

Capítulo 8

Ecuaciones diferenciales ordinarias

8.1. Introducción

Una ecuación diferencial ordinaria de orden n de una función $y(x)$ es una ecuación de la forma

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

donde F es una función de la que se requiere que sea continua y derivable. Si es posible, se despeja la derivada de orden más alto y se expresa de la forma

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad (8.1)$$

El problema puede ser extremadamente complejo en el caso general. En lo que sigue, vamos a considerar esencialmente ecuaciones diferenciales de primer orden

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

y sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. Aunque parezca un problema excesivamente restringido, es suficientemente general para resolver la mayor parte de los problemas que se presentan en el ámbito científico y técnico. De hecho, cualquier ecuación diferencial de orden n , expresada en la forma de la Ec. 8.1, se puede reducir a un sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden. Para ello, hacemos el siguiente cambio de variables:

$$y_1 = y, \quad y_2 = y', \quad \dots, \quad y_n = y^{(n-1)}$$

con lo que obtenemos el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned}
\frac{dy_1(x)}{dx} &= y_2(x) \\
\frac{dy_2(x)}{dx} &= y_3(x) \\
\frac{dy_3(x)}{dx} &= y_4(x) \\
&\vdots \\
\frac{dy_n(x)}{dx} &= f(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x))
\end{aligned} \tag{8.2}$$

Utilizaremos este procedimiento para resolver las ecuaciones diferenciales de segundo orden que aparecen usualmente en los problemas dinámicos de la Física.

En este capítulo, vamos a considerar únicamente problemas en los que se especifican condiciones de contorno iniciales, es decir, damos un punto inicial x_0 y los valores de la función $y(x)$ y sus $n - 1$ primeras derivadas en dicho punto, que denotamos por $y_0, y'_0, \dots, y_0^{(n-1)}$, y deseamos obtener $y(x)$ a partir de x_0 , sea en sentido positivo o negativo. Obtendremos la solución y y sus derivadas en una red de N puntos, $y_k = y_0 + k * h$, $k = 0, 1, \dots, N$, donde h es el paso de integración, que se elige de acuerdo con la precisión requerida. Los diferentes métodos de integración se caracterizan por un término de error de la forma $O(h^m)$ y por el número de operaciones necesarias para realizar un paso de integración. Para un determinado método de integración, la precisión aumenta cuando h disminuye. En general, desearemos obtener la solución $y(x)$ en un intervalo $[x_0, x_f]$, con una precisión requerida, que determinará el paso de integración h que deberemos emplear, con lo que el número de puntos de la red vendrá dado por $N = \frac{x_f - x_0}{h} + 1$. Vamos a considerar en lo que sigue la solución de una ecuación diferencial de primer orden,

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

y discutiremos algunos ejemplos en los que se resuelven ecuaciones de orden superior reduciéndolas a sistemas de primer orden.

8.2. Métodos tradicionales de resolución de las ecuaciones de la dinámica

Desde que Newton creó su teoría de la dinámica, ha existido un gran interés en la resolución numérica de estas ecuaciones, principalmente aplicada a problemas de Astronomía. Las ecuaciones de Newton se planteaban como un sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden para los vectores velocidad \mathbf{v} y posición \mathbf{r} :

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} &= \mathbf{v}(t) \\
\frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} &= \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{m}
\end{aligned}$$

La resolución de estas ecuaciones diferenciales se llevaba a cabo reemplazando las derivadas por cocientes incrementales (diferencias finitas), con un paso temporal $\Delta t = \tau$ conveniente de forma que la solución numérica se obtenga con la resolución requerida. Las formas usuales empleadas eran las diferencias hacia adelante

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{f(t+\tau) - f(t)}{\tau} - \frac{1}{2}\tau f''(t) + O(\tau^2)$$

las diferencias hacia atrás

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{f(t) - f(t-\tau)}{\tau} + \frac{1}{2}\tau f''(t) + O(\tau^2)$$

y las diferencias centrales de primer y segundo orden

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{f(t+\tau) - f(t-\tau)}{2\tau} - \frac{1}{6}\tau^2 f'''(t) + O(\tau^3)$$

$$\frac{d^2f(t)}{dt^2} = \frac{f(t+\tau) - 2f(t) + f(t-\tau)}{\tau^2} - \frac{1}{12}\tau^2 f^{(4)}(t) + O(\tau^3)$$

Estas fórmulas se obtienen directamente de los desarrollos en serie de Taylor

$$\begin{aligned} f(t+\tau) &= f(t) + \tau f'(t) + \frac{1}{2}\tau^2 f''(t) + \frac{1}{6}\tau^3 f'''(t) + \frac{1}{24}\tau^4 f^{(4)}(t) + O(\tau^5) \\ f(t-\tau) &= f(t) - \tau f'(t) + \frac{1}{2}\tau^2 f''(t) - \frac{1}{6}\tau^3 f'''(t) + \frac{1}{24}\tau^4 f^{(4)}(t) + O(\tau^5) \end{aligned}$$

sumando y restando ambas expresiones. Vamos a exponer los métodos clásicos más populares.

8.2.1. Método de Euler

Consiste en reemplazar las derivadas por las diferencias hacia adelante, con lo que se obtiene la regla de integración

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t+\tau) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\tau \\ \mathbf{v}(t+\tau) &= \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m}\tau \end{aligned}$$

que nos permite encontrar los valores de la posición y la velocidad en una malla temporal de paso de integración τ . Este método es estable si τ es suficientemente pequeño, y permite obtener la solución con la precisión requerida. El método de Euler es un ejemplo de método de un paso, denominado así porque los valores de \mathbf{r} y \mathbf{v} en $t+\tau$ dependen sólo de los valores en t . El error va con τ^2 por lo que requiere pasos de integración muy pequeños para obtener precisiones numéricas comparables a los errores observacionales. Por esta razón se idearon métodos que converjan más rápidamente.

8.2.2. Método de Euler-Cromer

Este método es similar al anterior excepto que la velocidad en la primera ecuación se toma en el punto final

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \tau) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t + \tau)\tau \\ \mathbf{v}(t + \tau) &= \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m}\tau\end{aligned}$$

El método de Euler-Cromer es mucho más estable que el método de Euler, esencialmente en problemas de órbitas y oscilatorios, pero desde el punto de vista de precisión numérica es igualmente pobre.

8.2.3. Método de Euler modificado

En este método, también conocido como método del punto medio, se toma la velocidad de la ecuación para \mathbf{r} como el promedio de las velocidades iniciales y finales, es decir es el promedio de los métodos de Euler y Euler-Cromer:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \tau) &= \mathbf{r}(t) + \frac{\mathbf{v}(t) + \mathbf{v}(t + \tau)}{2}\tau \\ \mathbf{v}(t + \tau) &= \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m}\tau\end{aligned}$$

Cuando la segunda ecuación se introduce en la primera obtenemos

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\tau + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{2m}\tau^2$$

que es la integral exacta cuando la aceleración es constante. Vemos, por lo tanto, que el error en la velocidad continúa siendo del orden de $O(\tau^2)$ pero el error en la posición es ahora del orden de $O(\tau^3)$.

8.2.4. Método del salto de la rana (leap-frog)

Todos los métodos anteriores implican errores $O(\tau^2)$, por lo que son poco eficientes. Un paso más allá es utilizar diferencias centradas, que dan errores del orden de $O(\tau^3)$. El llamado método del salto de la rana utiliza diferencias centradas tanto en la velocidad como en la posición:

$$\frac{\mathbf{v}(t + \tau) - \mathbf{v}(t - \tau)}{2\tau} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m}$$

que da

$$\mathbf{v}(t + \tau) = \mathbf{v}(t - \tau) + 2\tau \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m}$$

El valor de la velocidad en $t + \tau$ está ligado con la diferencia central de la posición en $t + \tau$

$$\frac{\mathbf{r}(t + 2\tau) - \mathbf{r}(t)}{2\tau} = \mathbf{v}(t + \tau)$$

que nos da

$$\mathbf{r}(t + 2\tau) = \mathbf{r}(t) + 2\tau\mathbf{v}(t + \tau)$$

Tanto el valor de las posiciones como el de las velocidades está determinado con un error $O(\tau^2)$. Vemos que con este método las posiciones se determinan en $t = 0, 2\tau, 4\tau, \dots$ mientras que las velocidades se determinan en $t = \tau, 3\tau, \dots$. Es decir, en el fondo es un método de un paso con $\Delta t = 2\tau$ pero con la malla de posiciones y velocidades intercaladas, de donde viene el nombre del algoritmo. Los valores de las posiciones saltan sobre los de las velocidades. Si empezamos la integración en $t - \tau = 0$, entonces calculamos las velocidades en puntos $t + (2n - 1)\tau$ y las posiciones en $t + 2n\tau$, empezando a partir de $n = 1$. Como las condiciones iniciales sólo están dadas en $t = 0$, necesitamos $\mathbf{v}(-\tau)$ para calcular $\mathbf{v}(\tau)$. Esto se puede realizar con un paso hacia atrás del método de Euler

$$\mathbf{v}(-\tau) = \mathbf{v}(0) - \tau \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(0), \mathbf{v}(0), 0)}{m}$$

El método del salto de la rana se presenta frecuentemente con el nombre del método del paso mitad, reemplazando 2τ por τ :

$$\begin{aligned}\mathbf{v}(t + \tau/2) &= \mathbf{v}(t - \tau/2) + \tau \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m} \\ \mathbf{r}(t + \tau) &= \mathbf{r}(t) + \tau\mathbf{v}(t + \tau/2)\end{aligned}$$

con la condición de comienzo

$$\mathbf{v}(-\tau/2) = \mathbf{v}(0) - \frac{\tau}{2} \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(0), \mathbf{v}(0), 0)}{m}$$

En esta forma resulta evidente que el paso de integración es τ y que las velocidades se calculan en el punto medio del paso de integración.

La necesidad de puntos de comienzo adicionales a las condiciones iniciales es común a los métodos multipaso, con los que el método del salto de la rana (o del paso mitad) comparte este inconveniente.

8.2.5. Método de Verlet

Este método consiste en escribir las ecuaciones dinámicas en la forma

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} &= \mathbf{v}(t) \\ \frac{d^2\mathbf{v}(t)}{dt^2} &= \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t)}{m}\end{aligned}$$

y utilizar derivadas centradas en la resolución de ambas ecuaciones

$$\frac{\mathbf{r}(t+2\tau) - \mathbf{r}(t)}{2\tau} = \mathbf{v}(t+\tau)$$

$$\frac{\mathbf{r}(t+2\tau) - 2\mathbf{r}(t+\tau) + \mathbf{r}(t)}{\tau^2} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t+\tau), \mathbf{v}(t+\tau), t+\tau)}{m}$$

El método determina los valores de la posición a partir de la segunda ecuación, mientras que la primera ecuación se utiliza para determinar las velocidades a partir de las posiciones. Este es un método de dos pasos, ya que la determinación de cada nuevo valor de \mathbf{r} requiere los valores obtenidos en los dos tiempos anteriores. Para la primera iteración de la segunda ecuación hace falta $\mathbf{r}(\tau)$, que se puede calcular a partir de las condiciones iniciales como

$$\mathbf{r}(\tau) = \mathbf{r}(0) + \tau\mathbf{v}(0) + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(0), \mathbf{v}(0), 0)}{2m}\tau^2$$

El método de Verlet se ha empleado tradicionalmente para el cálculo de trayectorias de partículas, ya que no requiere el cálculo de las velocidades si la fuerza no depende de la velocidad. Este es el caso de los problemas de Astronomía. El error del método de Verlet para la posición va como $O(\tau^4)$, mientras que para la velocidad, que sólo se calcula de forma accesorio, va como $O(\tau^2)$.

En lo que sigue, las variables dinámicas se calcularán en un red de tiempos $t_n = t_0 + n\tau$. En esta red, las ecuaciones de Verlet, por ejemplo, se escriben como

$$\mathbf{r}_{n+1} = 2\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1} + \tau^2 \frac{\mathbf{F}_n}{m} + O(\tau^4)$$

$$\mathbf{v}_n = \frac{\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_{n-1}}{2\tau} + O(\tau^2)$$

con

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0\tau + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{F}_0}{m}\tau^2$$

Existen muchas variaciones de estos métodos clásicos, de forma que se mejore la estabilidad o el orden del error. Actualmente, con la existencia de ordenadores potentes a bajo coste y el desarrollo de métodos poderosos con orden de convergencia elevado y la capacidad de estimar el error cometido, estos métodos clásicos están cayendo en desuso, salvo para problemas típicos de libro de texto dirigidos a una audiencia sin conocimientos de Cálculo Numérico. En lo que sigue vamos a estudiar la derivación sistemática de métodos con un error $O(\tau^k)$. Consideraremos la integración en una variable x , que to tiene que coincidir ni con el tiempo ni con la posición, que se incrementa en un paso de integración h .

8.3. Métodos de un paso

De ahora en adelante denominaremos x a la variable independiente e y a la variable dependiente. Sin pérdida de generalidad, consideraremos una sólo ecuación de primer orden. La integración de

$$y' = f(x, y(x))$$

se puede escribir de forma implícita como

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx$$

Como no conocemos la solución $y(x)$, que es el objetivo de nuestro problema, la integral no se puede realizar exactamente y hay que realizarla de forma aproximada, basándose en valores ya calculados de y .

Los denominados métodos de un paso proporcionan y_{n+1} a partir de y_n y x_n . En otras palabras, proporcionan una función G de forma que

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

Existen diversas maneras de construir métodos de un paso. El más pedagógico, aunque no el más utilizado en la práctica, es el método de la serie de Taylor, expuesto a continuación.

8.3.1. Método de la serie de Taylor

Si tenemos la ecuación diferencial

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

podemos expresar $y(x_n + h)$ en función de $y(x_n)$ mediante la serie de Taylor,

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \cdots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(x_n) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}y^{(n+1)}(\xi)$$

Los n primeros términos proporcionan un método de un paso con un error de truncado de orden h^{n+1} . Para poderlo utilizar de forma efectiva necesitamos evaluar las derivadas que aparecen en la expresión. Utilizando la regla de la cadena, obtenemos

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

Si denominamos $f^{(1)}(x, y(x))$ a $y''(x)$, obtenemos análogamente

$$y'''(x) = f_x^{(1)}(x, y(x)) + f_y^{(1)}(x, y(x)) \cdot f(x)$$

Podemos de igual forma denominar $f^{(2)}(x, y(x))$ a $y'''(x)$ y calcular $y^{(4)}(x)$ como

$$y^{(4)}(x) = f_x^{(2)}(x, y(x)) + f_y^{(2)}(x, y(x)) \cdot f(x)$$

con lo que obtendremos en general

$$f^{(k-1)}(x, y(x)) = f_x^{(k-2)}(x, y(x)) + f_y^{(k-2)}(x, y(x)) \cdot f(x)$$

$$y^{(k)}(x) = f^{(k-1)}(x, y(x))$$

Con estas definiciones obtenemos para la serie de Taylor la siguiente expresión:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} f^{(1)}(x_n, y_n) + \cdots + \frac{h^n}{n!} f^{(n-1)}(x_n, y_n) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n)}(\xi, \eta)$$

Reteniendo los $n+1$ primeros términos de la serie de Taylor obtenemos un método de un paso de orden n , es decir obtenemos $y(x_n + h)$ a partir de $y(x_n)$ con un error de truncado que depende de h^{n+1} y potencias superiores de h . El caso más sencillo es cuando nos quedamos con únicamente los dos primeros términos:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n)$$

Este método es el más sencillo imaginable y corresponde al método de Euler método. En general es un método muy impreciso, pero si se utiliza un paso de integración suficientemente pequeño, da la solución de la ecuación diferencial con la precisión deseada. Si el paso de integración es demasiado grande, el método es inestable y la solución numérica diverge de la exacta. Lo utilizaremos para comparar con métodos de orden superior en algunos de los ejemplos ofrecidos posteriormente. Si retenemos dos términos, obtenemos

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n) + \frac{h^2}{2!} (f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) \cdot f(x)) \quad (8.3)$$

que es un método de segundo orden, que proporciona resultados mucho mejores que el método de Euler. Su principal inconveniente es tener que calcular analíticamente las derivadas parciales $f_x(x, y(x))$ y $f_y(x, y(x))$, lo cual es un inconveniente si $f(x)$ es muy complicada y además produce errores significativos si $f(x)$ se conoce sólo de forma empírica, es decir, es una aproximación numérica a datos experimentales o una aproximación a una función mucho más complicada. Estos inconvenientes resultan mucho más importantes cuando derivamos métodos de orden superior a partir de la serie de Taylor. En general, aunque el método de la serie de Taylor tiene un gran valor pedagógico y es útil en la derivación de otros métodos, es raramente una buena elección en la solución de un problema numérico. Sin embargo, cuando el cálculo de las derivadas es sencillo, como en el ejemplo dado a continuación, el método de serie de Taylor es un método estable y eficiente.

Ejemplo 1

Resolver la ecuación diferencial $y' = y$ en orden k mediante el método de serie de Taylor.

Solución: $f(x, y) = y$, $f^{(1)}(x, y) = y$, $f^{(2)}(x, y) = y$, \dots , $f^{(k)}(x, y) = y$. Si truncamos la serie de Taylor en orden k tenemos

$$y(x + h) = y \left(1 + h + \frac{h^2}{2!} + \frac{h^3}{3!} + \cdots + \frac{h^k}{k!} \right)$$

con lo que la integración en n pasos da

$$y_n = y_0 \left(1 + h + \frac{h^2}{2!} + \frac{h^3}{3!} + \cdots + \frac{h^k}{k!} \right)^n$$

que es una aproximación de orden k a $y_n = y_0 e^{nh}$ que es la solución exacta.

8.3.2. Métodos de Runge-Kutta

Los métodos de Runge-Kutta evitan el cálculo analítico de las derivadas que aparece en la serie de Taylor, haciendo la siguiente suposición:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^m \alpha_i k_i \quad (8.4)$$

con $k_1 = f(x_n, y_n)$, $k_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + \mu_i h k_{i-1})$ donde los α_i , μ_i son constantes que se determinan de forma que la anterior expresión coincida con la serie de Taylor hasta el orden p . Hasta $p = 4$, se encuentra que se puede tomar $m = p$, pero para $p > 4$ es necesario que $m > p$ y además

$$k_i = f\left(x_n + \lambda_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ij} k_j\right)$$

es decir μ es una matriz triangular y cada k_i utiliza todos los k_j anteriores.. Para $p = 5$ hay que tomar $m = 6$. En cierta manera, se puede considerar que los métodos de Runge-Kutta aproximan las derivadas de la serie de Taylor por combinaciones lineales de valores de la función f en puntos comprendidos entre (x_n, y_n) y (x_{n+1}, y_{n+1}) . Se pueden considerar como una extensión sofisticada del método del punto medio, tomando una serie de puntos intermedios del intervalo de forma que la integral

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx$$

sea exacta hasta orden h^p . La principal desventaja de estos métodos es que se debe calcular la función f en puntos que no pertenecen a la red de integración (x_n, y_n) . Por otro lado son muchas sus ventajas, entre las que cabe mencionar la posibilidad de cambiar el paso de integración en un momento dado, la estabilidad, la facilidad de programación, y la posibilidad de estimar los errores de truncado en los métodos de Runge-Kutta más sofisticados.

Vamos a considerar en primer lugar los métodos de Runge-Kutta de orden 2, que aunque se utilizan con menos frecuencia que los métodos de orden 4, su exposición es muy pedagógica. Tomamos $m = 2$, que es el mínimo valor que hace falta para que las derivadas coincidan con la serie de Taylor hasta segundo orden. La forma del método de segundo orden es por lo tanto:

$$y_{n+1} = y_n + h(\alpha_1 f(x_n, y_n) + h\alpha_2 f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_2 f(x_n, y_n)h))$$

Desarrollando en serie de Taylor la anterior expresión hasta orden h^2 obtenemos,

$$y_{n+1} = y_n + h\alpha_1 f(x_n, y_n) + h\alpha_2 [f(x_n, y_n) + f_x(x_n, y_n)\lambda_2 h + f_y(x_n, y_n)f(x_n, y_n)\mu_2 h]$$

con lo que, para que la anterior ecuación coincida con la serie de Taylor hasta segundo orden

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}(f_x(x_n, y(x_n)) + f_y(x_n, y(x_n)) \cdot f(x_n))$$

deben de cumplirse las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}\alpha_1 + \alpha_2 &= 1 \\ \alpha_2 \lambda_2 &= \frac{1}{2} \\ \alpha_2 \mu_2 &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Estas ecuaciones tienen una infinidad de soluciones, que corresponden a todo el plano $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$. Una vez fijados α_1 y α_2 , μ_1, μ_2 quedan determinados de forma única. Si tomamos $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1$, obtenemos $\lambda_2 = \mu_2 = \frac{1}{2}$, y la regla de integración resultante

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hf(x_n, y_n)) \quad (8.5)$$

se conoce también como método del punto medio y constituye la justificación numérica del método del salto de la rana en las ecuaciones de la dinámica. Equivale a tomar la derivada numérica de y mediante la regla de tres puntos o a realizar la integral de $y'(x)$ mediante la regla del punto medio, calculando el valor de $y(x_n + h/2)$ por el método de Euler.

Cuando el método del punto medio se utiliza de forma que las funciones se calculen sólo en la malla de integración, el método se convierte en un método de dos pasos, que satisface la relación de recurrencia

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n) \quad (8.6)$$

Como y_1 no está definido mediante esta relación de recurrencia y el valor inicial y_0 , hay que calcularlo por otro método. La posibilidad más simple es emplear el método de Euler para determinarlo

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

aunque si se quiere evitar la introducción de errores adicionales habría que emplear un método de segundo orden (un paso de 8.5 por ejemplo). Esta última versión del método del punto medio es ligeramente más precisa para un valor de h dado que el método del punto medio con $2h$ (que equivale al mismo esfuerzo de cálculo) ya que los valores de $y(x_n + h/2)$ intermedios se calculan mediante la relación de recurrencia de segundo orden en vez de por el método de Euler. Sin embargo es un método inestable para determinadas ecuaciones.

Si tomamos $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}$, obtenemos la siguiente regla de integración

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))) \quad (8.7)$$

que usualmente se denomina método de Runge-Kutta de orden 2 y también método de Euler modificado. Equivale a utilizar la regla trapezoidal para integrar $y'(x)$, cuando f no depende de y . Constituye una justificación del método de Euler modificado de las ecuaciones de la dinámica. Todavía hay una tercera solución bien conocida, que corresponde a $\alpha_1 = \frac{1}{4}$, $\alpha_2 = \frac{3}{4}$ y $\lambda_2 = \mu_2 = \frac{2}{3}$:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4} \left(f(x_n, y_n) + 3f(x_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}hf(x_n, y_n)) \right)$$

que se conoce como algoritmo de Heun.

Entre los métodos de Runge Kutta, el más popular es sin duda el método de Runge-Kutta de orden 4, en el que se toman $m = p = 4$. Es decir, suponemos una regla de integración de la forma

$$y_{n+1} = y_n + h(\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \alpha_3 k_3 + \alpha_4 k_4)$$

con $k_1 = f(x_n, y_n)$, $k_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + \mu_i k_{i-1} h)$. Las constantes α_i , λ_i , μ_i se determinan de forma que la anterior expresión coincida con la serie de Taylor en orden h^4 . Para ello, desarrollamos las funciones k_i en orden h^3 y reagrupamos potencias de h .

En lo que sigue suprimimos los argumentos de las funciones, por claridad de notación. Tomamos una solución que satisfaga $\lambda_i = \mu_i$, lo cual veremos a posteriori que es posible. Dada la simetría en las derivadas con respecto a x e y , definimos los siguientes operadores diferenciales

$$\begin{aligned} Df &= f_x + f f_y \\ D^2 f &= f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f_{yy} \\ D^3 f &= f_{xxx} + 3f f_{xxy} + 3f^2 f_{xyy} + f^3 f_{yyy} \end{aligned}$$

que permiten una notación más compacta. Podemos simplificar los desarrollos de los k_i , poniendo los argumentos $k_{i-1} = (k_{i-1} - f) + f$, con lo cual cada k_i tiene un desarrollo similar a k_2 más una parte adicional debida al desarrollo de $k_{i-1} - f$ en hasta tercer orden de potencias de h (dependiendo de la potencia de h del término donde aparezcan)

$$\begin{aligned} k_1 &= f \\ k_2 &= f + \lambda_2 h Df + \frac{h^2}{2} \lambda_2^2 D^2 f + \frac{h^3}{6} \lambda_2^3 D^3 f \\ k_3 &= f + \lambda_3 h Df + \lambda_3 h (k_2 - f) f_y + \frac{h^2}{2} \lambda_3^2 D^2 f + \frac{h^2}{2} [2\lambda_3^2 f_{xy} (k_2 - f) + \lambda_3^2 f_{yy} (k_2^2 - f^2)] + \frac{h^3}{6} \lambda_3^3 D^3 f \\ &= f + \lambda_3 h Df + \lambda_3 h f_y (h \lambda_2 Df + \frac{h^2}{2} \lambda_2^2 D^2 f) + \frac{h^2}{2} [\lambda_3^2 D^2 f + 2\lambda_3^2 f_{xy} \lambda_2 h Df + \lambda_3^2 f_{yy} 2\lambda_2 h f Df] + \frac{h^3}{6} \lambda_3^3 D^3 f \\ &= f + \lambda_3 h Df + h^2 \left[\frac{1}{2} \lambda_3^2 D^2 f + \lambda_3 \lambda_2 f_y Df \right] + h^3 \left[\frac{1}{6} \lambda_3^3 D^3 f + \lambda_3^2 \lambda_2 (f_{xy} Df + f_{yy} f Df) + \frac{1}{2} \lambda_2^2 \lambda_3 f_y D^2 f \right] \\ &= f + \lambda_3 h Df + h^2 \left[\frac{1}{2} \lambda_3^2 D^2 f + \lambda_3 \lambda_2 f_y Df \right] + h^3 \left[\frac{1}{6} \lambda_3^3 D^3 f + \lambda_3^2 \lambda_2 Df_y Df + \frac{1}{2} \lambda_2^2 \lambda_3 f_y D^2 f \right] \\ k_4 &= f + \lambda_4 h Df + \lambda_4 h (k_3 - f) f_y + \frac{h^2}{2} \lambda_4^2 D^2 f + \frac{h^2}{2} [2\lambda_4^2 f_{xy} (k_3 - f) + \lambda_4^2 f_{yy} (k_3^2 - f^2)] + \frac{h^3}{6} \lambda_4^3 D^3 f \\ &= f + \lambda_4 h Df + h^2 \left[\lambda_4 \lambda_3 f_y Df + \frac{1}{2} \lambda_4^2 D^2 f \right] \\ &\quad + h^3 \left[\frac{1}{6} \lambda_4^3 D^3 f + \lambda_4^2 \lambda_3 (f_{xy} Df + f_{yy} f Df) + \frac{1}{2} \lambda_4 \lambda_3^2 f_y D^2 f + \lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 f_y^2 Df \right] \\ &= f + h \lambda_4 Df + h^2 \left[\lambda_4 \lambda_3 f_y Df + \frac{1}{2} \lambda_4^2 D^2 f \right] + h^3 \left[\frac{1}{6} \lambda_4^3 D^3 f + \lambda_4^2 \lambda_3 Df_y Df + \frac{1}{2} \lambda_4 \lambda_3^2 f_y D^2 f + \lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 f_y^2 Df \right] \end{aligned}$$

Los primeros términos de la serie de Taylor hasta orden h^4 son

$$\begin{aligned}
 y(x_n + h) &= y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}(f_x(x_n, y_n) + f_y(x_n, y_n) \cdot f(x_n, y_n)) \\
 &\quad + \frac{h^3}{3!}(f_x^{(1)}(x_n, y_n) + f_y^{(1)}(x_n, y_n)f(x_n, y_n)) \\
 &\quad + \frac{h^4}{4!}(f_x^{(2)}(x_n, y_n) + ff_y^{(2)}(x_n, y_n)) \\
 &= y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2}Df + \frac{h^3}{6}(D^2f + f_yDf) \\
 &\quad + \frac{h^4}{24}(D^3f + 3ff_yDf_y + 3f_xDf_y + f_yD^2f + f_y^2Df) \\
 &= y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2}Df + \frac{h^3}{6}(D^2f + f_yDf) + \frac{h^4}{24}(D^3f + 3DfDf_y + f_yD^2f + f_y^2Df)
 \end{aligned}$$

donde hemos utilizado las relaciones

$$\begin{aligned}
 f^{(1)} &= f_x + ff_y = Df \\
 f^{(2)} &= f_{xx} + f_xf_y + 2ff_{xy} + ff_y^2 + f^2f_{yy} = D^2f + f_yDf \\
 f^{(3)} &= f_{xxx} + f_{xx}f_y + f_xf_{xy} + 2f_xf_{xy} + 2ff_{xxy} + f_xf_y^2 + 2ff_{xy} + 2ff_xf_{yy} \\
 &\quad + f^2f_{xyy} + ff_{xxy} + ff_{xy}f_y + ff_xf_{yy} + 2ff_yf_{xy} + 2f^2f_{xyy} \\
 &\quad + ff_y^3 + 2f^2f_yf_{yy} + 2f^2f_yf_{yy} + f^3f_{yyy} = f_{xxx} + 3ff_{xxy} + 3f^2f_{xyy} + f^3f_{yyy} + \\
 &\quad f_y(f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2f_{yy}) + 3f_xf_{xy} + 3ff_yf_{xy} + 3ff_xf_{yy} + 3f^2f_yf_{yy} + f_xf_y^2 + ff_y^3 \\
 &= D^3f + f_yD^2f + 3Df_yDf + f_y^2Df
 \end{aligned}$$

Igualando potencias de h hasta h^4 , obtenemos que deben cumplirse las siguientes 8 ecuaciones con 7 incógnitas:

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 &= 1 \\
 \alpha_2\lambda_2 + \alpha_3\lambda_3 + \alpha_4\lambda_4 &= \frac{1}{2} \\
 \alpha_2\lambda_2^2 + \alpha_3\lambda_3^2 + \alpha_4\lambda_4^2 &= \frac{1}{3} \\
 \alpha_2\lambda_2^3 + \alpha_3\lambda_3^3 + \alpha_4\lambda_4^3 &= \frac{1}{4} \\
 \alpha_3\lambda_2\lambda_3 + \alpha_4\lambda_3\lambda_4 &= \frac{1}{6} \\
 \alpha_3\lambda_2\lambda_3^2 + \alpha_4\lambda_3\lambda_4^2 &= \frac{1}{8} \\
 \alpha_3\lambda_2^2\lambda_3 + \alpha_4\lambda_3^2\lambda_4 &= \frac{1}{12} \\
 \alpha_4\lambda_4\lambda_3\lambda_2 &= \frac{1}{24}
 \end{aligned}$$

Estas ecuaciones tienen una infinidad de soluciones. La solución escogida por Runge-Kutta es $\alpha_1 = \alpha_4 = \frac{1}{6}, \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{3}, \lambda_2 = \lambda_3 = \frac{1}{2}, \lambda_4 = 1$, que proporciona la regla de integración

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 &= f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3) \end{aligned} \quad (8.8)$$

que es el método de Runge-Kutta de 4 orden utilizado usualmente. Es equivalente a integrar $f(x)$ por el método de Simpson cuando $f(x, y)$ no depende de $y(x)$. Esta es quizás la razón de que este conjunto simple de parámetros extremadamente simple sea óptimo entre la infinidad de parámetros posibles, ya que el método de Simpson es un método extremadamente eficiente de integración numérica con errores del orden de $O(h^5)$. Notemos que es necesario realizar 4 evaluaciones de la función f para cada paso de integración. El método es robusto y estable, y suele ser una primera elección a la hora de tratar un problema dado. Es razonablemente eficiente si las funciones f no son excesivamente complicadas. Su error de truncado es

$$\varepsilon = \frac{h^5}{120} f^{(4)}(\xi, y(\xi))$$

Cuando la evaluación de las funciones el menor número de veces posible es de importancia crítica, los métodos de orden superior conocidos como predictor-corrector son más eficientes. El mayor problema de estos métodos radica en la imposibilidad de conocer el error real cometido, lo cual es importante si las funciones f tienen un comportamiento abrupto, y en la imposibilidad de cambiar el paso de integración sobre la marcha, para cambiar el paso de integración en las zonas en las que el comportamiento de f varía. El cambiar el paso de integración en un momento dado es una de las ventajas que caracterizan los métodos de Runge-Kutta y todos los métodos de un paso en general. En lo concerniente a la estimación del error, una forma frecuentemente utilizada en el pasado es comparar los resultados obtenidos con h y $h/2$, aunque este método es costoso en tiempo de cálculo. En los últimos tiempos, la disponibilidad de programas de cálculo simbólico han permitido el descubrimiento de métodos de Runge-Kutta de orden mayor que 4 que contienen un método de 4 orden con funciones calculadas en los mismos puntos. Estos métodos permiten evaluar el error cometido como la diferencia entre los valores obtenidos con los dos órdenes diferentes. En Numerical Recipes se expone un método de Runge-Kutta de orden 6 que permite una estimación del error mediante un método de cuarto orden que utiliza los mismos k_i pero distintos coeficientes α_i .

En Ralston y Rabinowitz se exponen en detalle distintas variantes de los métodos de Runge-Kutta.

En el caso de sistemas de ecuaciones, lo que tendremos es una relación de recurrencia entre

vectores. Por ejemplo, para el método de Runge-Kutta de 4 orden

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)$$

Ejemplo:

Resolver mediante RK4 las ecuaciones de la dinámica para un cuerpo puntual de masa m que se mueve en una dimensión x sometido a una fuerza constante F .

Tomemos $F/m = a$.

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= a\end{aligned}$$

Tenemos

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}$$

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(t, x, v) = \begin{bmatrix} v \\ a \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t, x, v) = \begin{bmatrix} v \\ a \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(t + h/2, \mathbf{y} + h/2\mathbf{k}_1) = \mathbf{f}(t + h/2, x + hv/2, v + ha/2) = \begin{bmatrix} v + ha/2 \\ a \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}(t + h/2, \mathbf{y} + h/2\mathbf{k}_2) = \mathbf{f}(t + h/2, x + h/2(v + ha/2), v + ha/2) = \begin{bmatrix} v + ha/2 \\ a \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{f}(t + h, \mathbf{y} + h\mathbf{k}_3) = \mathbf{f}(t + h, x + hv + h^2a/2, v + ha) = \begin{bmatrix} v + ha \\ a \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) = \begin{bmatrix} x_n + h/6(v_n + 2(v_n + ha/2) + 2(v_n + ha/2) + v_n + ha) \\ v_n + h/6(a + 2a + 2a + a) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x_n + hv_n + h^2a/2 \\ v_n + ah \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Estas son las ecuaciones del movimiento uniformemente acelerado.

Ejercicio: Realizar un paso de integración de las ecuaciones del oscilador armónico simple por RK4. Discutir el resultado.

8.4. Métodos de Runge-Kutta que contienen dos órdenes de aproximación

8.4.1. Método de quinto orden

De especial interés son los métodos de quinto orden o superior que contienen otro método de de cuarto orden. Para quinto orden, estos métodos son de la forma

$$y_{n+1} = y_n + h(\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \alpha_3 k_3 + \alpha_4 k_4 + \alpha_5 k_5 + \alpha_6 k_6)$$

donde las k_i coinciden con las funciones de un método de cuarto orden

$$y'_{n+1} = y_n + h(\beta_1 k_1 + \beta_2 k_2 + \beta_3 k_3 + \beta_4 k_4 + \beta_5 k_5 + \beta_6 k_6)$$

Las funciones k_i se escriben de la forma

$$k_i = f(x + \lambda_i h, y + \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ij} k_j)$$

Notemos que las funciones, que es la parte del algoritmo que consume más tiempo de cálculo, son las mismas para quinto y cuarto orden. Sólo tenemos que formar combinaciones lineales distintas de las mismas funciones para obtener ambos órdenes de integración. El error cometido en un paso de integración se puede estimar como la diferencia entre los métodos de quinto y cuarto orden:

$$\varepsilon = y(x+h) - y'(x+h) = h \sum_{i=1}^6 (\alpha_i - \beta_i) k_i$$

lo que nos proporciona la posibilidad de estimar el error cometido en cada paso, con un esfuerzo numérico mínimo. El método original, debido al Fehlberg, tiene los siguientes valores de los parámetros.

i	α_i	$\alpha_i - \beta_i$	λ_i	μ_{ij}				
1	$\frac{16}{35}$	$\frac{1}{360}$	0	0				
2	0	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$				
3	$\frac{6656}{12825}$	$-\frac{128}{4275}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$			
4	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{2197}{75240}$	$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$		
5	$-\frac{9}{50}$	$\frac{1}{50}$	1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$	
6	$\frac{2}{55}$	$\frac{2}{55}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$

Hay métodos similares debidos a England (ver Ralston Rabinowitz) y a Cash y Karp (ver Numerical Recipes). Notemos que tomamos el valor de la solución de quinto orden aunque la estima del error es de la de cuarto orden.

8.5. Método de Runge-Kutta adaptativo

Un método adaptativo es aquel que cambia el paso de integración de forma que el error cometido ε se encuentre siempre por debajo de cierta tolerancia δ . Esto siempre es posible en el caso de métodos de un paso que permitan la estimación del error. Los métodos de Runge-Kutta que contienen otro de orden inferior permiten realizar una estimación del error y modificar el paso de integración de forma que el error sea inferior a la tolerancia, pero no excesivamente. Si sabemos que el error va con h^5 tenemos que un factor 2 de reducción de h disminuye el error en $\frac{1}{2^5} = \frac{1}{128}$. Podemos ajustar el paso de integración variando h un factor γ , $h' = \gamma h$, de forma que $\varepsilon \gamma^5 = \delta$, siempre que ε se desvíe apreciablemente, por encima o por debajo, de la tolerancia deseada δ .

$$\gamma = \frac{h'}{h} = \left(\frac{\delta}{\varepsilon} \right)^{1/5}$$

De esta forma, mantenemos un paso de integración en un valor óptimo, sin que desperdiciemos tiempo de cálculo ni tengamos errores superiores a los deseados. En el método RK4, la única forma de estimar el error es comparar los resultados obtenidos con un paso con h y dos pasos con $h/2$. Esto se puede realizar cada cierto número de pasos de integración. Los métodos adaptativos son esenciales en problemas donde las condiciones de integración varían fuertemente, como suele suceder en muchos problemas de ingeniería. Como el error es sólo una estimación, en un programa real tomamos una constante c_1 menor que la unidad y hacemos $h' = c_1 \gamma h$. Un valor realista es $c_1 = 0,8$. También debemos evitar variaciones demasiado bruscas de h que pueden resultar incontrolables. Podemos limitar las variaciones de h en un factor $c_2 = 4$, por ejemplo. Si $c_1 \gamma h > 4h$ tomamos $h' = 4h$. Si $c_1 \gamma < 1/4$ tomamos $h' = h/4$.

8.6. Métodos multipaso

8.6.1. Ecuaciones de segundo orden: método de Numerov

Para algunos tipos de ecuaciones de orden superior existen métodos más adecuados que el de Runge-Kutta. En particular, para ecuaciones del tipo

$$y''(x) = f(x)y(x) + w(x)$$

que aparece frecuentemente en Física, podemos aproximar la derivada segunda utilizando la fórmula de tres puntos de con su término de error

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} y^{(4)}(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} (f(x)y(x) + w(x))''$$

En el último paso hemos utilizado la ecuación diferencial para calcular el término de error. Utilizando la fórmula de tres puntos de nuevo para calcular la derivada segunda del último tér-

mino, $y''(x)$ queda en la forma

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}(f(x+h)y(x+h) + w(x+h) - 2f(x)y(x) - 2w(x) + f(x-h)y(x-h) + w(x-h))$$

con lo que la ecuación en diferencias finitas correspondiente a la ecuación diferencial queda como

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}[f(x+h)y(x+h) + w(x+h) - 2f(x)y(x) - 2w(x) + f(x-h)y(x-h) + w(x-h)] = f(x)y(x) + w(x)$$

Reordenando los términos obtenemos finalmente la relación de recurrencia

$$y(x+h) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x+h)\right) - 2y(x) \left(1 + \frac{5h^2}{12}f(x)\right) + y(x-h) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x-h)\right) = \quad (8.9)$$

$$\frac{h^2[w(x+h) + 10w(x) + w(x-h)]}{12} \quad (8.10)$$

que se conoce como método de integración de Numerov. Notemos que no es un método de un paso, puesto que cada valor de $y(x)$ se calcula a partir de los dos valores anteriores en la malla de integración. La función $y(x)$ se determina con un error correspondiente al siguiente término de error de la fórmula de derivación de tres puntos

$$\Delta = -h^6 y^{(6)}(x)/240$$

por lo que el método de Numerov es más preciso que el de Runge-Kutta de cuarto orden y necesita menos evaluaciones de las funciones $f(x)$, pues se calculan sólo en la malla de integración.

Ejercicio: Demostrar que el error de truncado del método de Numerov viene dado por $\Delta = -h^6 y^{(6)}(x)/240$.

Solución: Tenemos el desarrollo de Taylor alrededor de y_n

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y'' + 2\frac{h^2}{4!}y^{(4)} + 2\frac{h^4}{6!}y^{(6)} = y'' + \frac{h^2}{12}y^{(4)} + \frac{h^4}{360}y^{(6)} + \frac{h^6}{20160}y^{(8)}$$

$$y'' = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(4)} - \frac{h^4}{360}y^{(6)} - \frac{h^6}{20160}y^{(8)}$$

y utilizando de nuevo la fórmula de tres puntos para la derivada cuarta

$$y^{(4)} = (y'')'' = \frac{y''_{n+1} - 2y''_n + y''_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(6)} - \frac{h^4}{360}y^{(8)}$$

obtenemos hasta orden h^6

$$y'' = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} \left[\frac{y''_{n+1} - 2y''_n + y''_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(6)} - \frac{h^4}{360}y^{(8)} \right] - \frac{h^4}{360}y^{(6)} - \frac{h^6}{20160}y^{(8)}$$

Definiendo

$$u(x) = y(x) - \frac{h^2}{12}y''(x) = y(x) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x)\right)$$

donde en el último paso hemos utilizado la ecuación diferencial, tenemos en orden h^4

$$y'' = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} + \frac{h^4}{144}y^{(6)} - \frac{h^4}{360}y^{(6)} = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} + \frac{h^4}{240}y^{(6)}$$

por lo que la relación de recurrencia da $u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + h^2 f(x_n)y_n$ con un error de truncado de $-\frac{h^6}{240}y^{(6)}$.

La forma óptima desde el punto de vista de eficiencia numérica de utilizar el método de Numerov es definir la función

$$u(x) = y(x) \left(1 - \frac{h^2}{12} f(x) \right)$$

para la cual la relación 8.9 nos da la relación de recurrencia

$$u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + h^2 \left(\frac{w(x_{n+1}) + 10w(x_n) + w(x_{n-1}))}{12} + f(x_n)y_n \right)$$

En el segundo término aparece todavía y_n . Teniendo en cuenta que

$$y(x) = \frac{u(x)}{\left(1 - \frac{h^2}{12} f(x) \right)} \quad (8.11)$$

podemos poner y_n en función de u_n en el segundo miembro y tenemos finalmente la relación de recurrencia de u_n para la integración por el método de Numerov:

$$u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + h^2 \left(\frac{w_{n+1} + 10w_n + w_{n-1}}{12} + \frac{f(x_n)u_n}{\left(1 - \frac{h^2}{12} f(x_n) \right)} \right)$$

La solución buscada $y(x)$, se obtiene al final a partir de la relación 8.11 para los puntos deseados:

$$y_n = \frac{u_n}{\left(1 - \frac{h^2}{12} f(x_n) \right)}$$

En determinadas ocasiones, el llamado método de Numerov modificado, en el que se reemplaza el denominador de la expresión anterior por sus dos primeros términos del desarrollo en serie de Taylor,

$$\frac{f(x_n)}{\left(1 - \frac{h^2}{12} f(x_n) \right)} \approx f(x_n) \left(1 + \frac{h^2}{12} f(x_n) \right)$$

es más estable que el método de Numerov original. El error de truncado del método de Numerov modificado es el correspondiente al método de Numerov mas el cometido en la última aproximación

$$\Delta = h^6 f(x)^3 y(x) / 144 - h^6 y^{(4)}(x) / 240$$

La mayor estabilidad se debe a la cancelación de estos dos términos de error. El método de Numerov necesita dos valores iniciales. Las condiciones iniciales de las ecuaciones diferenciales de segundo orden suelen ser el valor inicial y_0 y la derivada de la función y'_0 . El primer valor de partida es el valor inicial y_0 . El segundo valor y_1 se puede determinar a partir de y_0 como $y_1 = y_0 + y'_0 h$ aunque esto introduce un error de h^2 . Una posibilidad es emplear Runge-Kutta para determinar y_1 . Otra posibilidad es considerar el desarrollo en serie de Taylor

$$y_1 = y_0 + y'_0 h + \frac{1}{2} y''_0 h^2 + \frac{1}{6} y^{(3)}_0 h^3 + \frac{1}{24} y^{(4)}_0 h^4 + O(h^5)$$

Las derivadas se pueden determinar directamente de la ecuación diferencial

$$\begin{aligned} y''_0 &= f(x_0)y_0 + w_0 \\ y^{(3)}_0 &= f'(x_0)y_0 + f(x_0)y'_0 + w'(x_0) \\ y^{(4)}_0 &= f''(x_0)y_0 + f'(x_0)y'_0 + f(x_0)(f(x_0)y_0 + w_0) + w''(x_0) \end{aligned}$$

y así sucesivamente. Alternativamente, si no es posible determinar las derivadas analíticamente, las podemos determinar numéricamente. Por ejemplo, en orden h^3 podemos aproximar

$$y^{(3)}_0 = (f(x_0)y_0 + w_0)' = \frac{f(x_1)y_1 + w_1 - f(x_0)y_0 - w_0(x_0)}{h}$$

con lo que obtenemos

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + y'_0 h + \frac{1}{2} (f(x_0)y_0 + w(x_0)) h^2 + \frac{1}{6} \frac{f(x_1)y_1 + w_1 - f(x_0)y_0 - w_0(x_0)}{h} h^3 \\ y_1 &= y_0 + y'_0 h + \frac{1}{3} (f(x_0)y_0 + w(x_0)) h^2 + \frac{1}{6} (f(x_1)y_1 + w(x_1)) h^2 \end{aligned}$$

El método de Numerov se utiliza usualmente para resolver la ecuación de Schrödinger en un pozo de potencial $V(x)$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi$$

o la de un oscilador armónico forzado

$$x''(t) + k^2 x(t) = f(t)$$

Cuando tenemos una ecuación de la forma

$$y'' = f(x, y)$$

aunque el método de Numerov no es aplicable, se puede utilizar la relación de recurrencia obtenida desarrollando y'' en orden h^4 mediante la fórmula de tres puntos con su término de error y utilizando la ecuación diferencial y la fórmula de tres puntos para estimar $y^{(4)}(x)$,

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = \frac{h^2}{12} [f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 10f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})]$$

que da y_n con un error $O(h^6)$. Como el cálculo del segundo término necesita y_{n+1} , que es la solución que queremos determinar, se calcula y_{n+1} mediante el predictor

$$y_{n+1}^{(0)} = 2y_n - y_{n-1} + \frac{h^2}{12} [f(x_{n+1}, y_n) + 10f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})]$$

y se itera

$$y_{n+1}^{(k)} = 2y_n - y_{n-1} + \frac{h^2}{12} [f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k-1)}) + 10f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})]$$

hasta que se alcance la convergencia (usualmente 3 o 4 veces). Este método se denomina método implícito de Numerov.

El hecho de que el método de Numerov tiene un error que es una serie de potencias pares de h , hace posible el utilizar el proceso de extrapolación al límite, utilizando pasos de integración h , $h/2$, $h/4$,... para mejorar la precisión de la solución $y(x)$ en un punto dado. La extrapolación al límite también se puede utilizar para calcular y_1 .

8.6.2. Método de Stoer Burlisch y extrapolación de Richardson

La regla del punto medio tiene un error que es una serie de potencias pares de h . Esto nos permite utilizar el método de extrapolación al límite en la forma que exponemos a continuación. Consideramos un paso de integración H , que es mucho mayor que la longitud usual de un paso de integración, y subdividimos H en n subintervalos. Si realizamos una subintegración dentro de H , con y_0 como valor inicial, obtenemos:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ y_2 &= y_0 + 2hf(x_1, y_1) \\ &\vdots \\ y_n &= y_{n-2} + 2hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \end{aligned}$$

Entonces sucede que la estima

$$y(x_0 + H, h) = \frac{1}{2} [y_n + y_{n-1} + hf(x_n, y_n)]$$

tiene un error que es una serie de potencias pares de h , con coeficientes independientes de h :

$$y(x_0 + H, h) = y(x_0 + H) + A_2 h^2 + A_4 h^4 + A_6 h^6 + \dots$$

Esto nos permite utilizar la extrapolación de Richardson para calcular $y(x_0 + H)$. Para ello tomamos $h = H, H/2, H/4, H/8, \dots$ y construimos la tabla usual de extrapolación al límite

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & & & \mathbb{R}(H) \\
 & & & & & & \mathbb{R}^{(1)}(H) \\
 & & & & & & \mathbb{R}(H/2) & & \mathbb{R}^{(2)}(H) \\
 & & & & & & \mathbb{R}^{(1)}(H/2) & & \mathbb{R}^{(3)}(H) \\
 & & & & & & \mathbb{R}(H/4) & & \mathbb{R}^{(2)}(H/2) \\
 & & & & & & \mathbb{R}^{(1)}(H/4) \\
 & & & & & & \mathbb{R}(H/8) \\
 & & & & & & \vdots
 \end{array}$$

con $\mathbb{R}(H) = y(x_0 + H, H)$, $\mathbb{R}(H/2) = y(x_0 + H, H/2)$, $\mathbb{R}(H/4) = y(x_0 + H, H/4)$, \dots , y

$$R^{(k)}(H/2^{m-1}) = \frac{4^k R^{(k-1)}(H/2^m) - R_m^{(k-1)}(H/2^{m-1})}{4^k - 1}$$

8.7. Métodos explícitos

Los métodos explícitos se basan en escribir la solución de la ecuación diferencial $y' = f(x, y)$ como

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

y aproximar $f(x, y)$ por el polinomio interpolador en $m+1$ puntos (x_n, y_n) , (x_{n-1}, y_{n-1}) , (x_{n-m}, y_{n-m}) , $m \leq n$:

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

Utilizamos la fórmula de diferencias regresivas del polinomio interpolador:

$$p_m(x) = \sum_{j=0}^m (-1)^j \binom{-s}{j} \nabla^j f_n$$

con $s = \frac{x - x_n}{h}$ ($s < 0$) con lo que tenemos

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_m(x) dx = h \sum_{j=0}^m b_j \nabla^j f_n$$

donde

$$b_j = (-1)^j \int_0^1 \binom{-s}{j} ds$$

Los coeficientes b_j no dependen ni de m ni de n . Los primeros valores son $b_0 = 1$, $b_1 = 1/2$, $b_2 = 5/12$, $b_3 = 3/8$, $b_4 = 251/720$.

La regla de integración

$$y_{n+1} = y_n + h[b_0 f_n + b_1 \nabla f_n + \cdots + b_m \nabla^m f_n]$$

se denomina algoritmo de Adams-Bashfort. Expresando las diferencias en términos de valores de la función, obtenemos expresiones de la forma

$$y_{n+1} = y_n + h[\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n-1} + \cdots + \beta_m f_{n-m}]$$

donde los β_i dependen del orden m del polinomio. Los casos particulares para diversos valores de m son los siguiente: para $m = 0$

$$y_{n+1} = y_n + h f_n$$

que es el método de Euler. Para $m = 1$ tenemos:

$$y_{n+1} = y_n + h[b_0 f_n + b_1(f_n - f_{n-1})] = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})$$

mientras que para $m = 2$ obtenemos

$$y_{n+1} = y_n + h[b_0 f_0 + b_1(f_1 - f_0) + b_2(f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2})] = y_n + \frac{h}{12}[23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}]$$

Finalmente, para el algoritmo de Adams-Bashforth con $m = 3$ tenemos la relación de recurrencia:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h[b_0 f_0 + b_1(f_1 - f_0) + b_2(f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}) \\ &\quad + b_3((f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}) - (f_{n-1} - 2f_{n-2} + f_{n-3}))] \\ &= y_n + \frac{h}{24}[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \end{aligned}$$

También se pueden derivar métodos explícitos con un paso de integración de varias unidades de h . Tomando $2h$ tenemos

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

y procediendo como anteriormente obtenemos

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h[b_0^* f_n + b_1^* \nabla f_n + \cdots + b_m^* \nabla^m f_n]$$

con

$$b_j^* = (-1)^j \int_{-1}^1 \binom{-s}{j} ds$$

Este método se conoce como algoritmo de Nystrom. Se encuentra que para $m = 0$ y $m = 1$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2h f_n$$

que es la regla del punto medio, mientras que para $m = 2$ obtenemos

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3} (7f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2})$$

Ejercicio: Demostrar estas relaciones.

Podemos generalizar las relaciones anteriores a un paso de integración de amplitud $(k+1)h$

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-k}) + \int_{x_{n-k}}^{x_{n+1}} p_m(x) dx$$

Cuando $k = 3$ obtenemos el denominado algoritmo de Milne

$$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2f_{n-2} - f_{n-1} + 2f_n)$$

Todos los métodos explícitos realizan una extrapolación para calcular $y(x)$ entre y_n y y_{n+1} , lo cual es un problema puesto que, como ya hemos visto, la extrapolación tiene un error difícil de determinar y en general es más imprecisa que la interpolación. Este problema se corrige mediante los métodos implícitos, que interpolan entre y_n y y_{n+1} .

8.7.1. Métodos implícitos

Los métodos implícitos son similares a los métodos explícitos, salvo que el polinomio interpolador pasa además por el punto (x_{n+1}, y_{n+1}) . De forma similar a como hemos procedido para los métodos explícitos, podemos escribir

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_{m+1}(x) dx$$

de donde, utilizando la fórmula de diferencias hacia atrás para el polinomio interpolador,

$$p_{m+1}(x) = \sum_{j=0}^{m+1} (-1)^j \binom{-s}{j} \nabla^j f_{n+1}$$

con

$$s = \frac{x - x_{n+1}}{h}$$

obtenemos

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_{m+1}(x) dx = h \sum_{j=0}^{m+1} c_j \nabla^j f_{n+1}$$

con

$$c_j = (-1)^j \int_{-1}^0 \binom{-s}{j} ds$$

que depende sólo de j y no de la función o el orden del polinomio interpolador. Obtenemos por lo tanto el algoritmo

$$y_{n+1} = y_n + h [c_0 f_{n+1} + c_1 \nabla f_{n+1} + \cdots + c_{m+1} \nabla^{m+1} f_{n+1}]$$

denominado método de Adams-Moulton. Los primeros valores de c_j son: $c_0 = 1$, $c_1 = -1/2$, $c_2 = -1/12$, $c_3 = -1/24$, $c_4 = -19/720$. Expresando las diferencias en término de los valores de la función, la expresión anterior toma la forma

$$y_{n+1} = y_n + h[\gamma_0 f_{n+1} + \gamma_1 f_n + \cdots + \gamma_{m+1} f_{n-m}]$$

donde los γ_i dependen sólo de i y m . Obtenemos los siguientes métodos implícitos para los diferentes valores de m :

Para $m = -1$

$$y_{n+1} = y_n + h f_{n+1}$$

que es el método de Euler-Cromer. Para $m = 0$ obtenemos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$$

que es el método de Euler modificado. Para $m = 1$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$$

y finalmente, para $m = 2$

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

Ejercicio: Demostrar las expresiones anteriores.

También se pueden derivar algoritmos implícitos similares al de Nystrom a partir de la relación

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-1}) + \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} p_{m+1}(x) dx$$

Para $m = 1$ y $m = 2$ se obtiene la expresión

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1})$$

que se conoce como método de Milne-Simpson o método implícito de Simpson. Su error de truncado es el del método de integración de Simpson:

$$t(x, h) = -\frac{h^4}{90} f^{(4)}(\eta)$$

Ejercicio: Demostrarlo.

Los algoritmos implícitos necesitan una primera aproximación a y_{n+1} . Lo usual es utilizarlos en la forma conocida como predictor corrector, donde un método explícito se emplea para calcular una primera aproximación de y_{n+1} , que llamamos $y_{n+1}^{(0)}$, y el corrector se emplea para mejorar este valor. Tendremos por lo tanto,:

Predictor:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + h \left[b_0 f_n + b_1 \nabla f_n + \cdots + b_k \nabla^k f_n \right]$$

Corrector:

$$y_{n+1}^{(i+1)} = y_n + h \left[c_0 f_{n+1}^{(i)} + c_1 \nabla f_{n+1}^{(i)} + \cdots + c_{m+1} \nabla^{m+1} f_{n+1}^{(i)} \right]$$

donde k y m son los órdenes del predictor y corrector, respectivamente. Es recomendable que $k = m$ pero frecuentemente se emplean k y m distintos. El método más sencillo es $k = 0$ y $m = 0$

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + h f_n \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_n + \frac{h}{2} \left[f_{n+1}^{(i)} + f_n \right] \end{aligned}$$

conocido como método de Euler modificado. Cuando $m = k = 2$, tenemos el método de Adams-Moulton de tercer orden:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + \frac{h}{12} [23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] + O(h^4) \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_n + \frac{h}{24} [9f_{n+1}^{(i)} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] + O(h^5) \end{aligned}$$

mientras que con $k = 3$ y $m = 2$ se obtiene el denominado método de Adams, frecuentemente empleado:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + \frac{h}{24} [55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] + O(h^5) \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_n + \frac{h}{24} [9f_{n+1}^{(i)} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] + O(h^5) \end{aligned}$$

Los métodos de predictor-corrector tienen como principal ventaja sobre los métodos explícitos el que permiten estimar el error cometido. Por ejemplo, en el método de Adams

$$y_{n+1}^{(i+1)} - y_{n+1}^{(i)} = \frac{9h}{24} \left(f_{n+1}^{(i)} - f_{n+1}^{(i-1)} \right)$$

En general, son suficientes dos o tres iteraciones del corrector. En caso de que sean necesarias más iteraciones, es preferible disminuir el paso de integración.

También se pueden derivar correctores con varios pasos de integración. El método de Milne de predictor-corrector emplea el método explícito de Milne como predictor y utiliza el método implícito de Simpson como corrector:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2f_{n-2} - f_{n-1} + 2f_n) \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_{n-1} + \frac{h}{3} \left(f_{n+1}^{(i)} + 4f_n + f_{n-1} \right) \end{aligned}$$

Ejemplo: Consideremos las ecuaciones de la dinámica

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} &= \mathbf{v}(t) \\ \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} &= \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{m} = \mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\end{aligned}$$

En el caso del método predictor-corrector con $k = m = 0$, tenemos

Predictor

$$\begin{aligned}x_{i,n+1}^{(0)} &= x_{i,n} + hv_{i,n} \\ v_{i,n+1}^{(0)} &= v_{i,n}^0 + hf_i(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n)\end{aligned}$$

Corrector

$$\begin{aligned}x_{i,n+1}^{(k+1)} &= x_{i,n} + \frac{h}{2} \left(v_{i,n+1}^{(k)} + v_{i,n} \right) \\ v_{i,n+1}^{(k+1)} &= v_{i,n} + \frac{h}{2} \left(f_{i,n+1}^{(k)}(\mathbf{r}_{n+1}^{(k)}, \mathbf{v}_{n+1}^{(k)}, t_{n+1}) + f_{i,n}(\mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n, t_n) \right)\end{aligned}$$

donde el subíndice i indica las coordenadas x, y y z ($x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$). Vemos que el corrector para la posición es la regla del punto medio.

8.8. Errores de truncado y errores de redondeo

8.8.1. Errores de truncado. Métodos consistentes y métodos convergentes.

La base de la solución numérica de ecuaciones diferenciales es aproximar la ecuación diferencial

$$y' = f(x, y)$$

por una relación de recurrencia

$$y_{n+1} = y_n + hG(x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k}, h)$$

Consideraremos métodos de un paso. Las soluciones de la ecuación en diferencias y_n difieren de las soluciones $y(x_n)$ de la ecuación diferencial. A la cantidad

$$t(x_n, h) = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - G(x_n, y(x_n), h)$$

se le denomina error de truncado y nos da una medida de la convergencia de las soluciones de la ecuación en diferencias a las soluciones ecuación diferencial. De la definición de error de truncado tenemos que la solución exacta de la ecuación diferencial satisface

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hG(x_n, y(x_n), h) + ht(x_n, h)$$

mientras que la solución de la ecuación en diferencias cumple

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

El método es consistente si, cuando $h \rightarrow 0$, el error de truncado cumple $t(x, h) \rightarrow 0$. En particular el método se dice que es consistente de orden p si existe un número M para el cual

$$t(x_n, h) \rightarrow Mh^p$$

cuando $h \rightarrow 0$.

El que un método sea consistente no garantiza su utilidad para resolver una ecuación diferencial, en la que deseamos calcular el valor $y(x_n)$, con x_n fijo, a partir de $y(x_0)$, de forma que si disminuimos h debemos de aumentar n , con $x_0 + nh = x_n$. Decimos que un método es convergente si

$$y_n \rightarrow y(x_n)$$

con x_n fijo, de forma que $n \rightarrow \infty$ cuando $h \rightarrow 0$. Vamos a considerar métodos de un paso por simplicidad de notación. Para que la consistencia garantice la convergencia, debe cumplirse que la sucesión

$$\begin{aligned} \Delta_{n+1} = |y_{n+1} - y(x_{n+1})| &= |y_n + hG(x_n, y_n, h) - y(x_n) - hG(x_n, y(x_n), h) - ht(x_n, h)| \leq |y_n - y(x_n)| \\ &\quad + h|t(x_n, h)| + h|G(x_n, y_n, h) - G(x_n, y(x_n), h)| \end{aligned}$$

converja cuando $h \rightarrow 0$. Repitiendo este proceso n veces y teniendo en cuenta que $t(x_n, h) \leq Mh^p$, obtenemos

$$\begin{aligned} |y_{n+1} - y(x_{n+1})| &\leq nhMh^p + h|G(x_n, y_n, h) - G(x_n, y(x_n), h)| \\ &\quad + h|G(x_{n-1}, y_{n-1}, h) - G(x_{n-1}, y(x_{n-1}), h)| + h|G(x_1, y_1, h) - G(x_1, y(x_1), h)| \end{aligned}$$

La segunda suma debe de converger para que el método sea convergente. Esto se puede garantizar si se cumple la condición (conocida como condición Lipchitz)

$$|G(x_n, y_n, h) - G(x_n, y(x_n), h)| \leq L|y_n - y(x_n)|$$

para una constante positiva L . Tenemos que en este caso podemos escribir

$$|y_{n+1} - y(x_{n+1})| \leq (1 + hL)|y_n - y(x_n)| + h|t(x_n, h)|$$

que repitiendo n veces da

$$\begin{aligned} |y_{n+1} - y(x_{n+1})| &\leq h|t(x_n, h)| + h(1 + hL)|t(x_{n-1}, h)| + h(1 + hL)^2|t(x_{n-2}, h)| + \\ &\quad \dots + h(1 + hL)^n|t(x_1, h)| \leq \\ &\leq hMh^p \left[(1 + hL) + (1 + hL)^2 + \dots + (1 + hL)^n \right] \leq \\ &\leq hMh^p [\exp(hL) + \exp(2hL) + \dots + \exp(nhL)] \\ &\leq Mh^{p+1} \left[\exp(hL) \frac{\exp(nhL) - 1}{\exp(hL) - 1} \right] = \\ &= Mh^{p+1} \left[\exp(hL) \frac{\exp((x_n - x_0)L) - 1}{\exp(hL) - 1} \right] \leq Mh^p \left[\exp(hL) \frac{\exp((x_n - x_0)L) - 1}{L} \right] \end{aligned}$$

Por lo tanto tenemos que cuando $h \rightarrow 0$

$$|y_{n+1} - y(x_{n+1})| \leq Mh^p \left[\frac{\exp((x_n - x_0)L) - 1}{L} \right]$$

si $L \neq 0$ y

$$|y_{n+1} - y(x_{n+1})| \leq (x_n - x_0)Mh^p$$

si $L = 0$. Vemos que este resultado no aumenta con n para x_n fijo, por lo que el método es convergente. Por lo tanto la convergencia es una condición más estricta que la consistencia (requiere la condición Lipchitz o equivalente).

8.8.2. Errores de redondeo

Podemos pensar que podemos disminuir indefinidamente el paso de integración de forma que nos aproximemos a la solución exacta tanto como queramos. Sin embargo, cuando trabajamos con ordenadores, lo hacemos con una precisión numérica ε , de forma que en vez de la sucesión y_n , calculamos la sucesión \tilde{y}_n , dada por

$$\tilde{y}_{n+1} = \tilde{y}_n + hG(x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k}, h) + \varepsilon$$

donde las tildes indican la relación de recurrencia afectada por los errores de redondeo. Tenemos que $y(x_n)$ satisface

$$\begin{aligned} |\tilde{y}_{n+1} - y(x_{n+1})| &= |\tilde{y}_n + hG(x_n, \tilde{y}_n, h) - y(x_n) - h(G(x_n, y(x_n), h) - h t(x_n, h) + \varepsilon)| \\ &\leq |\tilde{y}_n - y(x_n)| + h|t(x_n, h)| + h|G(x_n, \tilde{y}_n, h) - G(x_n, y(x_n), h)| + \varepsilon \\ &= |\tilde{y}_n - y(x_n)| + hMh^p + hL|\tilde{y}_n - y(x_n)| + \varepsilon = hMh^p + (1 + hL)|\tilde{y}_n - y(x_n)| + \varepsilon \end{aligned}$$

Vemos que si reducimos h por debajo de

$$h < \left(\frac{\varepsilon}{M} \right)^{\frac{1}{p+1}}$$

el error de redondeo dominará sobre el error de truncado, por lo que no tiene sentido disminuir h o aumentar el orden de convergencia para mejorar la precisión del cálculo. Sólo queda aumentar la precisión de la aritmética con la que operamos (cuádruple precisión o precisión arbitraria).

8.9. Ecuaciones en diferencias y estabilidad de ecuaciones diferenciales

Uno de los problemas importantes es determinar si un método para resolver una ecuación diferencial es estable. Cuando resolvemos la ecuación numéricamente, reemplazamos la ecuación diferencial por una ecuación en diferencias. La solución exacta de esta ecuación en diferencias es distinta de la solución de la ecuación diferencial. La diferencia entre ambas viene dada en

principio por el error de truncado del método, expresado como una potencia del paso de integración. Sin embargo, estas cotas de error no tienen en cuenta los errores de redondeo y los errores en los valores iniciales. En un método de integración dado, la ecuación de diferencias asociada será

$$y_{n+1} = y_n + hG(y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, y_{n-m}, x_n)$$

Si cambio el valor inicial en una pequeña cantidad, $y_0^* = y_0 + \varepsilon$, puede suceder que el cambio en la nueva sucesión y_n^* sea siempre pequeño si ε es pequeño, o que por el contrario que el error relativo $r_n = |y_n^* - y_n|/y_n$ crezca indefinidamente. En este último caso, decimos que el método de integración es inestable. Un método puede ser inestable en determinadas zonas de las condiciones iniciales y los parámetros, y estable en otras. La estabilidad se puede estudiar mediante la resolución exacta de la ecuación en diferencias. La inestabilidad puede tener su origen en el tamaño del paso de integración, en la ecuación en diferencias que reemplaza la ecuación diferencial o puede ser una propiedad intrínseca de la ecuación diferencial, para una determinada región de los parámetros y condiciones iniciales. Este último caso es el origen de los sistemas caóticos. Aquí vamos a estudiar únicamente las inestabilidades producidas por el método numérico empleado para resolver una ecuación ordinaria intrínsecamente estable, debidas tanto al tamaño excesivo del paso de integración como a soluciones parásitas de la ecuación en diferencias que no existen en la ecuación diferencial original. Para ilustrar el origen de las inestabilidades, vamos a considerar el método del punto medio para el caso sencillo en que $f(x_n, y_n) = -Ay_n$, donde A es una constante. La solución exacta de esta ecuación diferencial es $y = ce^{-Ax}$. Consideremos el método de Euler

$$y_{n+1} = y_n - hAy_n = (1 - Ah)y_n$$

Tenemos

$$y_n = (1 - Ah)^n y_0$$

Si $|1 - Ah| > 1$, la solución numérica satisfará $y_n \rightarrow \infty$ cuando $n \rightarrow \infty$ en vez de $y_n \rightarrow 0$. Tenemos un caso de inestabilidad, que se corrige eligiendo un paso de integración suficientemente pequeño, $h < 2/A$. La mayoría de los métodos son inestables si h es demasiado grande. Una excepción es el método implícito de Adams-Moulton de orden 1 y 2. Para el orden $m = 2$, este método da

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n) = y_n + \frac{h}{2}(-Ay_n - Ay_{n+1})$$

de forma que

$$\left(1 + \frac{1}{2}hA\right)y_{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2}hA\right)y_n$$

con lo que obtenemos

$$y_n = \left(\frac{1 - \frac{1}{2}hA}{1 + \frac{1}{2}hA}\right)^n y_0 \simeq e^{-Anh}$$

que cumple $y_n \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$ para cualquier valor de h . Para el orden $m = 1$ tenemos

$$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$$

que en nuestro caso particular se resuelve como

$$y_n = \left(\frac{1}{1+hA} \right)^n y_0$$

que siempre converge a 0 si $A > 0$. Esta es la razón de la convergencia de los métodos de Euler-Cromer y Euler modificado.

Hay otro tipo de inestabilidades más perverso que aparecen en los métodos multipaso, debido a la aparición de soluciones parásitas. Por ejemplo, la ecuación en diferencias dada por el método del punto medio (de dos pasos) es

$$y_{n+1} + 2hAy_n + y_{n-1} = 0$$

Para resolver esta ecuación en diferencias suponemos una solución de la forma $y_n = z^n$, con lo que obtenemos la ecuación característica

$$z^{n-1}(z^2 + 2Ahz - 1) = 0$$

que tiene como soluciones no nulas, $z_1 = -Ah + \sqrt{A^2h^2 + 1}$ y $z_2 = -Ah - \sqrt{A^2h^2 + 1}$. Tendremos por lo tanto las soluciones de la ecuación en diferencias

$$\begin{aligned} y_n^{(1)} &= z_1^n = \left[-Ah - \sqrt{A^2h^2 + 1} \right]^n \simeq \left[-1 - Ah - \frac{1}{2}A^2h^2 + \mathcal{O}(h^3) \right]^n \simeq (-1)^n e^{Anh} + \mathcal{O}(nh^3) \\ &= (-1)^n e^{Ax_n} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} y_n^{(2)} &= z_2^n = \left[-Ah + \sqrt{A^2h^2 + 1} \right]^n \simeq \left[1 - Ah + \frac{1}{2}A^2h^2 + \mathcal{O}(h^3) \right]^n \simeq e^{-Anh} + \mathcal{O}(nh^3) \\ &= e^{-Ax_n} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta $x_n - x_0 = nh$. La solución general de la ecuación en diferencias es una combinación lineal de ambas soluciones

$$y_n = c_1(-1)^n e^{Ax_n} + c_2 e^{-Ax_n}$$

Tenemos que la ecuación en diferencias tiene, además de la solución de la ecuación diferencial, la solución parásita $y_n = c_1(-1)^n e^{Ax_n}$. La solución que corresponde a la ecuación diferencial y que debería ser seleccionada por las condiciones iniciales es

$$y_n = c_2 e^{-Ax_n}$$

es decir, $c_1 = 0$. Sin embargo, en la práctica, los errores de redondeo y de truncado introducen una componente de la solución parásita

$$y_n^* = \delta(-1)^n e^{Ax_n} + c_2 e^{-Ax_n}$$

que crece exponencialmente hasta enmascarar completamente la solución verdadera. El error relativo es de la solución, que denominamos r_n , es

$$r_n = \frac{y_n^* - y_n}{y_n} \longrightarrow \frac{\delta}{c_2} (-1)^n e^{2Ax_n} \longrightarrow \infty$$

El origen de esta solución parásita radica en la aproximación una ecuación diferencial de primer orden por una ecuación en diferencias de segundo orden. Como necesitamos dos valores de comienzo, aunque estos valores sean exactos para la ecuación diferencial, como la ecuación en diferencias es distinta, estos valores no corresponderán a la solución de la ecuación en diferencias que corresponde a la solución de la ecuación diferencial y no la seleccionarán de forma exclusiva, introduciendo componentes de las otras soluciones parásitas. En general cuando resolvemos una ecuación diferencial de primer orden mediante un método de m pasos, la convertimos en una ecuación en diferencias de orden m , que tiene m soluciones. Si algunas de estas soluciones son exponenciales crecientes, el método será inestable.

Ejemplo: Demostrar la convergencia del método de Milne.

Las soluciones numéricas satisfacen

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3} (f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1})$$

mientras que las exactas

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-1}) + \frac{h}{3} (f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) + 4f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n-1}, y(x_{n-1}))) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta)$$

Tenemos

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) - y_{n+1} &= y(x_{n-1}) - y_{n-1} + \\ &\quad \frac{h}{3} [f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) - f_{n+1} + 4(f(x_n, y(x_n)) - f_n) + f(x_{n-1}, y(x_{n-1})) - f_{n-1}] \\ &\quad - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta) \end{aligned}$$

Si se cumple la condición Lipchitz

$$|f(x_n, y(x_n)) - f_n| \leq L |y(x_n) - y_n|$$

tenemos

$$\begin{aligned} |y(x_{n+1}) - y_{n+1}| &\leq |y(x_{n-1}) - y_{n-1}| + \frac{h}{3} (L |y(x_{n+1}) - y_{n+1}| + 4L |y(x_n) - y_n| + L |y(x_{n-1}) - y_{n-1}|) \\ &\quad + \frac{h^5}{90} |f^{(4)}(\eta)| \end{aligned}$$

con lo cual

$$\left(1 - \frac{hL}{3}\right) |y(x_{n+1}) - y_{n+1}| \leq \left(1 + \frac{hL}{3}\right) |y(x_{n-1}) - y_{n-1}| + \frac{4hL}{3} |y(x_n) - y_n| + \frac{h^5}{90} M$$

donde $\left|f^{(4)}(\eta)\right| \leq M$. Esta es una ecuación en diferencias, con ecuación característica de la ecuación homogénea

$$\left(1 - \frac{hL}{3}\right)z^2 + \frac{4hL}{3}z - \left(1 + \frac{hL}{3}\right) = 0$$

cuyas raíces son

$$\begin{aligned} z_1 &= 1 + hL + O(h^2) \\ z_2 &= -1 + \frac{hL}{3} + O(h^2) \end{aligned}$$

La ecuación no homogénea tiene la solución coonstante

$$z = -\frac{h^4 M}{180L}$$

por lo que la solución general de los errores es

$$|y(x_n) - y_n| = c_1 z_1^k + c_2 z_2^k - \frac{h^4 M}{180L}$$

Como

$$y(x_0) = y_0$$

$$c_1 + c_2 = \frac{h^4 M}{180L}$$

Si el error en el primer término es $|y(x_1) - y_1| = \delta$, se cumple

$$c_1 - c_2 - \frac{h^4 M}{180L} = \delta$$

$$c_1 = \frac{h^4 M}{180L} + \frac{\delta}{2}$$

$$c_2 = -\frac{\delta}{2}$$

$$|y(x_n) - y_n| \leq c_1 z_1^k \left(1 + \frac{c_2 z_2^k}{c_1 z_1^k}\right) - \frac{h^4 M}{180L} \leq \left(\delta + \frac{h^4 M}{180L}\right) z_1^k - \frac{h^4 M}{180L}$$

Esta cantidad tiende a 0 cuando h tiende a 0 si $\delta = O(h)$, lo que ocurre siempre que se tome un método adecuado para determinar y_1 . Por lo tanto el método es convergente.

Ejercicio: Demostrar la estabilidad del método de Milne

Suponemos una ecuación diferencial

$$y' = Ay$$

con lo que obtenemos la ecuación en diferencias

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = y(x_{n-1}) - y_{n-1} + \frac{hA}{3} (y(x_{n+1}) - y_{n+1} + 4(y(x_n) - y_n) + (y(x_{n-1}) - y_{n-1})) + \frac{h^5}{90} |f^{(4)}(\eta)|$$

$$\Delta_{n+1} = \Delta_{n-1} + \frac{hA}{3} (\Delta_{n+1} + 4\Delta_n + \Delta_{n-1}) + \frac{h^5}{90} |f^{(4)}(\eta)|$$

Despreciando el error de truncado tenemos las raíces

$$z_1 = 1 + hA + O(h^2)$$

$$z_2 = -1 + \frac{hA}{3} + O(h^2)$$

Si suponemos un error inicial Δ_0 , $c_2 = \Delta_0 - c_1$, con lo que tenemos

$$\Delta_n = c_1 (1 + hA)^n + (\Delta_0 - c_1) \left(-1 + \frac{hA}{3}\right)^n \simeq c_1 e^{nhA} + (-1)^k (\Delta_0 - c_1) e^{-\frac{nhA}{3}}$$

Como la solución exacta es

$$y(x_n) = e^{nhA}$$

tenemos para el error relativo de la solución

$$r_n = \frac{\Delta_n}{y(x_n)} \simeq c_1 + (-1)^k (\Delta_0 - c_1) e^{-\frac{4nhA}{3}}$$

Vemos por lo tanto que, si $A > 0$, el método es estable, ya que el error relativo permanece acotado, y que si $A < 0$ el método es inestable ya que el error relativo aumenta indefinidamente.

8.10. Elección del método de integración

Hay diversos puntos a considerar a la hora de elegir un método de integración: volumen de cálculo para una precisión dada, control de errores y estimación del error, estabilidad, posibilidad de cambiar el paso de integración, y error de truncado. El volumen de cálculo necesario es esencialmente debido al cálculo de las diversas funciones que aparecen en el método, por lo que minimizar el número de funciones calculadas es esencial.

En los métodos de un paso (Taylor y Runge-Kutta) se puede cambiar fácilmente el paso de integración y son estables. Por otro lado, la estimación del error es difícil salvo en los métodos de Runge-Kutta de orden superior que contienen otro inferior. El método de Taylor es difícil de programar y requiere el cálculo de muchas derivadas. Ambos métodos tienen excelentes errores de truncado. Además no necesitan utilizar otro método para determinar valores de comienzo, pues utilizan tantos puntos de partida como condiciones iniciales.

Los métodos explícitos e implícitos de orden m requieren valores de comienzo en m puntos. Estos valores de comienzo deben de ser calculados por otro método, en general un método de

Runge-Kutta del mismo orden. No permiten el cambio del paso de integración de forma sencilla, aunque se puede realizar mediante fórmulas especiales. Los métodos explícitos no permiten estimar el error cometido y tienen un error de truncado incierto debido a la extrapolación, mientras que los métodos implícitos tienen un excelente error de truncado. Tanto métodos explícitos e implícitos requieren pocas evaluaciones, una sólo en el caso de los métodos explícitos, y unas tres en los métodos predictor-corrector, que es menor que el esfuerzo numérico necesario en el método RK4 y la mitad que en el método RK5. Los métodos predictor-corrector permiten adicionalmente estimar el error cometido. Si el volumen de cálculo es un factor decisivo, los métodos explícitos o los métodos implícitos del tipo predictor corrector son una posibilidad a considerar. Si las condiciones no cambian mucho de un problema a otro, de forma que conocemos el error cometido y no hace falta cambiar el paso de integración, los métodos explícitos son aconsejables, pues requieren mucho menor volumen de cálculo. Esto ocurre, por ejemplo, cuando realizamos cálculos comparativos con muchos potenciales similares, en los que varían sólo en los valores de algunos parámetros que cambian ligeramente la forma del potencial.

8.11. Ejercicios

1. Considérese la ecuación de movimiento

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^2$$

con las condiciones iniciales $x(t=0) = 0$ y $v(t=0) = 10$. Determínese la posición y la velocidad para $t = 1$ mediante el método de Euler y con paso $h = 0,2$.

2. Considérese la ecuación diferencial

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{\sqrt{1-t^4}}$$

con la condición de contorno $y(0)=0$. Intégrese esta ecuación diferencial hasta $t = 0,5$ con pasos de integración $\Delta t = 0,1$, usando el método de Euler. Compárese el resultado con la evaluación numérica de la integral

$$y(0,5) = \int_0^{0,5} \frac{dt}{\sqrt{1-t^4}}$$

con la regla trapezoidal con paso $h = 0,1$.

3. La trayectoria de un móvil a lo largo de una línea recta viene descrita por la ecuación

$$\frac{d^2x}{dt^2} = x^2$$

partiendo del punto $x = 1$ con velocidad inicial $v = 1$ ¿Cuánto tiempo transcurrirá hasta que el móvil llegue al punto $x = 2$? Utilícese el método de Euler con pasos $\Delta x = 0,2$.

4. Una partícula de 1 Kg de masa se mueve partiendo del origen con una velocidad inicial de 10 m/s y está sometida a una fuerza dada por la expresión

$$F = \alpha x^2 - \beta v^2$$

con $\alpha = 1 \text{ N/m}^2$ y $\beta = 0,002 \text{ Kg/m}$.

- Escribese la ecuación diferencial que describe el movimiento.
 - Transfórmese en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer grado.
 - Escribanse las fórmulas de integración para el método de Euler.
 - Determinése la posición, velocidad y aceleración en $t = 0,5$ con paso $h = 0,1$, sabiendo que las condiciones iniciales son $x(0) = 0$ y $v(0) = 10$.
5. Considérese la ecuación diferencial $y' = y$ con la condición de contorno $y(0) = -9$. Calcular el valor de $y(1)$ usando el método del punto medio, con dos y cuatro subdivisiones del intervalo. Realizar a continuación la extrapolación de Richardson para obtener el mejor valor. Comparar con la solución analítica de la ecuación diferencial.
6. Dada la ecuación diferencial

$$\frac{d^2x}{dt^2} = t^2$$

con las condiciones de contorno para $t = 1$

$$\begin{aligned} x(1) &= \frac{4}{3} \\ \frac{dx(1)}{dt} &= \frac{8}{3} \end{aligned}$$

llevar a cabo un paso de integración de valor $h = 0,1$ usando el método de Euler y el método predictor corrector.

Problemas con ordenador

1. Un modelo de gran importancia en dinámica no lineal y Caos es el modelo de Hopf. En coordenadas polares este modelo se escribe

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= \lambda r - r^2 \\ \frac{d\theta}{dt} &= \omega \end{aligned}$$

Este modelo tiene solución analítica

$$\frac{dr}{\lambda r - r^2} = dr \left(\frac{1}{\lambda r} - \frac{1}{2\lambda(\sqrt{\lambda} + r)} + \frac{1}{2\lambda(\sqrt{\lambda} - r)} \right) = dt$$

que tiene como integral

$$\frac{1}{\lambda} \ln \left(r \sqrt{\frac{\lambda - r_0^2}{\lambda - r^2}} \right) = t - t_0$$

que da

$$r^2 = \frac{\lambda \exp(-\lambda t_0) \exp(\lambda t)}{(\lambda - r_0^2) \left(1 + \frac{\exp(-\lambda t_0)}{\lambda - r_0^2} \exp(\lambda t) \right)}$$

la integral angular es

$$\theta = \theta_0 + \omega(t - t_0)$$

por lo que vemos que produce espirales que tienden a círculos límite de radio $r = \sqrt{\lambda}$. Demostrar que las ecuaciones en coordenadas cartesianas son:

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= \lambda r - r^2 \\ \frac{d\theta}{dt} &= \omega \end{aligned}$$

Resolverlas por RK4 adaptativo y estudiar la variación del paso de integración para diferentes condiciones iniciales.

2. Oscilador de Van der Pool
3. Ecuaciones de Lorentz
4. Lotka Volterra
5. La ecuación de Mathieu viene dada por

$$y''(x) + (a - 2q \cos 2x)y = 0$$