4. Interpolación y Aproximación

- sen x para la cual nos sirve la misma cota que en el caso anterior. La cota del error es

$$\frac{2M}{6!} \left(\frac{1}{4}\right)^6 = \frac{M}{90 \times 4^7} = \frac{0.84147}{1474560} = \boxed{0.000000571}.$$

Capítulo 5

Resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias

Las ecuaciones iferenciales ordinarias (esto es, las que no contienen derivadas parciales) de orden superior siempre se pueden reducir a sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. Para hacer esto no hay más que dar nombre a las sucesivas derivadas de la incógnita (por ejemplo, u(x) = f'(x), v(x) = f''(x), w(x) = f'''(x), etc.), de forma que la derivada más alta pasa a ser una derivada primera. Después sólo queda expresar estas igualdades en términos de derivadas primeras solamente (es decir: u(x) = f'(x), v(x) = u'(x), w(x) = v'(x), etc.), y utilizar esos nombres en lugar de las correspondientes derivadas de la incógnita en la ecuación dada. Así, una ecuación tal como

$$2(y'')^2 - 5\operatorname{sen}(y') + xyy''' = 0$$

se sustituiria por el sistema

$$2v^{2} - 5 \operatorname{sen} u + xyv' = 0$$
$$u = y'$$
$$v = u'$$

Esto justifica la suficiencia de estudiar los métodos de resolución de ecuaciones de primer orden. En este curso nos limitaremos a los métodos

de resolución de una sola ecuación diferenciable de primer orden, pero se debe comprender que éstos se pueden adaptar fácilmente a la resolución de sistemas.

Una importante cuestión asociada con los problemas de ecuaciones diferenciales es la relativa a las condiciones de contorno. Los métodos de resolución dependen fuertemente de si estas condiciones se imponen en un único punto (problemas de valores iniciales) o en varios puntos (problemas de valores en la frontera). En este tema estudiaremos principalmente las nociones fundamentales de los métodos numéricos para problemas de valores iniciales, dedicando al final una breve sección a las ideas generales de tres tipos de métodos elementales para problemas de valores en la frontera (el de las diferencias finitas, el de disparo y los de colocación).

5.1 Problemas de valores iniciales

El problema de valores iniciales para las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden consiste en evaluar en un intervalo dado [a, b] funciones y(x) que verifican

$$y'(x) = f(x, y(x)), y(x_0) = y_0 (5.1)$$

donde f es una función real de dos variables reales. Obsérvese que la solución de (5.1) tiene la propiedad

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(t, y(t)) dt, \qquad (5.2)$$

expresión que debe considerarse como una formulación equivalente del problema de valores iniciales (5.1). En lo que sigue supondremos $x_0 = a$.

5.1.1 El algoritmo de Euler

El método numérico más sencillo para resolver un problema de valores iniciales como (5.1) es el algoritmo de Euler. Éste se basa en la fórmula

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{1}{2}h^2y''(\xi)$$

en base a la cual, elegido un número h suficientemente pequeño como para que h^2 sea despreciable, formamos las sucesiones

$$x_{i+1} = x_i + h$$
, $y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i)$. (5.3)

Esto se puede conseguir mediante el siguiente algoritmo

Algoritmo de Euler

Datos: x_0 , b (extremos del intervalo), h (longitud del paso), y_0 (valor inicial).

1
$$y_0 = y_0 + hf(x_0, y_0)$$
; $x_0 = x_0 + h$;

Imprimir x_0 , y_0 ;

Si $x_0 < b$ entonces ir al paso 1;

Stop.

Para poder hacer un uso eficaz de un método numérico como éste, es necesario calcular también la cota del error que se comete en cada paso. Esto puede hacerse de varias maneras, dependiendo de la cantidad que queramos tomar como indicativa del error. El error en que quizás se piense primero es la diferencia $y(x_i) - y_i$ entre el valor exacto de la función incógnita en cada nodo y el valor estimado en ese nodo. Esta cantidad se llama *error global*. Es sencillo demostrar que para el método de Euler,

Ejercicio 5.1

Supongamos que aplicamos el método de Euler al problema (5.1) y que f(x, y) y $f_y = \partial f/\partial y$ son funciones continuas en el rectángulo $x_0 < x < b$, c < y < d y la solución de (5.1) satisface para todo $x_0 < x < b$ que c < y(x) < d. Si M es una cota superior de |y''| y L una cota superior de $f_y(x, y(x))$ en $x_0 < x < b$ entonces la sucesión de errores globales, $E_k = |y(x_k) - y_k|$, satisface:

$$E_{k+1} \le (1 + hL)E_k + \frac{1}{2}Mh^2$$

Para el método de Euler el error global tiene una cota superior dada por el siguiente teorema:

Teorema 28 Si f(x, y) y $f_y = \partial f/\partial y$ son funciones continuas en el rectángulo $x_0 < x < b$, c < y < d y la solución de (5.1) satisface para todo

 $x_0 < x < b$ que c < y(x) < d entonces el error global en la sucesión y_n de (5.3) tiene la siguiente cota superior en valor absoluto,

$$E_n = |y(x_n) - y_n| < \frac{M}{2L}h((1 + hL)^n - 1) \approx \frac{M}{2L}h(e^{(x_n - x_0)L} - 1)$$

donde M es una cota superior de |y''| y L una cota superior de $f_y(x, y(x))$ en $x_0 < x < x_n$.

5.1.2 Métodos de Taylor

Los problemas asociados con el algoritmo de Euler sugieren llevar más lejos la aproximación mediante serie de Taylor

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{1}{2}h^2y''(x) + \frac{1}{3!}h^3y'''(x) + \cdots$$
 (5.4)

Si esta aproximación tiene una aplicación práctica a la resolución de (5.1) esto es debido a que (suponiendo que f es suficientemente diferenciable) todas las derivadas de y(x) pueden calcularse en términos de f y sus derivadas parciales. Por ejemplo, diferenciando y'(x) = f(x, y(x)) se obtiene $y''(x) = f_x + ff_y$. Así obtenemos una nueva función de dos variables

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

que, al igual que ocurre con f(x, y) respecto de y'(x), para cada $x, y''(x) = f^{(1)}(x, y(x))$ Análogamente,

Ejercicio 5.2

Demostrar (suponiendo que f pueda diferenciarse tanto como sea necesario) que si y'(x) = f(x, y(x)) y definimos

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

entonces

$$y'''(x) = f^{(2)}(x, y(x))$$

$$= f_{xx}(x, y(x)) + 2f(x, y(x))f_{xy}(x, y(x)) + f^{2}(x, y(x))f_{yy}(x, y(x))$$

$$+ f_{x}(x, y(x))f_{y}(x, y(x)) + f(x, y(x))(f_{y}(x, y(x)))^{2}.$$

Si definimos el "polinomio de Taylor de orden p" asociado a f mediante

$$T_p(x, y, h) = f(x, y) + \frac{h}{2!} f^{(1)}(x, y) + \dots + \frac{h^{p-1}}{p!} f^{(p-1)}(x, y);$$

entonces (5.4) se reduce a

5.1. Problemas de valores iniciales

$$y(x_1) = y_0 + hT_p(x_0, y_0, h) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(\xi)$$

y en general, para $x_k = x_0 + kh$, definimos el algoritmo de Taylor de orden p mediante

$$y(x_{k+1}) = y_k + hT_p(x_k, y_k, h),$$
 con $y_0 = y(x_0).$

Ejercicio 5.3

Demostrar que el algoritmo de Taylor de orden 1 es precisamente el algoritmo de Euler.

En la práctica, por su complicación, no se usan los algoritmos de Taylor de orden superior al 2. Pero es útil conocer en detalle el caso de orden dos. En este caso tenemos

$$y(x_{k+1}) = y_k + hT_2(x_k, y_k, h)$$

= $y_k + h \Big(f(x_k, y_k) + \frac{h}{2!} \Big(f_x(x_k, y_k) + f(x_k, y_k) f_y(x_k, y_k) \Big) \Big)$

lo cual da lugar al siguiente algoritmo:

Algoritmo de Taylor de orden 2

Datos: x_0 , b (extremos del intervalo), h (longitud del paso), y_0 (valor inicial). Funciones predefinidas: f(x, y), $f_x(x, y)$, $f_y(x, y)$.

1
$$f_0 = f(x_0, y_0)$$
; $f_1 = f_x(x_0, y_0) + f_0 f_y(x_0, y_0)$; $T_2 + f_0 + 0.5 h f_1$; $y_0 = y_0 + h T_2$; $x_0 = x_0 + h$; Imprimir x_0, y_0 ; Si $x_0 < b$ entonces ir al paso 1;

Stop.

La principal ventaja de los métodos de Taylor es su potencial para obtener una precisión muy alta en los resultados sin necesidad de utilizar un

número demasiado grande de pasos (es decir, sin necesidad de elegir un paso de longitud excesivamente pequeña). Pero, por otro lado, para alcanzar esa precisión es necesario disponer de las derivadas parciales de f, el cálculo de las cuales pueden requerir un gran número de operaciones. Éste

es uno de los inconvenientes de estos métodos. Otro inconveniente más serio es la necesidad de llevar a cabo el trabajo preliminar de análisis (cálculo de las derivadas) y programación (para la evaluación de dichas derivadas).

Este inconveniente puede resolverse hoy día (al menos para cierta clase de funciones) mediante el uso de programas de cálculo simbólico que automatizan el cálculo de derivadas de expresiones complejas. Algunos de estos programas se encuentran disponibles en calculadoras simbólicas modernas

tales como la HP48 de *Hewlett-Packard*.

A pesar de lo dicho, los métodos de Taylor rara vez se usan en la práctica. Su principal interés es de tipo teórico porque la mayoría de los métodos prácticos intentan alcanzar la misma precisión que un método de Taylor del mismo orden sin la desventaja de tener que calcular las derivadas superiores. Esto nos lleva a los métodos de Runge-Kutta.

5.1.3 Métodos de Runge-Kutta

Según lo dicho más arriba, la motivación principal de los métodos de Runge-Kutta es el intento de imitar la precisión de los métodos de Taylor evitando realizar las derivadas de orden superior de la función f. La forma más sencilla e intuitiva de introducir los métodos de Runge-Kutta es comenzar con el caso particular conocido como *método de Heun* ((28), p. 515, (9), p. 541) o *método de Euler mejorado* ((38), p. 421), el cual puede plantearse como un método de aceleración del método de Euler.

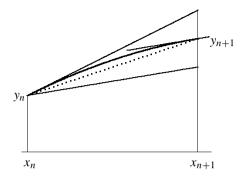
Consideremos la siguiente idea: el valor de $f(x_n, y_n)$ aproxima la pendiente de y(x) en x_n y esto nos permite estimar y_{n+1} como $y_n + hf(x_n, y_n)$. Pero al disponer de este valor estimado podemos usarlo a su vez para estimar la pendiente de y(x) en x_{n+1} como

$$y'(x_{n+1}) \approx f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

y a partir de esta estimación realizar una corrección en y_{n+1} , recalculándolo en base a los valores estimados de las pendientes en x_n y en x_{n+1} y aproximando y(x) en $[x_n, x_n + h]$ por una parábola. De esta forma se obtiene el

algoritmo del método de Heun,

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



Es interesante también observar que el valor final de la pendiente en x_{n+1} es la media aritmética de las pendientes $f(x_n, y_n)$ y $f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))$ inicialmente estimadas en x_n y x_{n+1} . Esto no debe sorprender porque la pendiente de la parábola varía linealmente.

La idea general de los métodos de Runge-Kutta de orden 2, es utilizar una fórmula de iteración de la forma:

$$y_{n+1} = y_n + h \Big(a_1 f(x_n, y_n) + a_2 f(x_n + b_1 h, y_n + b_2 h f(x_n, y_n)) \Big)$$

donde las constantes a_1 , a_2 , b_1 , b_2 han de determinarse de tal forma que

$$y_{n+1} = y_n + hT_2(x_n, y_n, h) + O(3)$$

Ejercicio 5.4

Demostrar que la restricción impuesta a las constantes a_1 , a_2 , b_1 , b_2 implica que éstas deben verificar $a_1 + a_2 = 1$, $a_2b_1 = \frac{1}{2}$, $a_2b_2 = \frac{1}{2}$ con $a_2 > 0$ y que por tanto un método de Runge-Kutta de orden 2 está determinado por la constante $a = a_2$ y tiene la forma

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

De esta forma general es inmediato ver que

Ejercicio 5.5

El método de Heun es el caso particular de los métodos de Runge-Kutta de orden 2 que se obtiene al tomar $a = \frac{1}{2}$ en la fórmula que aparece en el ejercicio (5.4).

Por otro lado, resulta interesante que el método original desarrollado por RUNGE hace más de un siglo (1895) era el caso particular para a=1. Este caso también se conoce con el nombre de *método de Euler modificado* y se reduce a la ecuación de iteración siguiente:

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

En la práctica de programación de los algoritmos de los métodos de Runge-Kutta es común y útil ordenar y efectuar los cálculos mediante las cantidades

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2a}h, y_n + \frac{1}{2a}k_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + (1-a)k_1 + ak_2$$

Estos cálculos se pueden implementar con el siguiente algoritmo:

Algoritmo de Runge-Kutta de orden 2

Datos: x_0 , b (extremos del intervalo), h (longitud del paso), y_0 (valor inicial), c (constante del método, Runge-Kutta original es $c = \frac{1}{2}a = \frac{1}{2}$). Función predefinida: f(x, y).

1
$$k_1 = hf(x_n, y_n);$$

 $k_2 = hf(x_n + ch, y_n + ck_1) - k_1;$
 $y_0 = y_0 + k_1 + 2ck_2; x_0 = x_0 + h;$
Imprimir $x_0, y_0;$
Si $x_0 < b$ entonces ir al paso 1;
Stop.

A continuación explicamos la forma de obtener métodos de Runge-Kutta de órdenes superiores por un método análogo al utilizado para obtener la fórmula general de los métodos de orden 2. Sin entrar en los detalles de cálculo, el método usual de orden 4 (utilizado por KUTTA en 1905), es el siguiente,

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

donde

5.1. Problemas de valores iniciales

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$

$$k_3 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3).$$

Este método requiere cuatro evaluaciones de la derivada y'(x) en cada paso de iteración, frente a las dos evaluaciones necesarias con los métodos de orden 2. Puesto que el orden de exactitud de este método es mayor que el de aquél, lo dicho significa que el método será superior si podemos usar un paso de longitud *al menos doble* que el necesario en el método de orden 2 para obtener la misma precisión. Este es importante para evitar caer en la creencia ciega en la superioridad del método de Runge-Kutta de cuarto orden frente al de segundo orden. Ciertamente el método de cuarto orden es superior en la mayoría de los casos, pero no es una propiedad del método sino de los problemas a los que se suele aplicar. Igual comentario puede hacerse sobre la superioridad del método de cuarto orden frente a los de orden superior. ((39), p.604.)

5.1.4 Error local y paso variable

Una consideración que debe quedar clara respecto al uso de los métodos de Runge-Kutta es la referente al tamaño del paso empleado en cada iteración, es decir, el hecho de que no hay razón por la cual se deba mantener fija la longitud h del paso. Hecha esta consideración se abre la posibilidad de ajustar el paso de cada iteración al error máximo que se quiere tolerar. Esto nos llevará a la cuestión de estimar el error local (ver CONTE y DE BOOR (14), p. 366).

Nos limitaremos a uno de los métodos conocidos de estimación del error local, a saber, el que se basa en dividir los intervalos en dos partes iguales. Explicaremos la idea de este método suponiendo que utilizamos un método de Runge-Kutta de orden p e indicando que el caso más corriente es p = 4. La idea es muy sencilla: integrar una vez de x_n a $x_{n+1} = x_n + h$

y después hacer dos integraciones de paso h/2 a partir de x_n . De esta forma se obtienen dos estimaciones $y_h(x_{n+1})$ e $y_{h/2}(x_{n+1})$ mediante cuya comparación podemos estimar el error local como

$$D_n = \frac{|y_{h/2}(x_{n+1}) - y_h(x_{n+1})|}{2^p - 1}.$$

Ahora podemos describir la forma de controlar el paso. Para ello es necesario fijar una tolerancia de error local, ϵ , con la cual limitaremos el error local *por unidad de paso*, es decir: $D_n \leq h\epsilon$. A partir de la tolerancia de error local calcularemos la cota inferior del error local $\epsilon' = \epsilon/2^{p+1}$, por debajo de la cual consideraremos que la precisión es excesiva. Con esto establecemos el siguiente criterio de actuación:

- (a) Si $\epsilon' < \frac{D_n}{h} < \epsilon$ nos quedamos con el valor obtenido de $y_{h/2}(x_{n+1})$ y continuamos integrando a partir de x_{n+1} con el mismo paso h.
- (b) Si $\epsilon < \frac{D_n}{h}$ reducimos h a la mitad y repetimos los cálculos desde x_n .
- (c) Si $\frac{D_n}{h} < \epsilon'$ nos quedamos con $y_{h/2}(x_{n+1})$ pero cambiamos h al doble antes de seguir integrando a partir de x_{n+1} .

5.1.5 Métodos de paso múltiple

La idea de los métodos de paso múltiple es muy simple y natural. Para introducir un caso sencillo que ilustre la idea general utilizaremos la fórmula siguiente

Ejercicio 5.6

Si y es una función con derivada tercera continua, entonces para algún $\xi \in (a-h,a+h)$

$$y'(a) = \frac{y(a+h) - y(a-h)}{2h} + \frac{1}{6}h^2y'''(\xi)$$

a partir de la cual es sencillo deducir el método

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

El error local de truncación en este método es de la forma $\tau_{n+1}(h) = \frac{1}{3}y'''(\xi_n)h^2$ y por tanto es un método de segundo orden. Compararemos este método con los métodos de Runge-Kutta de orden 2, destacando la ventaja que aquí tenemos por la gran simplicidad de los cálculos.

5.1. Problemas de valores iniciales

A continuación introduciremos la idea de utilizar la información dada por los puntos ya calculados, $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$, para aproximar f(x, y(x)) mediante interpolación en algunos de dichos puntos (los m últimos) y usar esta aproximación en la versión integral,

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

de nuestra ecuación diferencial. Así, llegamos a las fórmulas de Adams-Bashforth. Éstas se pueden escribir bien en términos de diferencias o en términos de ordenadas, de las cuales preferiremos la segunda forma. Así, en el caso m=3 obtendremos la fórmula (usando la abreviación $f_n=f(x_n,y_n)$)

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

cuya fórmula del error local se deduce integrando la fórmula del error de interpolación y da

$$E = h^4 y^{(5)}(\xi) \frac{251}{720}.$$

Otras fórmulas de paso múltiple se deducen de la misma idea aplicada a la integración de f(x, y(x)) en intervalos distintos del $[x_n, x_{n+1}]$, por ejemplo, integrando desde x_{n-1} hasta x_{n+1} . En general, estas fórmulas se obtienen integrando desde x_{n-p} hasta x_{n+1} para algún valor de $p \in \{0, \ldots, n\}$. Así se obtienen, por ejemplo (casos m = 1, p = 1 y m = 3, p = 3) las fórmulas

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n),$$
 $E = \frac{1}{3}y'''(\xi)h^2$
 $y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4}{3}h(f_n - f_{n-1} + 2f_{n-2}),$ $E = \frac{14}{45}y^{(5)}(\xi)h^4$

entre las cuales reconocemos las del método presentado al principio de este apartado.

Por último mencionaremos una dificultad de que adolecen las fórmulas de paso múltiple: requieren conocer varios valores iniciales de la función f(x, y(x)) para poder comenzar los cálculos. Estos valores iniciales deben ser provistos por otro método, y es necesario asegurarse de que son suficientemente precisos para la precisión total requerida.

5.1.6 Sistemas de ecuaciones

En este apartado indicaremos brevemente la forma de adaptar los métodos que hemos estudiado al caso de sistemas de ecuaciones. Para ello estudiaremos en detalle la reformulación de los métodos de Euler y de Heun para los sistemas que provienen de problemas de valores iniciales para una ecuación de segundo orden, es decir, para problemas de la forma

$$y'_1 = y_2,$$
 $y_1(a) = A$
 $y'_2 = f(x, y_1(x), y_2(x)),$ $y_2(a) = B$

que serán utilizados en la siguiente sección.

5.2 Problemas de valores en la frontera

5.2.1 Métodos de tiro o disparo

Comenzamos esta sección recordando la forma general de los problemas unidimensionales de valores en la frontera, y cómo se reducen a un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden. Explicaremos las dificultades inherentes a los problemas de valores en la frontera dando una idea general del procedimiento a seguir en los métodos de disparo. En especial indicaremos la necesidad de utilizar una versión multidimensional de algún método de resolución numérica de ecuaciones no-lineales tal como (por ejemplo) el método de la secante o el de Newton-Raphson.

A continuación indicaremos el tipo particular de problema con que ilustraremos los métodos de resolución de disparo, asegurándonos de que el alumno comprenda la posibilidad de modificar los métodos explicados para aplicarlos a problemas más generales.

El problema particular que estudiaremos es el problema de segundo orden de dos puntos frontera, es decir el problema de evaluar una función y(x) que satisface

$$y''(x) = f(x, y(x), y'(x)), y(a) = A, y(b) = B$$

que reformularemos como el sistema

$$y'_1 = y_2,$$
 $y_1(a) = A$
 $y'_2 = f(x, y_1(x), y_2(x)),$ $y_1(b) = B.$

Para explicar conceptualmente el proceso de resolución del método del disparo plantearemos considerar una función $T: \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ que a cada número real α (quizás restringido a cierto dominio) le asocia el valor en b de la función y_1 solución del sistema

$$y'_1 = y_2,$$
 $y_1(a) = A$
 $y'_2 = f(x, y_1(x), y_2(x)),$ $y_2(a) = \alpha,$

es decir, T es la función que se puede representar de la forma

$$\alpha \longrightarrow \begin{cases} y'_1 = y_2, & y_1(a) = A \\ y'_2 = f(x, y_1(x), y_2(x)), & y_2(a) = \alpha \end{cases} \xrightarrow{\text{R-K}} y_1(b)$$

Nuestro problema es equivalente al de hallar el número α tal que

$$T(\alpha) = B$$
.

Este problema lo resolvemos por alguno de los métodos de resolución numérica de ecuaciones no lineales, por ejemplo por el método de la secante. Con ese método tenemos que realizar las iteraciones

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n - \frac{(T(\alpha_n) - B)(\alpha_n - \alpha_{n-1})}{T(\alpha_n) - T(\alpha_{n-1})}$$

en cada una de las cuales hay que realizar una nueva evaluación de T, lo que significa una aplicación de un método numérico para problemas de valores iniciales tal como, por ejemplo, el usual de Runge-Kutta de cuarto orden.

Para terminar este apartado sobre métodos de disparo comentaremos brevemente la variante llamada del *disparo a un punto intermedio*, que resulta necesaria cuando el problema es de tal naturaleza o la estimación inicial α_0 está tan apartada de su valor correcto que los "disparos" iniciales no son capaces de atravesar todo el dominio de integración. En estos casos, y en aquellos en que los extremos del intervalo de integración son puntos singulares de la ecuación diferencial de partida, suele ser ventajoso, en lugar de integrar desde un extremo del intervalo [a, b] hasta el otro, elegir un punto intermedio x_0 y realizar dos integraciones, una desde a hasta a_0 y otro desde a hasta a_0 . En lugar de la ecuación no lineal a resolver que teníamos antes a0, ahora tendremos (en el caso unidimensional

de segundo orden que hemos tomado como ejemplo) un sistema de dos ecuaciones no lineales de la forma

$$T_a(\alpha) = T_b(\beta)$$

$$S_a(\alpha) = S_b(\beta)$$

de las que la primera expresa la igualdad de los dos valores obtenidos para y(x) en x_0 y la segunda expresa la igualdad de los dos valores obtenidos para la derivada y'(x) en x_0 .

5.2.2 Problemas lineales: Método de las diferencias finitas

En este apartado explicaremos el método de las diferencias finitas para problemas lineales de valores en la frontera. De nuevo, nos restringiremos a problemas unidimensionales de segundo orden. Este caso lo usaremos para ilustrar el procedimiento general: elegir una *malla* de puntos ($x_0 = a$, con $x_n = x_0 + nh$, h = (b - a)/N) en el intervalo del problema y sustituir la ecuación diferencial por su aproximación mediante una ecuación en diferencias finitas resultante de sustituir las derivadas que aparecen en la ecuación diferencial por sus aproximaciones en términos de *diferencias centrales*, es decir, realizando las aproximaciones

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}$$

$$y''(x) \approx \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2}$$

$$y'''(x) \approx \frac{y(x+2h) - 3y(x+h) + 3y(x-h) - y(x-2h)}{h^3}$$
:

De esta forma pasamos del problema

$$y''(x) + f(x)y'(x) + g(x)y(x) = q(x),$$
 $y(a) = \alpha, y(b) = \beta$

a su aproximación en diferencias finitas, es decir, al sistema de N-1 ecuaciones lineales en N-1 incógnitas:

$$(1 - \frac{1}{2}hf_n)y_{n-1} + (-2 + h^2g_n)y_n + (1 + \frac{1}{2}hf_n)y_{n+1} = h^2g_n$$

donde n = 1, ..., N - 1.

Observaremos que la matriz de coeficientes de este sistema siempre resulta ser tridiagonal, con lo cual el sistema es susceptible de ser resuelto por los métodos especiales descritos en el tema de métodos numéricos para el álgebra lineal.

5.2.3 Métodos de colocación

Haremos una breve mención a los métodos de *colocación*, cuya idea general se aplica a cualquier ecuación funcional lineal

$$Ly = f$$

y por tanto a las ecuaciones diferenciales lineales.

La idea es muy sencilla. Se comienza eligiendo una malla de puntos que denotamos $a=x_0, x_1, \ldots, x_N, x_{N+1}=b$ y, además, se eligen N funciones básicas $\varphi_1, \ldots, \varphi_N$ que supuestamente sirven para aproximar la solución mediante una combinación lineal de la forma

$$y(x) \approx c_1 \varphi_1(x) + \cdots + \varphi_N(x).$$

Debido a la linealidad del operador L, la condición de que dicha aproximación sea *exacta* en los N puntos *interiores* de la malla (puntos de *colocación*) nos lleva a un sistema de N ecuaciones lineales en las N incógnitas c_1, \ldots, c_N . Además, si las condiciones de contorno son homogéneas, bastará elegir las funciones φ_i de forma que satisfagan dichas condiciones de contorno para que cualquier combinación lineal de ellas también las satisfaga. Esto hace que este método sea muy apropiado para los problemas de Sturm-Liouville con condiciones de contorno homogéneas.

Cuando las condiciones de contorno no son homogéneas tenemos que imponerlas sobre la combinación lineal $c_1\varphi_1(x)+\cdots+\varphi_N(x)$ y reducir correspondientemente el número de puntos de colocación para seguir teniendo un sistema determinado.

No insistiremos más en este método salvo para indicar que un conjunto de funciones básicas de gran utilidad nos las ofrecen las varillas flexibles (*splines*) adaptadas a las condiciones de contorno de nuestro problema. En particular son de interés las varillas flexibles cúbicas que hemos estudiado en un tema anterior.

Muy probablemente los problemas de contorno han aparecido ya en varias asignaturas de los tres primeros años de ingeniería. Los métodos para resolver estos problemas son en general muy distintos de los métodos para resolver problemas de valores iniciales, sin embargo estudiaremos aquí un método sencillo (llamado *método del disparo*) que reduce el problema de contorno a una serie de problemas de valores iniciales. Consiste este método en la búsqueda iterativa de condiciones iniciales tales que la solución determinada por ellas satisfaga las condiciones de contorno dadas.

5.2.4 Tratamiento Variacional

El método variacional o de la energía reduce la resolución de problemas elípticos de contorno a la de un problema variacional. Una clase de problemas unidimensionales que pueden tratarse por este método es la de aquellos que sean equivalentes a las ecuaciones del movimiento de un sistema mecánico en que las fuerzas que actúan provengan de una función de energía potencial V. Entonces se puede demostrar que existe una función lagrangiana L (la diferencia entre la energía cinética y la energía potencial) tal que el movimiento del sistema, para cualesquiera condiciones iniciales, minimiza la $acción \int L \, dt$, es decir, es la solución del problema variacional $\delta \int L \, dt = 0$. El teorema fundamental del cálculo de variaciones establece que una función x(t) da un valor extremo a una integral de la forma

$$\int_{t_1}^{t_2} L(x,\dot{x},t) \, dt,$$

si y sólo si es solución de la ecuación diferencial de Euler asociada al problema variacional:

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0.$$

Si x es un vector con n dimensiones se obtendrán n ecuaciones de Euler, pero los razonamientos son enteramente iguales al caso unidimensional en que concentraremos nuestra atención. Una clase bastante general de problemas a los que se pueden aplicar estos métodos son los que se expresan mediante una ecuación diferencial de la forma

$$\ddot{x} + f(t)x = g(t) \tag{5.5}$$

la cual puede obtenerse como ecuación de Euler de un problema variacional tomando como lagrangiana (entre otras posibles) la función $L(x, \dot{x}, t) =$

 $\dot{x}^2 - f(t)x^2 + 2g(t)x$. Una función lagrangiana que da lugar a problemas no lineales para $a \neq 0$ es $L(x, \dot{x}, t) = (ax + b)\dot{x}^2 - f(t)x^2 + 2g(t)x$.

Un método eficaz para la resolución numérica de problemas variacionales es el *método de los elementos finitos* que en realidad se aplica a casos de varias dimensiones (siendo t en la ecuación (5.5) un vector) pero cuya aplicación ilustraremos solamente en el caso unidimensional descrito.

5.2.5 Método de los elementos finitos

Para hallar numéricamente una función x(t) definida en el intervalo (t_1, t_2) que minimize la integral

$$I = \int_{t_1}^{t_2} (\dot{x}^2 - f(t)x^2 + 2g(t)x) dt$$

se procederá como sigue: Comenzamos dividiendo el intervalo de integración en subintervalos (o *elementos*, de donde el nombre del método). En cada elemento se aproxima la solución mediante una función polinómica de grado pre-especificado y los coeficientes de todos esos polinomios se someten a las condiciones de continuidad, diferenciabilidad y contorno apropiadas y se evalua en términos de ellos la integral *I*. Ésta resultará ser necesariamente una función lineal de los coeficientes y cuadrática en los valores que *x* toma en los nodos de los elementos. En consecuencia la condición de extremo de la integral conduce a un sistema de ecuaciones lineales con matriz de coeficientes simétrica y definida positiva. La solución de ese sistema será la solución aproximada de nuestra ecuación diferencial.

Respuestas a Algunos Ejercicios del Capítulo 5

Ejercicio 5.1 Ver Plybon, pp. 409–410.

Ejercicio 5.2

Ejercicio 5.3

Ejercicio 5.4 Ver Plybon, p. 420.

Ejercicio 5.5

Ejercicio 5.6 Si aplicamos la fórmula de Taylor de orden 2 con resto a y(a + h) y a y(a - h), y restamos, nos queda

$$y(a+h) - y(a-h) = 2hy'(a) + \frac{1}{3}h^3 \frac{y'''(\eta_1) + y'''(\eta_2)}{2}.$$

Pero la semisuma que aparece aquí es claramente (suponiendo y''' continua) igual a $y'''(\xi)$ para algún $\xi \in (a-h, a+h)$.

Bibliografía

- [1] Abramowitz and Stegun. *Handbook of Mathematical Functions, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, 1965.
- [2] Ireneo Peral Alonso. *Primer Curso de Ecuaciones en Derivadas Parciales*. Addison-Wesley Iberoamericana, S.A., 1995.
- [3] Larry C. Andrews. *Special Functions of Mathematics for Engineers*. McGraw-Hill, second edition, 1992.
- [4] Kendall E. Atkinson. *An introduction to Numerical Analysis*. John Wiley & Sons, 1978.
- [5] N. Bakhvalov. Métodos numéricos. Paraninfo, 1980.
- [6] Richard Barret and Others. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods.* SIAM, 1994.
- [7] Ronald N. Bracewell. *The Fourier Transform and its Applications*. McGraw-Hill, 2 edition, 1986.
- [8] Brice Carnahan, H. A. Luther, and James O. Wilkes. *Cálculo Numérico Métodos, Aplicaciones*. Editorial Rueda, Madrid, 1979.
- [9] Steven C. Chapra and Raymond P. Canale. *Métodos Numéricos para Ingenieros*. McGraw-Hill, 1985.
- [10] Ciarlet. Introduction a l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation. Masson, 1982.
- [11] P. G. Ciarlet and J. L. Lions, editors. *Handbook of Numerical Analysis*, volume I, II, III, IV. North-Holland, 1994.

- [12] A. M. Cohen, J. F. Cutts, R. Fielder, D. E. Jones, J. Ribbans, and E. Stuart. *Análisis Numérico*. Editorial Reverté, 1977.
- [13] S. D. Conte and C. De Boor. *Análisis Numérico Elemental*. Libros McGraw-Hill de Mexico, segunda edition, 1974.
- [14] Samuel Daniel Conte and Carl De Boor. Elementary Numerical Analysis. McGraw-Hill, third edition, 1981.
- [15] Crouzeix and Mignot. Analyse numérique des equations différentielles. Masson, 1983.
- [16] Dahlquist and Bjorck. Numerical Methods. Prentice-Hall, 1974.
- [17] Graham De Vahl Davis. *Numerical Methods in Engineering and Science*. Chapman and Hall, second edition, 1986.
- [18] Deuflhard and Hohmann. Numerical Analysis. Walter de Gruyter, 1995.
- [19] Forsythe, Malcom, and Moler. *Computer Methods for Mathematical Computations*. Prentice-Hall, 1977.
- [20] Gene Golub and James M. Ortega. *Scientific Computing. An introduction to Parallel Computing*. Academic Press, Inc., 1993.
- [21] Hämmerlin and Hoffmann. *Numerical Mathematics*. Springer UTM, 1991.
- [22] Peter Henrici. *Elements of Numerical Analysis*. John Wiley & Sons, 5 edition, 1964.
- [23] Nicholas J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. Siam, 1996.
- [24] Joe D. Hoffman. *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. McGraw-Hill, 1992.
- [25] Isaacson and Keller. Analysis of Numerical Methods. Wiley, 1966.
- [26] Eugene Jahnke and Fritz Emde. *Tables of Functions with formulae and curves*. Dover, 5 edition, 1945.
- [27] Jain, Iyengar, and Jain. *Numerical Methods for Scientific and Engineering Computation*. Wiley Eastern, 1993.

- [28] David Kinkaid and Ward Cheney. *Análisis Numérico*. Addison-Wesley Iberoamericana, 1994.
- [29] P. Lascaux and R. Theodor. *Analyse numérique matricielle appliquée a l'art de l'ingénieur*, volume 1. Masson, 1986.
- [30] Charles Van Loan. Computational Frameworks for the Fast Fourier Transform. SIAM, 1992.
- [31] Luenberger. Optimization by vector space methods. Wiley, 1969.
- [32] F. Marcellán, L. Casasús, and A. Zarzo. Ecuaciones Diferenciales. McGraw-Hill, Madrid, 1990.
- [33] John H. Mathews. *Métodos Numéricos para Matemáticas, Ciencia e Ingeniería*. Dover, 2 edition, 1945.
- [34] John H. Mathews. *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*. Prentice-Hall, second edition, 1992.
- [35] A. V. Oppenheim and A. S. Willski. *Señales y Sistemas*. Prentice-Hall Hispanoamericana, 1994. Traducido de la segunda edición inglesa.
- [36] Alan V. Oppenheim and Alan S. Willski. *Signals and Systems*. Prentice-Hall, second edition, 1983.
- [37] James M. Ortega. Numerical Analysis: a second course. SIAM, 1990.
- [38] Benjamin F. Plybon. An Introduction to Applied Numerical Analysis. PWS-KENT, 1992.
- [39] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipies in Fortran*. Cambridge University Press, second edition, 1994.
- [40] Robert W. Ramirez. The FFT Fundamentals and Concepts. Prentice-Hall, 1985.
- [41] H. R. Schwarz. *Numerical Analysis, A Comprehensive Introduction*. Wiley, 1989.
- [42] Murray R. Spiegel. *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*. Schaum's Outline Series in Mathematics. McGraw-Hill, 1968.

198 BIBLIOGRAFÍA

[43] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Texts in Applied Mathematics, 12. Springer TAM, 2 edition, 1993.

- [44] R. Theodor. *Initiation a l'Analyse numérique*. Masson, 2^{eme} edition, 1986.
- [45] John Todd. *Basic Numerical Mathematics*, volume 2 (Numerical Algebra) of *International Series in Numerical Mathematics*, 22. Academic Press, 1977.
- [46] John Todd. Basic Numerical Mathematics, volume 1 (Numerical Analysis) of International Series in Numerical Mathematics, 14. Academic Press, 1979.
- [47] William T. Vetterling, Saul A. Teukolsky, William H. Press, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipies Example Book [Fortran]*. Cambridge University Press, second edition, 1995.
- [48] Norbert Wiener. *The Fourier Integral and certain of its Applications*. Cambridge University Press, 1933.
- [49] Stephen Wolfram. *Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer*. Addison-Wesley, 3 edition, 1996.

Apéndice A

Ejercicios Complementarios

Ejercicio A.1

Para cada una de las funciones dadas abajo, comprobar que toma valores de signos opuestos en los extremos del intervalo [0, 1]. ¿Qué valor límite se obtiene al aplicar el algoritmo de la bisección? ¿Es ese valor un cero de f(x)?

$$f(x) = \frac{1}{3x - 1},$$
 $f(x) = \cos 10x.$

Ejercicio A.2

Prueba que la ecuación $e^x - 4x^2 = 0$ tiene una solución en el intervalo [4, 5] y otra en [0, 1]. ¿Qué relación hay entre las soluciones de dicha ecuación y las de $e^{x/2} - 2x = 0$? Supón que se quiere usar $g(x) = \frac{1}{2}e^{x/2}$ como función de iteración para hallar las soluciones de la primera ecuación.

- (a) Demuestra que, a menos que dé la casualidad de que x_0 sea ya el cero en [4, 5], las iteraciones de g no pueden converger a este cero.
- (b) Demuestra que si $x_0 \in [0, 1]$, entonces las iteraciones de g convergen al cero en [0, 1].
- (c) Halla una función de iteración que sirva para calcular el cero en [4, 5].