Programación Numérica

Dr. Angel Rubén Barberis

Resolución Numérica de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Departamento de Informática. Facultad de Cs. Exactas Universidad Nacional de Salta

1. Introducción

Una ecuación diferencial es una ecuación donde interviene una relación entre la variable independiente x, la función incógnita y(x) y una o más de sus derivadas. En forma implícita se expresa de la forma:

$$F(x, y, y', y'', ..., y^{(n)}) = 0$$

A veces, se puede despejar la derivada de orden n obteniendo la forma:

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

Ejemplo:

$$y''(x) + 7y'(x) + 7y(x) = 0$$
$$[u'''(x)]^{2} - [u''(x)]^{4} + 7u(x) = 0$$

 $y' + 3xy - e^x = 0$ puede escribirse como $y' = e^x - 3xy$.

Definición 1: El <u>orden</u> de una ecuación diferencial es el orden de la mayor derivada que aparece en ella.

Definición 2: El <u>grado</u> de una ecuación diferencial es el exponente de la derivada de mayor orden que aparece en ella.

Ejemplo:

- 1) La ecuación F(x, y, y') = 0 es una ecuación de primer orden.
- 2) La ecuación y''(x) + 7y'(x) + 7y(x) = 0 tiene orden 2 y es de grado 1.
- 3) La ecuación $[u'''(x)]^2 [u''(x)]^4 + 7u(x) = 0$ tiene orden 3 y es de grado 2.

Definición 3: Una ecuación diferencial es <u>ordinaria</u> cuando la función incógnita depende de una sola variable. Todos los ejemplos mostrados anteriormente son ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO).

Definición 4: Una EDO es <u>lineal</u> cuando la ecuación diferencial es lineal respecto de la función incógnita y de sus derivadas.

Ejemplo:

$$\begin{array}{lll} y''(x)+2\ b\ [y'(x)]^3+y(x)=0 & \text{es una EDO no lineal.}\\ y''(x)+y'(x)-6\ y(x)=0 & \text{es una EDO lineal.}\\ y(x)\ y'(x)+2\ y(x)=0 & \text{es una EDO cuasi-lineal.} \end{array}$$

Las EDOs pueden ser:

- lineales a coeficientes constantes, por ejemplo y' + 3 y = f(x),
- lineales a coeficientes variables, por ejemplo $y' + 2 x^2 y = f(x)$,
- no lineales, por ejemplo y' y + 5 y = 0 ó $(y')^2 + 2$ y = 0,

2. Soluciones Analíticas y Numéricas

La solución de una ecuación diferencial ordinaria es una función que satisface la ecuación y las correspondientes condiciones suplementarias en el dominio de interés.

Sea la EDO de orden n $F(x, y, y', y'', ..., y^{(n)})=0$ definida en algún intervalo I. Se dice que $y=\varphi(x)$ satisface la ecuación diferencial si verifica la igualdad al reemplazar y y sus derivadas por $\varphi(x)$ y sus correspondientes derivadas en algún intervalo I. El intervalo I puede ser abierto (a, b), cerrado [a, b], infinito (a, ∞) , etc. Por comodidad, se supondrá que una solución $\varphi(x)$ es una función de valores reales.

Un modo de comprobar que la función $\varphi(x)$ dada es una solución es escribir la ecuación diferencial en la forma implícita igualada a cero, es decir, como

$$F(x, y, y', y'', ..., y^{(n)}) = 0$$

tal que, al reemplazar $y, y', y'', ..., y^{(n)}$ por las correspondientes $\varphi, \varphi', \varphi'', ..., \varphi^{(n)}$ se mantenga la igualdad a cero. Esto es

$$F(x, \varphi(x), \varphi'(x), \varphi''(x), ..., \varphi^{(n)}(x)) = 0.$$

Ejemplo:

Muestre que la función $y = x e^x$ es una solución de $y' = \frac{1}{2}(y'' + y)$ en el intervalo $(-\infty, \infty)$. Para demostrarlo,

- 1) A partir de $y = x e^x$ se obtienen $y' = x e^x + e^x$ y $y'' = x e^x + 2e^x$.
- 2) Se expresa la ecuación diferencial en su forma implícita F(x, y, y', y'') = 0. Esto es:

$$y' = \frac{1}{2}(y'' + y)$$
 \rightarrow $y'' - 2y' + y = 0$

Luego, reemplazando en F(x, y, y', y'') = 0 se tiene:

$$F(x, y, y', y'') = y'' - 2y' + y = x e^{x} + 2e^{x} - 2(x e^{x} + e^{x}) + x e^{x} = 0$$

$$\Rightarrow F(x, y, y', y'') = x e^{x} + 2e^{x} - 2x e^{x} - 2e^{x} + x e^{x} = 0$$

$$\Rightarrow F(x, y, y', y'') = 2x e^{x} - 2x e^{x} + 2e^{x} - 2e^{x} = 0$$

De esta manera, se comprueba que y=x e^x es una solución de $y'=\frac{1}{2}(y''+y)$ en el intervalo dado.

El problema más sencillo en ecuaciones diferenciales ordinarias es el de encontrar una función y(x) cuya derivada es de la forma

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{3.1}$$

donde f(x, y) es una función dada de x e y. En el caso particular donde f(x, y) no depende de y, se escribe directamente como f(x). La solución formal de (3.1) está dada por

$$y = \int f(x) \, dx \tag{3.2}$$

Sin embargo, detrás de esta notación se esconden dos inconvenientes inmediatos, uno fácil de resolver, y el otro es causa de muchas dificultades prácticas.

En el primero de los inconvenientes, la ecuación (3.2) no se determina de manera única. Si se resolviera la integral indefinida, se obtendría un resultado sumado una constante arbitraria C. Más aún, la solución a (3.1) puede estar expresada también en función de C. Cualquier valor que se le asignara a C, igual seguirá satisfaciendo la ecuación (3.1).

Ejemplo:

Sea el problema y' + y = 0. La solución es $y(x) = C e^{-x}$.

1) Si C=5, entonces y(x)=5 e^{-x} es una solución. La derivada y'(x)=-5 e^{-x} . Entonces

$$y' + y = -5 e^{-x} + 5 e^{-x} = 0$$

2) Si $C=\frac{1}{2}$, entonces $y(x)=\frac{1}{2}e^{-x}$ es una solución. La derivada $y'(x)=-\frac{1}{2}e^{-x}$. Entonces

$$y' + y = -\frac{1}{2} e^{-x} + \frac{1}{2} e^{-x} = 0$$

Así, para cualquier valor $v \in \mathbb{R}$, que se asignara a C, generará infinitas soluciones.

Una manera de dar solución única al problema es fijando el valor de $y = y_0$ cuando $x = x_0$. Entonces, en lugar de la integral indefinida de (3.2), se tiene la integral definida

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(t) dt$$
 (3.3)

que es solución única.

Ejemplo:

Sea el problema y' + y = 0. La solución es $y(x) = C e^{-x}$ con la condición y(3) = 2.

Luego, la solución única se obtiene resolviendo a través de (3.3), esto es:

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t) dt = 2 + \int_3^x -y dt = 2 + \int_3^x -C e^{-t} dt$$
$$= 2 + C\left(e^{-t}\Big|_3^x\right) = 2 + C\left(e^{-x} - e^{-3}\right)$$

Para que $y(x) = 2 + C \left(e^{-x} - e^{-3}\right)$ sea solución debe verificar la ecuación diferencial del problema, esto es

$$y' + y = -C e^{-x} + 2 + C (e^{-x} - e^{-3}) = 0$$

$$\Rightarrow -C e^{-x} + 2 + C e^{-x} - C e^{-3} = 0$$

$$\Rightarrow 2 - C e^{-3} = 0$$

$$\Rightarrow C e^{-3} = 2$$

$$\Rightarrow C = 2 e^{3}$$

Esto quiere decir que, para tener una solución única se debe fijar C en $2e^3$, tal que la función y(x) pase por el punto $(x_0, y_0) = (3, 2)$ que se exige como condición.

Otro modo de obtener el valor de C que conduzca a una solución única para la ecuación diferencial con la condición impuesta es:

Se sabe que
$$y(3) = 2$$
 y que $y(x) = C e^{-x}$ entonces debe cumplirse que $y(3) = C e^{-3} = 2$ esto es $C e^{-3} = 2$ \Rightarrow $C = 2e^{3}$

El segundo de los problemas, es que la integral en (3.2) o (3.3) no siempre puede evaluarse explícitamente como una expresión analítica para y(x). En muchos casos es posible sólo para ciertas formas específicas de la función f(x), y aun así, muchas veces es necesario adivinar el resultado, y verificarlo mediante la ecuación (3.1). En otras palabras, la solución al problema sólo es posible a través de un método numérico.

Ejemplo:

1) Si $f(x) = \frac{1}{1 + e^x sen^2(x)}$ y usando (3.2) entonces no sería factible una solución analítica, pues no se conoce una integral explícita y sólo se puede resolver mediante integral numérica.

Cuando f depende explícitamente de y, como en ecuación (3.1), puede pensarse que el primer problema desaparece, pues al sumar una constante a y, se cambia f(x, y), sin cambiar y'. Sin embargo, al analizar el caso, hay precisamente el mismo nivel de arbitrariedad que el ya planteado, lo que puede resolverse fijando otra vez el valor de $y(x_0)=y_0$ como condición.

Por otra parte, es de esperarse que el segundo problema se vuelva aún más difícil cuando y aparece explícitamente en f. ¡Aún no se conoce el integrando en ecuación (3.3) antes de encontrar la solución!

A pesar de estos inconvenientes, desde el punto analítico es preciso diferenciar algunos conceptos.

Definición 5: Solución General. Sea $\varphi(x)$ una función continua en un intervalo I con m constantes arbitrarias $c_i \in \mathbb{R}$, para i = 0, 1, 2, ..., m. La función $\varphi(x, c_1, ..., c_n)$ es una solución general de la ecuación diferencial $F(x, y, y', ..., y^{(n)}) = 0$ en I, si esta última, se satisface cuando y y sus derivadas son reemplazadas por $\varphi(x, c_1, ..., c_n)$ y sus correspondientes derivadas.

Ejemplo:

Sea la ecuación diferencial $F(x, y, y') = (y')^2 - xy' + y = 0$.

La solución general de la ecuación diferencial está dada por $y(x)=cx-c^2$. Aunque esta expresión no abarque a la solución $y(x)=\frac{x^2}{4}$.

Definición 6: Solución Particular. Se llama solución particular de una ecuación diferencial a cada una de las soluciones que forman parte de su solución general, y que se obtendrán dando valores particulares a las constantes arbitrarias o parámetros que contiene la solución general.

Ejemplo:

Sea la ecuación diferencial $F(x, y, y') = (y')^2 - xy' + y = 0$, con solución general $y(x) = cx - c^2$. Una solución particular se obtiene fijando, arbitrariamente, un valor para c, por ejemplo, sea c = 2. Entonces la solución particular será:

$$y(x) = 2x - 4 = 2(x-2)$$

Verificando la solución particular en la ecuación diferencial:

Si y = 2x - 4, entonces y' = 2. Luego

$$F(x, y, y') = (y')^2 - xy' + y = 2^2 - 2x + 2x - 4 = 4 - 2x + 2x - 4 = 0$$

Definición 7: Soluciones Singulares. Las soluciones, si las hay, que no están incluidas en la solución general se las denominan soluciones singulares.

Ejemplo:

Sea la ecuación diferencial $F(x, y, y') = (y')^2 - xy' + y = 0$, con solución general $y(x) = cx - c^2$. Pues la expresión $y(x) = \frac{x^2}{4}$ no es la forma de la solución general por lo que no está incluida en ella. Sin embargo $y(x) = \frac{x^2}{4}$ verifica la ecuación diferencial. Esto

Sea $y(x) = \frac{x^2}{4}$ e $y' = \frac{x}{2}$. Reemplazando y e y' en la ecuación diferencial se tiene:

$$F(x, y, y') = (y')^2 - xy' + y = \left(\frac{x}{2}\right)^2 - x \cdot \frac{x}{2} + \frac{x^2}{4} = \frac{x^2}{4} - \frac{x^2}{2} + \frac{x^2}{4} = 2 \cdot \frac{x^2}{4} - \frac{x^2}{2} = \frac{x^2}{2} - \frac{x^2}{2} = 0$$

Así, se muestra que $y(x) = \frac{x^2}{4}$ es una solución de F(x, y, y') = 0, sin embargo, no forma parte de la solución general, por lo que ésta es una solución singular.

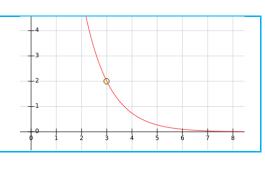
Definición 8: Curva Solución. Como toda solución de una ecuación diferencial es una función de la variable independiente y de constantes arbitrarias, entonces se llama curva solución a la curva graficada en el plano de una solución particular.

Ejemplo:

Sea el problema y' + y = 0. La solución general es $y(x) = C e^{-x}$ con la condición y(3) = 2.

La solución particular es $y(x) = 2e^3 e^{-x}$

La curva solución es la gráfica de $y(x) = 2 e^{3-x}$



En general, dada una ecuación diferencial ordinaria de la forma (3.1) no siempre es posible encontrar una solución a través del desarrollo analítico de (3.2). Es por ello que en estos casos se recurre a la obtención de resultados aproximados obtenidos mediante la aplicación de algún método numérico.

Definición 9. Solución Numérica. Dada una EDO definida en un intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ con sus respectivas condiciones. Entonces se denomina solución numérica de la ecuación diferencial, a un conjunto de valores aproximados $\{(x_n, \hat{y}_n)\}_{n=0}^m$ donde $\hat{y} = \hat{y}(x)$ es una solución aproximada del problema, estimados dentro del intervalo de definición, sobre puntos discretos igualmente espaciados resultantes de la aplicación de algún método numérico.

Definición 8: Una ecuación $y^{(n)} = f(x, y, y', y'', ..., y^{(n-1)})$ junto a las condiciones tales como

$$y(x_0) = c_0$$

 $y'(x_0) = c_1$
 $y''(x_0) = c_2$
...
 $y^{(n-1)}(x_0) = c_{n-1}$

donde $c_0, c_1, c_2, ..., c_{n-1}$ son constantes se llama problema de valores iniciales (PVI), y consiste en hallar una solución particular del problema sujeta a una o varias condiciones que se le impone a la función de variables dependiente y(x) en algún intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ de definición y existencia del problema.

Ejemplo:

$$y'''(x) + 6 [y(x)]^4 = 0$$

$$y(1) = -1$$

$$y'(1) = -1$$

$$y''(1) = -2$$

El problema indica que la curva solución y = f(x) debe pasar por el punto (1, -1); que la derivada 1ra. y' debe pasar por el punto (1, -1); y que la derivada 2da y' debe pasar por (1, -2).

3. Teorema de Existencia y Unicidad

Sea una ecuación diferencial y' = f(x, y), y D una región rectangular definida por $|x - x_0| \le a$; $|y - y_0| \le b$ con centro en (x_0, y_0) . Si f(x, y) y $\frac{\partial f}{\partial y}$ son continua en cada punto de D, entonces existe un intervalo $|x - x_0| \le h$ y una función $\varphi(x)$ continua y diferenciable tal que:

- 1) $y = \varphi(x)$ es solución de la ecuación diferencial f(x, y) en $|x x_0| \le h$ con $h \le a$
- 2) en $|x-x_0| \le h$ se cumple $|\varphi(x)-y_0| \le b$
- 3) $\varphi(x_0) = y_0$
- 4) $\varphi(x)$ es única.

Básicamente, el teorema expresa que es condición suficiente que f(x, y) y $\frac{\partial f}{\partial y}$ sean continua en cada punto de D para exista una solución única al PVI de la ecuación diferencial ordinaria de primer orden.

Como f(x, y) y $\frac{\partial f}{\partial y}$ con continuas en D, si (x_1, y_1) y (x_2, y_2) son puntos internos de

D, por $Teorema\ del\ Valor\ Medio$, existe y^* entre y_1 e y_2 tal que:

$$f(x_1, y_1) - f(x_2, y_2) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, y^*) \cdot (y_1 - y_2)$$

Como $\frac{\partial f}{\partial y}$ es continua en D, está acotada en D, es decir: existe un L>0 tal que

$$\left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \le L$$
 en todo punto de la región D

Entonces $|f(x_1, y_1) - f(x_2, y_2)| = \left| \frac{\partial f}{\partial y}(x, y^*) \right| \cdot |y_1 - y_2| \le L |y_1 - y_2|$. Esta expresión se la conoce como la <u>Condición de Lipschitz</u> para f(x, y); y la constante L se obtiene como $L = \max_{\forall (x,y) \in D} \left| \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} \right|.$

Ejemplo:

1) Sea el PVI
$$\begin{cases} y' = y \cdot \cos(x) \\ y(0) = 1 \end{cases}$$
 definida en $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \le x \le 2, -\infty < y < \infty\}.$

La constante de Lipschitz se obtiene como $L = \max_{\forall (x,y) \in D} \left| \frac{\partial [y \cdot \cos(x)]}{\partial y} \right| = 1$. Así, dada las condiciones suficientes de existencia y unicidad, entonces para el PVI existe una solución $y(x) = e^{sen(x)}$ que es única.

2) Sea el PVI
$$\begin{cases} y' = \sqrt{|y|} \\ y(0) = 0 \end{cases}$$
 definida en $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \le x \le 2, -\infty < y < \infty \}.$

Como
$$\left| \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} \right| = \frac{1}{2\sqrt{|y|}}$$
 lo que muestra que no está acotada, entonces no existe

una constante L tal que se cumpla la Condición de Lipschitz. De hecho que $y_1(x)=0$ e $y_2(x)=\frac{x^2}{4} \ \forall x \in [0,\,2]$ son soluciones, con los que no se verifica la unicidad.

4. Métodos Numéricos

A menudo, existen problemas prácticos que conducen a ecuaciones diferenciales que no pueden resolverse mediante los procedimientos expuestos anteriormente o también a ecuaciones cuyas soluciones vienen expresadas en términos tan complicados que, con frecuencia, es preferible obtener una tabla de valores aproximados de la solución en los puntos de un determinado intervalo.

Si suponemos que existe una solución de una ecuación diferencial dada, entonces aquélla representa un lugar geométrico (curva) en el plano. En esta sección estudiaremos procedimientos numéricos que utilizan la ecuación diferencial para obtener una sucesión de puntos cuyas coordenadas aproximan las coordenadas de los puntos de la curva que efectivamente es la solución.

Dado un problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$
 (4.1)

se trata de obtener aproximadamente los valores de la solución, si existe, en un conjunto de puntos del intervalo [a, b] de interés, entre los cuales ha de estar el punto $x = x_0$. Para ello, se fija un h > 0 y se obtiene un conjunto de puntos $\{x_0, x_1, ..., x_n\} \subset [a, b]$, de la forma

$$x_0 = a$$
, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, $x_3 = x_0 + 3h$, ..., $x_n = x_0 + nh$

para los que se calcularán los valores aproximados de la solución $y_1, y_2, ..., y_n$ de la ecuación diferencial, con la condición $y(x_0) = y_0$. A la longitud h de cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ se le llama paso.

Una forma general de efectuar el cálculo de los valores aproximados de la solución en cada paso es mediante el uso de polinomios de Taylor

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \dots + \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(x) + O(h^{k+1})$$
 (4.2)

teniendo en cuenta que si el valor de h es pequeño, las potencias más altas h^2 , h^3 , ... son muy pequeñas. Veamos algunos casos particulares.

4.1 Método de Euler

El **método de Euler** o *método de las tangentes* es una de las técnicas más simples. Consiste en considerar la aproximación

$$y(x+h) = y(x) + h y'(x) + O(h^2) = y(x) + h f(x, y) + O(h^2)$$

Por lo tanto, la secuencia de aproximaciones se obtendrá a partir de la aplicación de

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

Así, teniendo en cuenta el problema (4.1) y definiendo un intervalo [a, b], h=(b-a)/n con $x_0=a$ y $x_i=x_0+i$ h se tendrá:

X_i	$\widehat{\mathcal{Y}}_i$
$x_0 = a$	y_{θ}
x_1	$y_1 = y_0 + h f(x_0, y_0)$
x_2	$y_2 = y_1 + h f(x_1, y_1)$
:	:
$x_n = b$	$y_n = y_{n-1} + h f(x_{n-1}, y_{n-1})$

El método de Euler no es lo suficientemente exacto para justificar su uso en la práctica. Se trata de un método de primer orden ya que sólo se consideran en la aproximación los términos constantes y el término que contiene a la primera potencia de h. La omisión de los demás términos produce un error denominado error de truncamiento del método.

Como el proceso es iterativo y el valor aproximado y_i se basa en el anterior y_{i-1} , al error cometido en un paso se le llama error de truncamiento por paso o error de truncamiento local que en el método de Euler sería del orden de h^2 . Estos errores locales se van acumulando a medida que se opera en los subintervalos sucesivos, generando el error de truncamiento global. Además, existen también los errores de redondeo que afectan a la exactitud de los valores que se van obteniendo.

Ejemplo:

Sea el problema de valor inicial con h = 0.1 en el intervalo [0, 1].

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$
 (E4.1.1)

La aplicación numérica sería:

$$y_0 = 1$$

 $y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$ (E4.1.2)

X_{n+1}	$\widehat{\mathcal{Y}}_{n+1}$	y_i (sol. Exacta)
0,0	1,000000	1,000000
0,1	1,100000	1,105171
0,2	1,210000	1,221403
0,3	1,331000	1,349859
0,4	1,464100	1,491825

0,5	1,610510	1,648721
0,6	1,771561	1,822119
0,7	1.948717	2,013753
0,8	2,143589	2,225541
0,9	2,357948	2,459603
1,0	2,593742	2,718282

4.2 Método de Euler Mejorado

Veremos a continuación una variante del Método de Euler, llamado habitualmente Método de Euler Modificado. Se trata de un método más preciso que el de Euler.

Teniendo en cuenta el problema (4.1) y lo descripto en la sección 3, y en particular la expresión 3.3, la idea fundamental del método modificado es usar el método de los trapecios para integrar la ecuación y' = f(x, y). Tomando como base el sub-intervalo $[x_n, x_{n+1}]$:

$$y(x) = y_n + h \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \approx y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})]$$
 (4.2.1)

El inconveniente que se plantea es cómo calcular y_{n+1} . Hay varias alternativas. Es más usado es obtener su valor aproximado mediante el Método de Euler, es decir:

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

Luego, reemplazando en (4.2.1) se tiene

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

Es un método de segundo orden porque el error por truncamiento por paso es de orden h^3 .

4.3 Métodos de Taylor

El método más sencillo de un paso es el método de Euler, que a su vez es fácilmente programable, pero tiene el inconveniente de que al ser los errores de discretización global (EG) del orden de h, para conseguir que sean pequeños hay que tomar pasos pequeños, con lo que el costo computacional se hace mayor, a la vez que los errores de redondeo aumentan. Interesa pues, buscar métodos que den EG pequeños con un costo computacional razonable. Entonces, se hace necesario considerar métodos de orden p >

1. Teniendo en cuenta el desarrollo de la serie de Taylor en (4.2), una posibilidad es obtener expresiones de aproximación para un orden p.

Así, se tiene

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \dots + \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(x) + O(h^{k+1})$$

$$\approx y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y_n) + \frac{h^3}{3!}f''(x_n, y_n) + \dots + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}f^{(p)}(x_n, y_n) + O(h^{p+2})$$

Teniendo en cuenta la última expresión, se plantea un inconveniente, se conoce y' = f(x, y) pero no las derivadas sucesivas y'', y''', La es expresar todo en función de expresiones conocidas, así se tiene:

$$y' = f(x, y) = \frac{\delta y}{\delta x} = f$$

$$y'' = f' = \frac{\delta f}{\delta x} + \frac{\delta f}{\delta y} \frac{dy}{dx} = f_x + f_y f$$

$$y''' = f'' = f_{xx} + f_{xy} f + (f_{yx} + f_{yy} f) f + (f_x + f_y f) f_y$$

$$= f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_x f_y + f_y^2 f$$

$$\vdots$$

Por lo tanto, si prescindimos del resto en la expresión (término de orden superior) del desarrollo de Taylor anterior, obtenemos el método numérico de un paso

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} f^{(1)}(x_n, y_n) + \dots + \frac{h^p}{p!} f^{(p-1)}(x_n, y_n)$$

El método tiene un error local es de orden p, y se conoce como $M\acute{e}todo$ de Taylor de orden p. Para el caso p=1 se reduce al método de Euler.

Ejemplo:

Aplicar el método de Taylor de tercer orden para aproximar numéricamente el siguiente PVI con h=0.1 en el intervalo [0, 1].

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$
 (E4.3.1)

La aplicación numérica sería:

$$y_0 = 1$$

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} f'(x_n, y_n) + \frac{h^3}{3!} f''(x_n, y_n)$$
(E4.3.2)

Como $f(x, y) = y \Rightarrow f'(x, y) = f_x + f_y$ $f = 0 + 1 \cdot y = y$. También f''(x, y) = y

Luego, la expresión (E4.3.2) queda

$$y_0 = 1$$

$$y_{n+1} = y_n + h y_n + \frac{h^2}{2} y_n + \frac{h^3}{6} y_n$$
 para $n = 0, 1, 2, \dots, 10$

Simplificando, se tiene

$$y_0 = 1$$

$$y_{n+1} = (1 + h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{6})y_n$$
 para $n = 0, 1, 2, \dots, 10$

Analizando la secuencia se tiene que

$$y_{1} = (1 + h + \frac{h^{2}}{2} + \frac{h^{3}}{6}) \cdot 1$$

$$y_{2} = (1 + h + \frac{h^{2}}{2} + \frac{h^{3}}{6}) \cdot (1 + h + \frac{h^{2}}{2} + \frac{h^{3}}{6}) = \left(1 + h + \frac{h^{2}}{2} + \frac{h^{3}}{6}\right)^{2}$$

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

$$\vdots$$

$$y_{n+1} = \left(1 + h + \frac{h^{2}}{2} + \frac{h^{3}}{6}\right)^{n+1}$$
(E4.3.3)

La solución exacta al problema (E4.3.1) es $y(x) = e^x$. La aproximación \hat{y}_{n+1} está dada por (E4.3.3). Así, la tabla de comparación es:

X_{n+1}	\widehat{y}_{n+1}	y_i (sol. Exacta)
0,0	1,000000	1,000000
0,1	1,105167	1,105171
0,2	1,221393	1,221403
0,3	1,349843	1,349859
0,4	1,491802	1,491825
0,5	1,648690	1,648721
0,6	1,822077	1,822119
0,7	2,013698	2,013753
0,8	2,225472	$2,\!225541$
0,9	2,459518	2,459603
1,0	2,718177	2,718282

4.4 Método de Runge-Kutta

Un método aún más exacto que el anterior es el método de Runge–Kutta de cuarto orden (hay métodos de Runge-Kutta de varios órdenes). Este método calcula en cada paso cuatro cantidades auxiliares y luego se calcula el nuevo valor

$$y_{n+1} = y_n + a k_1 + b k_2 + c k_3 + d k_4$$

Estas constantes k_1 , k_2 , k_3 , k_4 se calculan de manera que el desarrollo anterior coincida con el polinomio de Taylor de cuarto orden. Luego de algunos desarrollos algebraicos se tiene:

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

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

$$k_{3} = h f(x_{n} + \frac{1}{2}h, y_{n} + \frac{1}{2}k_{2})$$

$$k_{4} = h f(x_{n} + h, y_{n} + k_{3})$$

$$y_{n+1} = y_{n} + \frac{1}{6}(k_{1} + 2k_{2} + 2k_{3} + k_{4})$$

$$x_{n+1} = x_{n} + h = x_{0} + n h$$

$$(4.4.1)$$

De esta manera se garantizar que el error local sea proporcional a h^5 (es decir garantizando exactitud en el cuarto orden en el polinomio de Taylor), lo cual lleva a un error global proporcional a h^4 .

Ejemplo: Sea el PVI (E4.3.1)
$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$
 con $h = 0.1$ en el intervalo $[0, 1]$.

Usando la expresión (4.4.1), forma la tabla de comparación, esto es:

X_{n+1}	$\widehat{\mathcal{Y}}_{n+1}$	y_i (sol. Exacta)	(E4.4.1)
0,0	1,000000	1,000000	
0,1	1.10517083	1,10517109	
0,2	1.22140257	1,22140276	
0,3	1.34985850	1,34985881	
0,4	1.49182424	1,49182470	
0,5	1.64872064	1,64872127	
0,6	1.82211796	1,82211880	
0,7	2.01375163	2,01375271	
0,8	2.22553956	2,22554093	
0,9	2.45960141	2,45960311	
1,0	2.71827974	2,71828183	

4.5 Métodos Multipasos

El algoritmo de Taylor de orden k y los métodos de Runge-Kutta requieren información sobre la solución en un solo punto $x = x_n$, a partir del cual los métodos proceden a obtener el valor de y en el punto siguiente $x = x_{n+1}$. Los métodos multipaso hacen uso de la información acerca de la solución de más de un punto (varios puntos).

Fórmulas Abiertas de Adams-Bashforth

Básicamente se trata de integrar un polinomio $P_m(x)$ que aproxime a f(x, y) en m+1 puntos igualmente espaciados $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, ..., x_{n-m}$. Es decir, se tiene el problema de valores iniciales

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \rightarrow \int_{y_n}^{y_{n+1}} dy = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \rightarrow y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

Luego, lo que se busca es resolver
$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_m(x) dx$$
 (4.5.1)

Adoptando la notación $f(x_k, y(x_k)) = f_k$ se puede usar la fórmula regresiva de Newton de grado m para deducir una expresión de $P_m(x)$. Esto es

$$P_{m}(x) = \sum_{k=0}^{m} (-1)^{k} {\binom{-s}{k}} \Delta^{k} f_{n-k} \quad \text{con} \quad s = \frac{x - x_{n}}{h}$$
 (4.5.2)

Reemplazando (4.5.2) en (4.5.1) y observando que dx = h ds, se tiene

$$y_{n+1} = y_n + h \int_0^1 \sum_{k=0}^m (-1)^k {-s \choose k} \Delta^k f_{n-k} ds$$

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\alpha_0 f_n + \alpha_1 \Delta f_{n-1} + \alpha_2 \Delta^2 f_{n-2} + \dots + \alpha_m \Delta^m f_{n-m}\right)$$
(4.5.3)

donde

$$\alpha_k = (-1)^k \int_0^1 {-s \choose k} ds$$
 para $k = 0, 1, 2, \dots, m$

La expresión (4.5.3) es conocida como fórmula explícita de Adams – Bashforth.

El error local cometido en cada paso de la aplicación de (4.5.3) está dada por $E=\alpha_{_{m+1}}\ h^{m+2}\ y^{(m+2)}(\xi)$

Expresiones Particulares de Adams-Bashforth

Sea m=3. Luego la expresión particular de (4.5.3) es

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\alpha_0 f_n + \alpha_1 \Delta f_{n-1} + \alpha_2 \Delta^2 f_{n-2} + \alpha_3 \Delta^3 f_{n-3}\right)$$
(4.5.4)

Resolviendo

$$\alpha_0 = (-1)^0 \int_0^1 {-s \choose 0} ds = \int_0^1 (-1)^0 ds = s \Big|_0^1 = 1$$

$$\alpha_1 = (-1)^1 \int_0^1 {-s \choose 1} ds = (-1) \int_0^1 (-1)^1 s \, ds = \frac{s^2}{2} \Big|_0^1 = \frac{1}{2}$$

$$\alpha_2 = (-1)^2 \int_0^1 {-s \choose 2} ds = \int_0^1 \frac{(-1)^2 s(s+1)}{2} ds = \frac{1}{2} \left[\frac{s^3}{3} + \frac{s^2}{2} \right]_0^1 = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{2} \right] = \frac{5}{12}$$

$$\alpha_3 = (-1)^3 \int_0^1 {-s \choose 3} ds = (-1) \int_0^1 \frac{(-1)^3 s(s+1)(s+2)}{6} ds = \frac{1}{6} \cdot \frac{9}{4} = \frac{3}{8}$$

Con los coeficientes calculados y sustituidos en (4.5.4) se tiene

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f_n + \frac{1}{2} \Delta f_{n-1} + \frac{5}{12} \Delta^2 f_{n-2} + \frac{3}{8} \Delta^3 f_{n-3} \right)$$
 (4.5.5)

En la práctica, es más conveniente desde el punto de vista computacional trabajar con ordenadas en lugar de diferencias. A partir de la definición del operador de diferencia progresiva Δ se tiene que

$$x_{n-3}$$
 f_{n-3}

$$\Delta f_{n-3}$$

$$x_{n-2}$$
 f_{n-2} $\Delta^2 f_{n-3}$ $\Delta f_{n-1} = f_n - f_{n-1}$

$$\Delta f_{n-2}$$
 $\Delta^3 f_{n-3}$ \Rightarrow $\Delta^2 f_{n-2} = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}$

$$x_{n-1}$$
 f_{n-1} $\Delta^2 f_{n-2}$ $\Delta^3 f_{n-3} = f_n - 3f_{n-1} + 3f_{n-2} - f_{n-3}$

$$\Delta f_{n-1}$$

$$x_n$$
 f_n

Reemplazando las diferencias de órdenes 1, 2, y 3 en (4.5.5) y simplificando, se tiene

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$$
(4.5.6)

La expresión (4.5.6) es la fórmula explícita de Adams-Bashforth de orden 4.

El error de discretización local es

$$E_{d} = \alpha_{4} h^{5} y^{(5)}(\xi) = (-1)^{4} \int_{0}^{1} {-s \choose 4} ds h^{5} y^{(5)}(\xi) = \frac{251}{720} h^{5} y^{(5)}(\xi)$$

Para usar (4.5.6) se debe tener cuatro valores iniciales. Estos valores iniciales deben obtenerse de alguna fuente independiente.

Ejemplo: Sea el PVI (E4.3.1)
$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$
 con $h = 0.1$ en el intervalo $[0, 1]$.

Usando por valores iniciales los cuatro primeros calculados por RK4 del ejemplo (E4.4.1) y la expresión (4.5.6), se forma la siguiente tabla de comparación:

X_{n+1}	$\widehat{\mathcal{Y}}_{n+1}$	y_i (sol. Exacta)
0,0	1,000000	1,000000
0,1	1.10517083	1,10517109
0,2	1.22140257	1,22140276
0,3	1.34985850	1,34985881
0,4	1.49182011	1,49182470
0,5	1.64871099	1,64872127
0,6	1.82210207	1,82211880
0,7	2.01372825	2,01375271
0,8	2.22550724	2,22554093
0,9	2.45955853	2,45960311
1,0	2.71822444	2,71828183

Fórmulas Cerradas de Adams-Moulton

Los métodos multipasos que dan lugar a las fórmulas abiertas usan polinomios que interpolan en el punto x_n y en algunos anteriores a éste. Las fórmulas cerradas usan polinomios que interpolan en el punto x_{n+1} , x_n y en puntos anteriores a x_n . Dada que las expresiones de integración quedan en función y_{n+1} , las fórmulas cerradas son conocidas también como fórmulas implícitas. Cuando se usan ambas fórmulas simultáneamente, la fórmula de tipo abierto se llama predictora, y la fórmula de tipo cerrado se llama correctora. Una fórmula correctora es generalmente más precisa que una predictora, aun cuando ambas tienen un error de discretización del mismo orden, primeramente porque el coeficiente del término de error es más pequeño.

Se quiere resolver el problema de valores iniciales

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \rightarrow \int_{y_n}^{y_{n+1}} dy = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \rightarrow y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

Para ello, se busca resolver

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_{m+1}(x) \ dx \tag{4.5.7}$$

donde $P_{m+1}(x)$ es el polinomio que aproxima a f(x, y) en los puntos $x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, ..., x_{n-m}$ para un entero m>0.

Teniendo en cuenta la fórmula regresiva de Newton, el polinomio que interpola los m+2 puntos igualmente espaciados en términos de $s = (x - x_0)/h$ es

$$P_{m+1}(s) = \sum_{k=0}^{m+1} (-1)^k {1-s \choose k} \Delta^k f_{n+1-k}$$
(4.5.8)

Dado que dx = h ds y reemplazando (4.5.8) en (4.5.7) se tiene

$$y_{n+1} = y_n + h \int_0^1 \sum_{k=0}^{m+1} (-1)^k {1-s \choose k} \Delta^k f_{n+1-k} ds$$
$$= y_n + h \sum_{k=0}^{m+1} \int_0^1 (-1)^k {1-s \choose k} ds \Delta^k f_{n+1-k}$$

Luego

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\beta_0 f_{n+1} + \beta_1 \Delta f_n + \beta_2 \Delta^2 f_{n-1} + \dots + \beta_{m+1} \Delta^{m+1} f_{n-m}\right)$$
(4.5.9)

donde

$$\beta_k = (-1)^k \int_0^1 {1-s \choose k} ds \qquad \forall k = 0, 1, \dots, m+1$$

El error de (4.5.9) basado en el error del polinomio interpolante es

$$E = \beta_{m+2} \ h^{m+3} \ y^{(m+3)}(\xi) \tag{4.5.10}$$

La expresión (4.5.9) es conocida como fórmula implícita de Adams – Moulton.

Expresiones Particulares de Adams–Moulton

Sea m=2. Luego la expresión particular de (4.5.9) es

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\beta_0 f_{n+1} + \beta_1 \Delta f_n + \beta_2 \Delta^2 f_{n-1} + \beta_3 \Delta^3 f_{n-2}\right)$$
(4.5.11)

Luego,

$$\beta_0 = (-1)^0 \int_0^1 {1-s \choose 0} ds = \int_0^1 ds = s \Big|_0^1$$

$$\beta_1 = (-1)^1 \int_0^1 {1-s \choose 1} ds = -\int_0^1 (1-s) ds = s - \frac{s^2}{2} \Big|_0^1 = -\frac{1}{2}$$

$$\beta_2 = (-1)^2 \int_0^1 {1-s \choose 2} ds = \frac{1}{2} \int_0^1 (s^2 - s) ds = \frac{1}{2} \left(\frac{s^3}{3} - \frac{s^2}{2} \right) \Big|_0^1 \right) = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{6} \right) = -\frac{1}{12}$$

$$\beta_3 = (-1)^3 \int_0^1 {1-s \choose 3} ds = -\frac{1}{6} \int_0^1 (-s^3 + s) ds = \left(-\frac{1}{6}\right) \cdot \frac{1}{4} = -\frac{1}{24}$$

Reemplazando los β_i con i = 0, 1, 2, 3 en (4.5.11), se tiene:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(f_{n+1} - \frac{1}{2} \Delta f_n - \frac{1}{12} \Delta^2 f_{n-1} - \frac{1}{24} \Delta^3 f_{n-2} \right)$$
 (4.5.12)

Por otro lado, las diferencias se obtienen como

De esta manera, haciendo los reemplazos correspondientes en (4.5.12), y simplificando la expresión resultante, se obtiene:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$
(4.5.13)

Tiendo en cuenta que m=2, el error se obtiene a partir de (4.5.10), esto es

$$E = \beta_{m+2} h^{m+3} y^{(m+3)}(\xi) \rightarrow \beta_4 h^5 y^{(5)}(\xi) = (-1)^4 \int_0^1 \binom{1-s}{4} ds = \boxed{-\frac{19}{720} h^5 y^{(5)}(\xi)}$$

La expresión (4.5.13) con el error local correspondiente es fórmulas de Adams-Moulton de 4to orden.