

Métodos Runge-Kutta

1. Introducción

El método lineal más sencillo que existe para la solución de la ecuación $y' = f(x, y)$ es la regla de Euler $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$, aunque su precisión es muy baja. Para alcanzar una precisión mayor, conservando al mismo tiempo la sencillez del método, debemos ir a métodos lineales de un mayor número de pasos. La pregunta ahora es: ¿podemos obtener un método más preciso de un solo paso a costa de sacrificar la linealidad?

En principio podemos hacerlo. Si la función $f(x, y)$ es infinitamente derivable, todo lo que tenemos que hacer es un desarrollo en serie de Taylor

$$y(x_n + h) = y(x_n) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(x_n) = y(x_n) + h \sum_{p=0}^{\infty} \frac{h^p}{p!} f^{(p)}(x, y(x_n)) \quad (1.1)$$

Entonces podríamos definir un método no lineal de un paso de la forma

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi_T(x_n, y_n; h) \quad (1.2)$$

siendo $\Phi_T(x, y; h)$ una truncación del desarrollo de Taylor (??) en un orden dado de h .

Pero $f(x, y)$ no tiene por qué ser infinitamente derivable. Incluso si lo fuera, para calcular $\Phi_T(x_n, y_n; h)$ necesitaríamos calcular

$$f'(x, y) = \frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} y' = f_x(x, y) + f_y(x, y)f(x, y) \equiv F \quad (1.3)$$

$$f''(x, y) = f_{xx} + f_{xy}y' + f_yF + f(f_{xy} + f_{yy}y') = f_yF + \underbrace{(f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2)}_G \equiv Ff_y + G \quad (1.4)$$

y el cálculo de $f'''(x, y)$ y derivadas superiores, necesario para llegar a altos órdenes de h , se hace enormemente complicado.

Una estrategia alternativa es buscar una aproximación $\Phi(x, y(x); h)$ que solo requiera evaluaciones de la función $f(x, y)$ en puntos de abscisas comprendidas entre x_n y $x_n + h$. Esto supone aprovechar la estructura local de la familia de curvas solución de la ecuación $y' = f(x, y)$ en las proximidades de cada punto y es lo que hacen los métodos Runge-Kutta.

Un método Runge-Kutta de R etapas tiene la forma siguiente

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n; h) = y_n + h \sum_{i=1}^R c_i k_i \quad (1.5)$$

siendo

$$k_i = f \left(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^R b_{ij} k_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, R. \quad (1.6)$$

con la condición

$$\sum_{j=1}^R b_{ij} = a_i, \quad i = 1, 2, \dots, R. \quad (1.7)$$

Una forma habitual de definir un método Runge-Kutta es dar los coeficientes en una tabla

$$\begin{array}{c|cccc}
 a_1 & b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1R} \\
 a_2 & b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2R} \\
 \vdots & \vdots & & & \vdots \\
 a_R & b_{R1} & b_{R2} & \dots & b_{RR} \\
 \hline
 & c_1 & c_2 & \dots & c_R
 \end{array} \quad (1.8)$$

Podemos ahora distinguir tres casos:

1) $b_{ij} = 0$ para $j \geq i$, $i = 1, 2, \dots, R$; es decir la matriz B de coeficientes solo tiene elementos no nulos por debajo de la diagonal. (Nótese que, por (1.7), $a_1 = b_{11} = 0$.)

En este caso cada uno de los k_i está dado explícitamente en términos de los k_j , $j = 1, 2, \dots, i-1$ anteriores. El método se denomina método Runge-Kutta explícito.

2) $b_{ij} = 0$, $j > i$, $j = 1, 2, \dots, R$; la matriz B es una matriz triangular inferior (con diagonal no nula).

En este caso, cada k_i depende de los k_j anteriores y de sí mismo, de modo que en cada etapa hay que resolver una ecuación implícita. El método se denomina método Runge-Kutta semi-implícito.

3) $b_{ij} \neq 0$ para algún $j > i$; la matriz B no es triangular inferior.

En este caso todas las k_i están acopladas y para obtenerlas hay que resolver un sistema de R ecuaciones con R funciones implícitas. El método se denomina método Runge-Kutta implícito.

2. Orden de un método. Error de truncatura

Definición: Un método Runge-Kutta es de orden p si $y(x+h) - y(x) - h\Phi(x, y(x); h) = O(h^{p+1})$.

La verdadera diferencia $y(x+h) - y(x)$ satisface

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = y'(x + \theta h) = f(x + \theta h, y(x + \theta h)) \quad \text{con} \quad 0 < \theta < 1$$

y llamando $\Delta(x, y(x); h)$ a esta función, obtenemos la definición equivalente

Definición: Un método Runge-Kutta es de orden p si $\Delta(x, y(x); h) - \Phi(x, y(x); h) = O(h^p)$.

Podemos escribir entonces esta diferencia en la forma

$$\Delta(x, y(x); h) - \Phi(x, y(x); h) = \Psi(x, y(x); h)h^p$$

Definición: Se define el error de truncatura local como

$$\begin{aligned}
 T_{n+1} &\equiv y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\Phi(x_n, y(x_n); h) = \\
 &= h [\Delta(x_n, y(x_n); h) - \Phi(x_n, y(x_n); h)] = \Psi(x_n, y(x_n))h^{p+1} + O(h^{p+2})
 \end{aligned} \quad (2.1)$$

El término $\Psi(x_n, y(x_n))h^{p+1}$ se denomina error principal de truncatura y la función $\Psi(x, y)$ se denomina función error principal.

Si $y(x_n) = y_n$, entonces $y(x_n) + h\Phi(x_n, y(x_n); h) = y_n + \Phi(x_n, y_n; h) = y_{n+1}$ y así

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$$

3. Consistencia

Definición: Un método Runge-Kutta es consistente si es de orden $p \geq 1$.

Desarrollando $\Phi(x, y; h)$ en potencias de h , el error de truncatura se puede escribir

$$\begin{aligned} y(h+h) - y(x) - h\Phi(x, y; h) &= hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \dots - h \left[\Phi(x, y; 0) + h \frac{\partial \Phi}{\partial h} + \dots \right] = \\ &= h[f(x, y) - \Phi(x, y)] + h^2 \left[\frac{f'(x, y)}{2} - \frac{\partial \Phi}{\partial h} \right] + O(h^3). \end{aligned}$$

Para que el método sea consistente se debe anular el término en h . Obtenemos así la definición equivalente

Definición: un método Runge-Kutta es consistente si $\Phi(x, y(x); 0) = f(x, y)$.

De (1.6) es evidente que para $h = 0$ todos los k_i son iguales a $f(x_n, y(x_n))$. Entonces

$$\sum_{i=1}^R c_i k_i = f(x_n, y(x_n)) \sum_{i=1}^R c_i$$

y la consistencia implica

$$f(x_n, y(x_n)) \sum_{i=1}^R c_i = f(x_n, y(x_n)) \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^R c_i = 1$$

Teorema: Sea $\Phi(x, y; h)$ lipschitziana $|\Phi(x, y^*; h) - \Phi(x, y; h)| \leq L|y^* - y|$. Entonces un método converge si y solo si es consistente.

Demostración:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\Delta(x_n, y(x_n); h) = y(x_n) + hf(x_n + \theta h, y(x_n + \theta h))$$

y la expresión para el método de Runge-Kutta es

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n; h)$$

Restando ambas expresiones y llamando $e_n = y_n - y(x_n)$

$$e_{n+1} = e_n + h[\Phi(x_n, y_n; h) - f(x_n + \theta h, y(x_n + \theta h))] \quad (3.1)$$

Es fácil acotar la expresión entre corchetes. Para ello sumamos y restamos $\Phi(x_n, y(x_n); h)$ y $\Phi(x_n, y(x_n); 0) = f(x_n, y(x_n))$ y buscamos cotas para cada diferencia parcial

$$\begin{aligned} \Phi(x_n, y_n; h) - \Phi(x_n, y(x_n); h) &\leq L|y_n - y(x_n)| = L|e_n| \\ +\Phi(x_n, y(x_n); h) - \Phi(x_n, y(x_n); 0) &\rightarrow \leq \zeta(h) \\ +f(x_n, y(x_n)) - f(x_n + \theta h, y(x_n + \theta h)) &\leq \chi(h) \end{aligned}$$

La primera diferencia está acotada por la condición de Lipschitz; la segunda y la tercera son de orden $O(h)$ por continuidad de Φ en h y de f en x . Finalmente

$$|e_{n+1}| \leq |e_n| + h[L|e_n| + \zeta(h) + \chi(h)] = (1 + hL)|e_n| + h[\zeta(h) + \chi(h)]$$

y por recurrencia

$$\begin{aligned} |e_{n+1}| &\leq (1 + hL)^2 |e_{n-1}| + h[\zeta(h) + \chi(h)][1 + (1 + hL)] \leq \dots \\ &\leq (1 + hL)^n |e_0| + h[\zeta(h) + \chi(h)] \frac{(1 + hL)^n - 1}{hL} \\ &\leq [\zeta(h) + \chi(h)] \left(\frac{e^{Lx} - 1}{L} \right) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Entonces

$$\lim_{h \rightarrow 0} |e_n| = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{h \rightarrow 0} y_n = y(x_n) \quad (3.3)$$

4. Construcción de métodos Runge-Kutta explícitos

Vamos a construir métodos Runge-Kutta hasta orden $p = 3$. Supongamos que $f(x, y)$ es suficientemente derivable. Entonces, el desarrollo de Taylor $\Phi_T(x, y; h)$ es de la forma

$$\Phi_T(x, y; h) = f(x, y) + \frac{1}{2}hF + \frac{1}{6}h^2(Ff_y + G) + O(h^3)$$

siendo F y G las funciones definidas en (1.3) e (1.4).

Ahora

$$k_1 = f(x, y)$$

Para obtener k_2 hacemos un desarrollo de Taylor en ambas variables y sustituimos en el mismo la expresión anterior para k_1 . Así

$$\begin{aligned} k_2 &= f(x + ha_2, y + ha_2k_1) = f(x, y) + ha_2f_x(x, y) + ha_2k_1f_y(x, y) + \\ &\quad + \frac{1}{2}(ha_2)^2(f_{xx} + 2k_1f_{xy} + k_1^2f_{yy}) + O(h^3) = \\ &= f + ha_2F + \frac{1}{2}(ha_2)^2G + O(h^3) \end{aligned}$$

De un modo análogo, para k_3 tenemos

$$\begin{aligned} k_3 &= f(x + ha_3, y + h(a_3 - b_{32})k_1 + hb_{32}k_2) = \\ &= f(x, y) + h\{a_3f_x(x, y) + [b_{31}k_1 + b_{32}k_2]f_y(x, y)\} + \\ &\quad + \frac{1}{2}h^2\{a_3^2f_{xx}(x, y) + 2a_3[b_{31}k_1 + b_{32}k_2]f_{xy}(x, y) + [b_{31}k_1 + b_{32}k_2]^2f_{yy}(x, y)\} + O(h^3) \\ &= f + ha_3F + h^2\left(a_2b_{32}Ff_y + \frac{1}{2}a_3^2G\right) + O(h^3) \end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned} \Delta(x, y; h) &= \sum_{r=1}^3 c_r k_r = (c_1 + c_2 + c_3)f + h(c_2a_2 + c_3a_3)F + \\ &\quad + \frac{1}{2}h^2(2c_3a_2b_{32}Ff_y + (c_2a_2^2 + c_3a_3^2)G) + O(h^3) \end{aligned} \quad (4.1)$$

A partir de (4.1) podemos construir métodos de una, dos y tres etapas.

$$1) R = 1; c_2 = c_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(x, y; h) = c_1f(x, y) + O(h^3).$$

Por consistencia $c_1 = 1$. Si $f(x, y)$ fuera infinitamente derivable, $\Delta(x, y; h)$ sería igual a $\Phi_T(x, y; h)$ hasta un orden muy alto en h . Entonces

$$\Phi(x, y; h) - \Delta(x, y; h) = f(x, y) + O(h^3) - \Phi_T(x, y; h) = \frac{1}{2}Fh + O(h^2)$$

Solo existe entonces un método de una etapa, que es de orden 1. Se trata simplemente del método de Euler.

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

Nótese que el error de truncatura es $\Psi(x, y)h^2 = (1/2)Fh^2 = (1/2)f'(x, y)h^2 = (1/2)y^{(2)}(x)h^2$, que evidentemente coincide con el obtenido considerando el método de Euler como un método de un paso.

2) $R = 2$; $c_3 = 0$.

Por consistencia $c_1 + c_2 = 1$. Si además hacemos $c_2 a_2 = 1/2$, obtenemos

$$\Phi(x, y; h) - \Delta(x, y; h) = \frac{h^2}{6} \underbrace{\left[F f_y + G \left(1 - \frac{3}{2} a_2 \right) \right]}_{\Psi(x, y)} \quad (4.2)$$

Para cada valor de a_2 existe un $c_2 = 1/2 a_2$ que garantiza que el orden es 2. Existe así una familia de métodos de dos etapas y orden 2 dependiente de un parámetro. Hay dos elecciones de a_2 especialmente útiles

2.i) $a_2 = 1/2 \Rightarrow c_2 = 1, c_1 = 0$. En forma de tabla (1.8)

0	
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
	0 1

Entonces

$$y_{n+1} - y_n = h f \left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n) \right) \quad (4.3)$$

que es el llamado método de Euler modificado.

2.ii) $a_2 = 1 \Rightarrow c_1 = c_2 = 1/2$. o en forma de tabla

0	
1	1
	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$

Ahora

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + h f(x_n, y_n))] \quad (4.4)$$

que es el llamado método de Euler mejorado.

3) $R = 3$

Por consistencia $c_1 + c_2 + c_3 = 1$. Para alcanzar orden 3, hay que satisfacer además las relaciones

$$c_2 a_2 + c_3 a_3 = \frac{1}{2} \quad c_2 a_2^2 + c_3 a_3^2 = \frac{1}{3} \quad c_3 a_2 b_{32} = \frac{1}{6}$$

Tenemos en cuenta que por (1.7) $b_{21} = a_2$ y $b_{31} + b_{32} = a_3$, tenemos 6 ecuaciones no lineales para determinar los 6 coeficientes. Se puede demostrar que hay una familia de soluciones con dos parámetros libres a_2 y a_3 , y dos familias de soluciones dependientes de un parámetro. Dos elecciones usuales son

3.i) $a_2 = \frac{1}{3}, a_3 = \frac{2}{3} \Rightarrow b_{31} = 0, b_{32} = \frac{2}{3}, c_3 = \frac{3}{4}, c_2 = 0, c_1 = \frac{1}{4}$. En términos de tabla

0	
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
$\frac{2}{3}$	0 $\frac{2}{3}$
	$\frac{1}{4}$ 0 $\frac{3}{4}$

Ahora

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4} (k_1 + 3k_3) \quad (4.5)$$

con

$$k_1 = f(x, y) \quad k_2 = f\left(x + \frac{h}{3}, y + \frac{h}{3}k_1\right) \quad k_3 = f\left(x + \frac{2h}{3}, y + \frac{2h}{3}k_2\right) \quad (4.6)$$

que es el llamado método de Heun de tercer orden.

3.ii) $a_2 = \frac{1}{2}$, $a_3 = 1 \Rightarrow b_{31} = -1$, $b_{32} = 2$, $c_3 = 1$, $c_2 = \frac{1}{2}$, $c_1 = 0$. En términos de tabla

0			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
1	-1	2	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

Ahora

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3) \quad (4.7)$$

con

$$k_1 = f(x, y) \quad k_2 = f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_1\right) \quad k_3 = f\left(x + h, y - hk_1 + 2hk_2\right) \quad (4.8)$$

que es el llamado método de Kutta de tercer orden.

Para construir métodos con $R \geq 4$ necesitaríamos ir hasta términos de mayor orden en los desarrollos de Taylor que aproximan $\Phi_T(x, y; h)$. Cada etapa añadida, añade un nuevo coeficiente c , un nuevo coeficiente a y R nuevos coeficientes b . Se requiere un complicado cálculo algebraico para ver hasta que orden se puede llegar con un conjunto de coeficientes dado.

Para $R = 4$ hay 13 coeficientes y 8 ecuaciones no lineales que deben satisfacerse para alcanzar un orden $p = 4$ (además de 3 ecuaciones (1.7)). Se puede demostrar que existe una familia infinita de soluciones con dos parámetros libres y cuatro familias con un parámetro libre. El conjunto de coeficientes más utilizado es (expresado en forma de matriz)

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

Es decir

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (4.9)$$

con

$$k_1 = f(x, y) \quad k_2 = f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_1\right) \quad k_3 = f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_2\right) \quad k_4 = f(x + h, y + hk_3) \quad (4.10)$$

Para $R = 5$ un método Runge-Kutta explícito tiene 19 coeficientes. Para alcanzar un orden $p = 5$ hay que satisfacer un sistema de 9 ecuaciones no lineales (además de 4 ecuaciones (1.7)). Puede demostrarse que este sistema no tiene solución, de modo que no hay ningún método de 5 etapas y orden 5. Para llegar a un orden 5 se necesita como mínimo un método de 6 etapas. Esto es lo que hace que el método de Runge-Kutta de 4 etapas sea el más utilizado, ya que 4 es el máximo número para el que $p_{\max} = R$.

No se sabe, con toda generalidad, cuál es el máximo orden que puede alcanzarse con un método de R etapas, aunque sí se conocen algunos resultados parciales

$R \leq 4$	$p_{\max} = R$
$R = 6, 7$	$p_{\max} = R - 1$
$R = 9$	$p_{\max} = 7$
$R = 11$	$p_{\max} = 8$
$12 \leq R \leq 17$	$p_{\max} = 9$
$12 \leq R \leq 17$	$p_{\max} = 10$

5. Cotas de error

5.1. Error global

Ya hemos visto que para un método consistente $\lim e_n = 0$ para $h \rightarrow 0$. Veamos ahora como evoluciona el error global si podemos establecer una cota para el error de truncatura local.

Teorema: Sea $|\Phi(x, y(x); h) - \Delta(x, y(x); h)| \leq Nh^p$.

Entonces

$$|e_n| \leq Nh^p \frac{e^{Lx} - 1}{L}$$

Dem:

Como ya hemos visto en (3.1), la propagación del error obedece a la ecuación

$$e_{n+1} = e_n + h[\Phi(x_n, y(x_n); h) - \Delta(x_n, y_n; h)]$$

Sumando y restando $\Phi(x_n, y(x_n); h)$ dentro del corchete, y teniendo en cuenta la condición lipschitziana de $\Phi(x, y; h)$ y la hipótesis del teorema

$$e_{n+1} = e_n + h \left(\underbrace{[\Phi(x_n, y_n; h) - \Phi(x_n, y(x_n); h)]}_{\leq Le_n} + \underbrace{[\Phi(x_n, y(x_n); h) - \Delta(x, y(x_n); h)]}_{\leq Nh^p} \right)$$

y por recurrencia

$$\begin{aligned} |e_{n+1}| &\leq |e_n| + hL|e_n| + hNh^p = (1 + hL)|e_n| + Nh^{p+1} \leq \\ &\leq (1 + hL) \left[(1 + hL)|e_{n-1}| + Nh^{p+1} \right] + Nh^{p+1} = \\ &= (1 + hL)^2 |e_{n-1}| + Nh^{p+1} [1 + (1 + hL)] \leq \\ &\leq \dots \leq (1 + hL)^{n+1} |e_0| + Nh^{p+1} \frac{(1 + hL)^n - 1}{hL} = Nh^p \frac{e^{Lx} - 1}{L} \end{aligned} \quad (5.1)$$

5.2. Aplicaciones especiales

Algunos resultados generales que hemos obtenido hasta ahora requieren para su aplicación concreta una estimación previa tanto de la constante de Lipschitz de $\Phi(x, y; h)$ como de las cotas de error local. Veamos algunos ejemplos de tales estimaciones.

1) Estimaciones de L

Aunque no sea propiamente un método de Runge-Kutta, empezaremos haciendo una estimación de L para la función $\Phi_T(x, y; h)$ del método de la serie de Taylor (1.2). Para un método de orden p es evidente que

$$|\Phi_T(x, y; h) - \Phi_T(x, y^*; h)| = \sum_{k=0}^{p-1} \frac{h^k}{k!} |f^{(k)}(x, y) - f^{(k)}(x, y^*)| \leq \sum_{k=0}^{p-1} \frac{h^k}{k!} L_n |y - y^*| = L |y - y^*|$$

siendo

$$L \equiv \sum_{k=0}^{p-1} \frac{h^k}{k!} L_k \quad y \quad L_k = \sup \left| \frac{\partial^k f}{\partial y^k} \right|$$

Veamos ahora una estimación para un método Runge-Kutta 3^{er} orden. En este caso, si L_0 es la constante de Lipschitz de $f(x, y)$, tenemos

$$|k_1 - k_1^*| = |f(x, y) - f(x, y^*)| \leq L_0 |y - y^*|$$

$$\begin{aligned} |k_2 - k_2^*| &= |f(x + ha_2, y + ha_2 k_1) - f(x + ha_2, y^* + ha_2 k_1^*)| \leq \\ &\leq L_0 |y + ha_2(k_1 - k_1^*)| \leq L_0 |y - y^*| + L_0 ha_2 L_0 |y - y^*| = \\ &= L_0(1 + ha_2 L_0) |y - y^*| \end{aligned}$$

y del mismo modo

$$\begin{aligned} |k_3 - k_3^*| &= |f(x + ha_3, y + hb_{31}k_1 + hb_{32}k_2) - f(x + ha_3, y^* + hb_{31}k_1^* + hb_{32}k_2^*)| \leq \\ &\leq L_0 |y + hb_{31}k_1 + hb_{32}k_2 - y^* - hb_{31}k_1^* + hb_{32}k_2^*| \leq \\ &\leq L_0 |y - y^*| + hb_{31}L_0 |k_1 - k_1^*| + hb_{32} |k_2 - k_2^*| \leq \\ &\leq (L_0 + hb_{31}L_0^2 + hb_{32}L_0^2(1 + ha_2L_0)) |y - y^*| = L_0 (1 + ha_3L_0 + h^2a_2b_{32}L_0^2) |y - y^*| \end{aligned}$$

Finalmente

$$\begin{aligned} |\Phi(x, y; h) - \Phi(x, y^*; h)| &= \sum_{i=1}^3 c_i |k_i - k_i^*| \leq \\ &\leq c_1 L_0 |y - y^*| + c_2 L_0(1 + ha_2L_0) |y - y^*| + c_3 L_0(1 + ha_3L_0 + h^2a_2L_0^2) |y - y^*| = \\ &= L_0 [c_1 + c_2(1 + ha_2L_0) + c_3(1 + ha_3L_0 + h^2a_2L_0^2)] |y - y^*| = \\ &= L_0 [(c_1 + c_2 + c_3) + hL_0(c_2a_2 + c_3a_3) + h^2L_0^2c_3a_2b_{32}] |y - y^*| \leq \\ &\leq L_0 \left(1 + \frac{hL_0}{2} + \frac{h^2L_0^2}{6} \right) |y - y^*| \end{aligned}$$

En general, para un método de orden p

$$L = L_0 \sum_{k=1}^{p-1} \frac{(hL_0)^k}{k!} \quad (5.2)$$

Vemos así que la constante de Lipschitz global de la función $\Phi(x, y; h)$ depende del orden del método y del paso h .

2) Estimaciones de N

Buscamos ahora una constante N que satisfaga

$$|\Phi(x, y(x); h) - \Delta(x, y(x); h)| = O(h^p)$$

Si $\Phi(x, y; h)$ y $\Delta(x, y; h)$ son diferenciables, la k -ésima derivada de la diferencia será de orden $O(h^{p-k})$, es decir

$$\frac{\partial^k}{\partial h^k} \{ \Phi(x, y(x); h) - \Delta(x, y(x); h) \}_{h=0} = 0 \quad k = 0, 1, \dots, p-1$$

Las primeras derivadas que no se anulan para $h = 0$ son las p -ésimas. Entonces, de un desarrollo de potencias a orden p

$$\Phi(x, y; h) - \Delta(x, y; h) = h^p \left\{ \frac{1}{p!} \frac{\partial^p \Phi}{\partial h^p} - \frac{1}{(p+1)!} f^{(p)}(x+h, y(x+h)) \right\}$$

y la cota N buscada es

$$N = \max \left| \frac{1}{p!} \frac{\partial^p \Phi}{\partial h^p} - \frac{1}{(p+1)!} f^{(p)}(x+h, y(x+h)) \right|$$

Consideremos, por ejemplo, un método de Runge-Kutta de segundo orden. En este caso

$$\Phi(x, y; h) = c_1 f(x, y) + c_2 f(x + a_2 h, y + a_2 h f(x, y))$$

y

$$\frac{\partial \Phi(x, y; h)}{\partial h} = c_2 \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} a_2 + c_2 \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} a_2 f(x, y) = c_2 a_2 \hat{f}_x + c_2 a_2 \hat{f}_y f$$

donde $\hat{f} \equiv f(x + a_2 h, y + a_2 h f(x, y))$, que es por lo tanto es una función de h . Ahora

$$\frac{\partial^2 \Phi(x, y; h)}{\partial h^2} = c_2 a_2 (\hat{f}_{xx} a_2 + \hat{f}_{xy} a_2 f) + c_2 a_2 f (\hat{f}_{xy} a_2 + \hat{f}_{yy} a_2 f) = c_2 a_2^2 (\hat{f}_{xx} + 2\hat{f}_{xy} f + \hat{f}_{yy} f^2)$$

Si se conocen cotas para $f(x, y)$ y sus derivadas puede obtenerse una cota N en términos de las cotas de f y de las constantes c_2 y a_2 del método. No obstante, para métodos de orden elevado este procedimiento resulta bastante laborioso.

5.3. Estimación del error principal

En los métodos lineales multipaso la forma del error local es bastante sencilla. Asimismo, existe un artificio simple (Milne) para estimar el error a partir de los valores obtenidos en las sucesivas iteraciones del corrector, lo que no supone ningún esfuerzo computacional extra. Con esto, no solo se puede corregir en parte el error (modificación de Hamming) sino que se puede establecer una estrategia de cambio del paso h para mantener el tamaño de los errores y permanecer dentro del intervalo de estabilidad.

Por el contrario, nada de esto sucede en los métodos de Runge-Kutta: la estructura del error de truncatura es complicada y también lo es obtener cotas a priori. Existe, no obstante, un modo de estimar el error principal, aunque ello requiere un esfuerzo computacional extra, pues requiere calcular valores nuevos más allá de los estrictamente necesarios para el progreso del cálculo. Esto se conoce como extrapolación de Richardson y, en realidad, es algo aplicable a cualquier método en diferencias.

Como sabemos, si suponemos que el valor y_n es exacto, es decir, $y_n = y(x_n)$, el error local en y_{n+1} tiene la forma

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1} = \Psi(x_n, y(x_n)) h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

Supongamos ahora que en lugar de llegar a $x_{n+1} = x_n + h$ en un paso de longitud h a partir de x_n , lo hacemos en un paso de longitud $2h$ a partir de x_{n-1} . En este caso obtendríamos un valor y_{n+1}^* y el error sería

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) - y_{n+1}^* &= \Psi(x_{n-1}, y(x_{n-1})) (2h)^{p+1} + O(h^{p+2}) = \\ &= [\Psi(x_n, y(x_n)) - O(h)] (2h)^{p+1} + O(h^{p+2}) = \Psi(x_n, y(x_n)) (2h)^{p+1} + O(h^{p+2}) \end{aligned}$$

Entonces

$$y_{n+1} - y_{n+1}^* = (2^{p+1} - 1) \Psi(x_n, y(x_n)) h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

o

$$\Psi(x_n, y(x_n)) h^{p+1} \simeq \frac{y_{n+1} - y_{n+1}^*}{2^{p+1} - 1} \quad (5.3)$$

Podemos así hacer una estimación del error en momento dado si calculamos el valor siguiente de dos maneras: a partir del último valor obtenido y a partir del penúltimo. Esto no supone ningún problema pues, al tratarse de métodos de un paso, podemos partir de cualquier valor y no necesitamos ninguna interpolación sobre valores anteriores. No obstante, necesitamos hacer R evaluaciones extra de la función $f(x, y)$ en R puntos de abscisas comprendidas entre $x_n - h$ y $x_n + h$.

6. Estabilidad en métodos Runge-Kutta

Como hicimos en el caso de los métodos lineales multipaso, veamos cómo se comporta un método Runge-Kutta aplicado a la ecuación lineal $y' = \lambda y$. En primer lugar, es fácil ver que en este caso $f^{(n)}(x, y) = \lambda y^{(n)} = \lambda^n y$, y así

$$\Phi_T(x_n, y(x_n); h) = \lambda y + \frac{1}{2} h \lambda y + \frac{1}{3!} h^2 \lambda^2 y + \dots$$

y por lo tanto

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) \left[1 + \bar{h} + \frac{1}{2} \bar{h}^2 + \frac{1}{3!} \bar{h}^3 + \dots \right] = y(x_n) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{h}^j}{j!}$$

siendo $\bar{h} = h\lambda$.

Si aplicamos a la ecuación un método de Runge-Kutta de 3 etapas tenemos

$$\begin{aligned} k_1 &= \lambda y \\ k_2 &= f(x + ha_2, y + ha_2 k_1) = \lambda(y + ha_2 \lambda y) = \lambda y(1 + ha_2 \lambda) \\ k_3 &= f(x + ha_3, y + h(a_3 - b_{32})k_1 + hb_{32}k_2) = \\ &= \lambda[y + h(a_3 - b_{32})\lambda y + hb_{32}\lambda y(1 + ha_2 \lambda)] = \lambda y [1 + ha_3 \lambda + h^2 a_2 b_{32} \lambda^2] \end{aligned}$$

y así

$$\Phi(x, y; h) = \sum_{r=1}^3 c_r k_r = \lambda \left[y(c_1 + c_2 + c_3) + (c_2 a_2 + c_3 a_3) h \lambda + c_3 a_2 b_{32} h^2 \lambda^2 \right] y$$

y

$$y_{n+1} = y_n \left[1 + (c_1 + c_2 + c_3) \bar{h} + (c_2 a_2 + c_3 a_3) \bar{h}^2 + c_3 a_2 b_{32} \bar{h}^3 \right] \quad (6.1)$$

ecuación en diferencias cuya solución es

$$y_n = d_1 r_1^n \quad \text{con} \quad r_1 = 1 + (c_1 + c_2 + c_3) \bar{h} + (c_2 a_2 + c_3 a_3) \bar{h}^2 + c_3 a_2 b_{32} \bar{h}^3 \quad (6.2)$$

Si el método es de orden $p = 3$, $\Phi_T(x, y; h) - \Phi(x, y; h) = O(h^3)$ y por lo tanto

$$r_1 = 1 + (c_1 + c_2 + c_3) \bar{h} + (c_2 a_2 + c_3 a_3) \bar{h}^2 + c_3 a_2 b_{32} \bar{h}^3 = 1 + \bar{h} + \frac{1}{2!} \bar{h}^2 + \frac{1}{3!} \bar{h}^3 \quad (6.3)$$

Si, como en el caso de los métodos lineales multipaso, aplicamos el método a una función $f(x, y)$ haciendo la hipótesis drástica $\partial f / \partial y = \chi = cte$. la expresión (6.3) sigue siendo válida con $\bar{h} = h\chi$. Ahora para que la solución y_n se mantenga finita para todo n es necesario que $|r_1| < 1$

Definición: Un método es absolutamente estable en el intervalo (α, β) si $|r_1| < 1$ para $\bar{h} \in (\alpha, \beta)$.

Si el método es consistente $c_1 + c_2 + c_3 = 1$, lo que implica $r_1 = 1 + \bar{h} + O(h^2)$. Por lo tanto, un método consistente es inestable para $\bar{h} > 0$.

Para $\bar{h} < 0$ existen intervalos de estabilidad absoluta. Sea por ejemplo $R = 3$ y $p = 3$. Entonces

$$r_1 = 1 + \bar{h} + \frac{1}{2}\bar{h}^2 + \frac{1}{3!}\bar{h}^3 \quad |r_1| < 1 \Rightarrow \bar{h} \in (-2.51, 0)$$

Supongamos ahora un método de 3 etapas pero solo de orden 2. Esto significa que los términos en \bar{h}^2 en $\Phi(x, y; h)$ y $\Delta(x, y; h)$ no son iguales, es decir $c_3 a_2 b_{32} \neq 1/6$. En este caso, la raíz r_1 es

$$r_1 = 1 + \bar{h} + \frac{1}{2}\bar{h}^2 + c_3 a_2 b_{32} \bar{h}^3 \equiv 1 + \bar{h} + \frac{1}{2}\bar{h}^2 + \gamma_3 \bar{h}^3$$

Dando ahora distintos valores a γ_3 tendremos diferentes intervalos de estabilidad absoluta. Por ejemplo, es inmediato ver que para $\gamma_3 = 0$, el intervalo de estabilidad absoluta es simplemente $\bar{h} \in (-2, 0)$. Y para $\gamma_3 = 1/12$ encontramos un intervalo mayor $\bar{h} \in (-4.5120)$

Podemos generalizar estos resultados. En el caso de que $p = R$ (lo que es posible para $R \leq 4$) un razonamiento similar da lugar a una ecuación en diferencias cuya raíz es

$$r_1 = 1 + \bar{h} + \frac{1}{2}\bar{h}^2 + \dots + \frac{1}{p!}\bar{h}^p \quad (6.4)$$

Resulta así que todos los métodos de R etapas con $p = R$ tienen el mismo intervalo de inestabilidad absoluta. Este intervalo excluye los valores $\bar{h} > 0$.

En el caso $p < R$, (que, como hemos visto, ocurre siempre para $R > 4$) la raíz es de la forma

$$r_1 = 1 + \bar{h} + \frac{1}{2}\bar{h}^2 + \dots + \frac{1}{p!}\bar{h}^p + \sum_{q=p+1}^R \gamma_q \bar{h}^q \quad (6.5)$$

donde los $R - p$ diferentes γ_q dependen de los coeficientes del método, y podemos buscar los γ_q que den lugar a intervalos de estabilidad importantes con errores pequeños.