) \left[\frac{\partial f}{\partial y}\right]_{x_n, y_n} + \cdots$$

quedándonos en 1^{er} orden, aunque podíamos haber continuado este desarrollo a órdenes superiores. Llevando esta expresión al desarrollo de Runge –Kutta queda

$$y_{n+1} = y_n + w_1 h f(x_n, y_n) + w_2 h f(x_n, y_n) + w_2 \alpha_2 h^2 \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{x_n, y_n} + w_2 \beta_{21} h^2 f(x_n, y_n) \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]_{x_n, y_n} + \cdots$$

Por otro lado, tomamos ahora el desarrollo de Taylor hasta orden 2, término de h^2 :

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{1!}y'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \cdots$$

e introducimos en él, la ecuación diferencial y' = f(x, y) y la derivada segunda, calculada a partir de la ecuación diferencial tal como sigue:

$$y''(x) = \frac{d}{dx}y'(x) = \frac{d}{dx}f(x,y) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} \implies y''(x) = \frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}$$

Introduciendo y'(x) e y''(x) en el desarrollo de Taylor:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{x_n} + \frac{h^2}{2} f(x_n, y(x_n)) \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]_{x} + \cdots$$

Comparando el desarrollo de Taylor con la expresión de Runge-Kutta, asimilando $y(x_n)$ a y_n , ambas expresiones serán idénticas con:

Término de h: $w_1 + w_2 = 1$.

Término de
$$h^2$$
 y $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_x$: $w_2\alpha_2 = \frac{1}{2}$.

Término de
$$h^2$$
 y $f\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{x_n}$: $w_2\beta_{21} = \frac{1}{2}$.

Hemos obtenido un sistema de tres ecuaciones y cuatro incógnitas $(w_1, w_2, \alpha_2, \beta_{21})$ que tiene por tanto infinitas soluciones.

Si nos decantamos por

$$w_1 = w_2 = \frac{1}{2},$$

 $\alpha_2 = \beta_{21} = 1,$

la fórmula de Runge-Kutta pasa a ser

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \{ f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n)) \}$$

que puede ser puesta en la forma

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \{ f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}) \}$$

$$con \quad y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$$

que no es más que el método de Euler-Cauchy.

Si de las infinitas soluciones nos quedamos ahora con

$$w_1 = 0,$$

 $w_2 = 1,$
 $\alpha_2 = \beta_{21} = \frac{1}{2},$

daremos origen a la fórmula de Runge-Kutta

$$y_{n+1} = y_n + hf \left[x_n + \frac{1}{2}h, \quad y_n + \frac{1}{2}hf(x_n, y_n) \right]$$

que puesta en la forma

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}})$$

$$con \quad y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{1}{2} h f(x_n, y_n)$$

resulta ser el método de la tangente mejorada, visto anteriormente.

• Recordamos que a p, en la expresión genérica $y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^p w_i k_i$, le llamamos rango del algoritmo de Runge-Kutta y que después, desarrollando esta expresión, vamos comparando con los diferentes términos del desarrollo de Taylor que llevan el mismo factor h^r (r=1,...,m). Normalmente p (rango del algoritmo) y m (orden del algoritmo) toman el mismo valor, pero no necesariamente tienen que hacerlo. Un algoritmo de Runge-Kutta de orden m y rango p se acostumbra a expresar como RK_{mp} .

Siguiendo el procedimiento mostrado, podemos ir aumentando el rango y el orden, aunque cada vez tendremos más incógnitas y más ecuaciones que resolver. Uno de los procedimientos más utilizados es el RK₄₄ en el que aparecen 11 ecuaciones con 13 incógnitas $(w_1, w_2, w_3, w_4, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{21}, \beta_{31}, \beta_{32}, \beta_{41}, \beta_{42}, \beta_{43})$ y dentro de él la solución más empleada es la siguiente:

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

 $k_2 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2})$

$$k_3 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2})$$

$$k_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

con un error del orden de $O(h^5)$.

Actualmente existen métodos de Runge-Kutta de 5°, 6°, 7° y 8° orden, aunque cuando se habla del método de Runge-Kutta a secas es está hablando del RK₄₄.

Uno de los problemas de todos estos métodos es conocer el error que se comete ya que si se puede dar un índice del error que se comete en cada paso, no es posible ver su efecto al pasar de un paso al siguiente. Para saber si el paso h es adecuado o demasiado grande se suele seguir la siguiente metodología: Se calcula un problema con h y h/2, si los resultados son similares se da el cálculo por bueno; si los resultados son distintos, hay que pasar a h/4 y volver a comparar con h/2, repitiendo el proceso hasta conseguir unos resultados similares.

Ejemplo:

Resolución, por el método RK₄₄, de la ecuación diferencial y' = -2x - y con la condición y(0) = -1.

La implementación del método RK₄₄ es inmediata: Se calculan los coeficientes k_1 , k_2 , k_3 y k_4 con los valores (x_n, y_n) y con estos se construye y_{n+1} .

Los resultados serían:

xn,	y numérica,	y analítica	
.10 .20 .30 .40	91451E+00 85619E+00 82246E+00 81096E+00 81959E+00	91451E+00 85619E+00 82245E+00 81096E+00 81959E+00	

Los resultados obtenidos son de una exactitud espectacular, lo que hace por su sencillez y exactitud muy popular al método RK_{44} . Si pasamos el programa con paso mitad, obtenemos los mismos resultados los que nos indica que el paso h =0.1 era de una buena longitud. Los resultados con paso mitad son los de la tabla siguiente:

xn,	y numérica,	y analítica
.10	91451E+00	91451E+00
.20	85619E+00	85619E+00
.30	82246E+00	82245E+00
.40	81096E+00	81096E+00
.50	81959E+00	81959E+00