

Solución numérica de problemas de valor inicial

En ecuaciones diferenciales ordinarias

Victorio E. Sonzogni

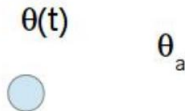
- 1 Problemas de valor inicial
- 2 Existencia y unicidad de la solución
- 3 Métodos de un paso
- 4 Métodos de Runge-Kutta
- 5 Métodos Multipaso
- 6 Estabilidad y convergencia
- 7 Sistemas de EDO

Sección 1

Problemas de valor inicial

Ejemplo

- Considérese el siguiente problema. Un cuerpo se encuentra a una temperatura θ y está rodeado de un medio ambiente con una temperatura θ_a (supóngase menor que la del cuerpo). El calor pasará del cuerpo al medio y aquel se enfriará, por cuanto su temperatura será función del tiempo ($\theta(t)$).



Ejemplo

- La velocidad con que se pierde la temperatura es proporcional a la diferencia entre $\theta(t)$ y θ_a :

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = -k(\theta(t) - \theta_a) \quad (1)$$

Esta es la *Ley de Enfriamiento de Newton*, que gobierna este problema, y $k > 0$ de modo que si la temperatura del cuerpo es mayor que la del medio, $\frac{d\theta(t)}{dt} < 0$.

- Si se desea conocer la temperatura en un instante t hay que integrar la ecuación (1). La integración introduce una constante (desconocida). La solución de la ec. (1) no es única: existen ∞ soluciones que difieren en una constante.

- Para que la solución sea única hay que proporcionar una condición (ecuación). Esta puede ser una *condición inicial*: $\theta(0) = \bar{\theta}_0$ (temperatura inicial conocida).
- El problema queda:

$$\begin{cases} \frac{d\theta(t)}{dt} = -k(\theta(t) - \theta_a) & \text{ecuacion de campo} \\ \theta(0) = \bar{\theta}_0 & \text{condicion inicial} \end{cases} \quad (2)$$

- El problema (2) se llama *problema de valor inicial* y tiene solución única.
- La cantidad de condiciones iniciales tiene que ser igual al orden de derivación en la ecuación.

- La solución analítica de (2) es:

$$\theta(t) = \theta_a + (\bar{\theta}_0 - \theta_a) e^{-k t}$$

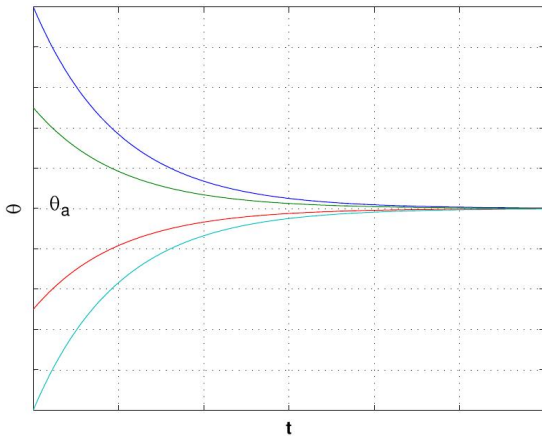


Figura 1. Solución $\theta(t)$ para distintos casos en que $\bar{\theta}_0 > \theta_a$ y $\bar{\theta}_0 < \theta_a$

Problemas de Valor Inicial

- Un problema de valor inicial se tiene a partir de una ecuación diferencial:

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

válida en el intervalo $a < x < b$

- Esa ecuación tiene ∞ soluciones $y(x)$. Para precisar una es necesario dar una condición:

$$y(a) = \bar{y}_0$$

que se denomina *condición inicial*.

- El problema de valor inicial (PVI) se escribe:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases} \quad (3)$$

- Es decir, el problema es:

hallar la función $y(x)$ que satisface la ecuación diferencial $y' = f(x, y)$ en el intervalo (a, b) y que además satisface la condición inicial $y(a) = \bar{y}_0$.

- La función $f(x, y)$ representa, como lo indica la ecuación, la derivada de y . Y esta derivada, en el caso más general depende de x y de y .
- En el ejemplo de enfriamiento y' es independiente de x , es función lineal de y . En la figura 1, a lo largo de una línea horizontal, la pendiente de las curvas es constante. A lo largo de una línea vertical, crece linealmente con y .

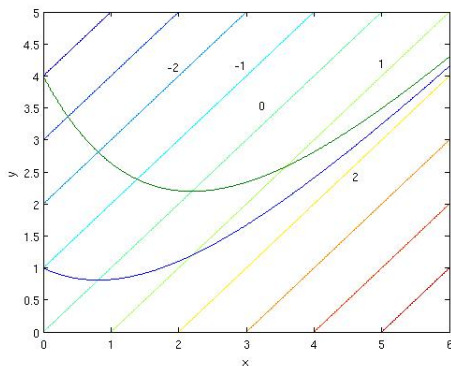
Ejemplo

- Para la ecuación:

$$y' = x - y$$

se ha graficado dos soluciones.

- Las líneas son curvas de nivel para $f(x, y)$ y corresponden a puntos de $y' = cte$. La línea desde el origen a 45° es la de $y' = 0$. Hacia la derecha hay líneas con $y' > 0$ y hacia la izquierda con $y' < 0$



- Un PVI para ecuaciones de distintos órdenes de derivación puede escribirse:

$$\begin{cases} y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \\ y(a) = \bar{y}_0 \\ y'(a) = \bar{y}'_0 \\ y''(a) = \bar{y}''_0 \\ \dots \\ y^{(n-1)}(a) = \bar{y}_0^{n-1} \end{cases}$$

- Si se puede integrar analíticamente la ecuación diferencial, las constantes de integración se calculan a partir de las condiciones iniciales.
- Si no es posible integrarla analíticamente, hay que recurrir a métodos numéricos.

Sección 2

Existencia y unicidad de la solución

Existencia y unicidad de la solución

- Antes de emprender la solución (analítica o numérica) del PVI hay que ver si el problema *tiene* solución.
- Más precisamente hay que responder a las siguientes preguntas:
 - El PVI ¿tiene solución?
 - Si la tiene, ¿es única?
 - Esa solución, ¿es sensible a pequeñas variaciones en los datos?
- Se introducen ahora algunas definiciones y se verán algunos teoremas que permiten responder a esas preguntas.

Definición:

Se dice que una función $f(x, y)$ satisface la *condición de Lipschitz* para la variable y en un conjunto $D \subset \mathbb{R}^2$, si existe una constante $L > 0$ tal que

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L |y_1 - y_2|$$

si los puntos (x, y_1) y (x, y_2) están en D .

La constante L se llama *constante de Lipschitz*

Definición:

Se dice que conjunto $D \subset \mathbb{R}^2$ es *convexo*, si dados dos puntos (x_1, y_1) y $(x_2, y_2) \in D$, el punto $((1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2, (1 - \lambda)y_1 + \lambda y_2)$ también $\in D$, donde $0 \leq \lambda \leq 1$.

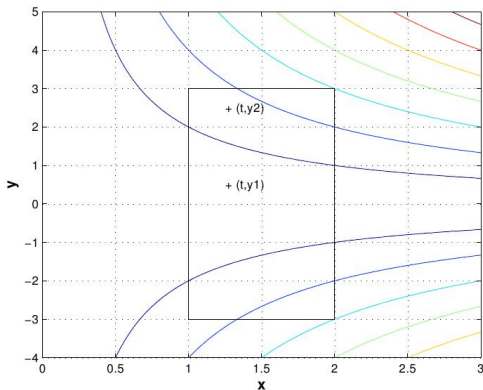
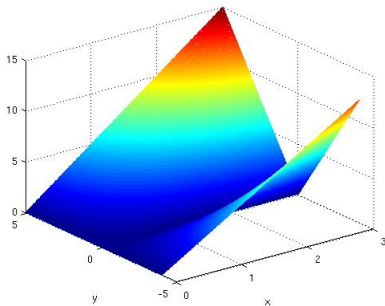
Un rectángulo es convexo. Generalmente trabajaremos en conjuntos $x_1 \leq x \leq x_2$, $-\infty < y < \infty$ que también lo son.

Ejemplo:

Sea $D = \{(x, y) \mid 1 \leq x \leq 2, -3 < y < 3\}$ y sea $f(x, y) = x|y|$, entonces para cada (x, y_1) y (x, y_2) están en D :

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| = |x|y_1| - x|y_2|| = |x| \left| |y_1| - |y_2| \right| \leq 2|y_1 - y_2|$$

Luego f verifica una C.L. para y en D , y la cte de Lipschitz es 2.



Teorema 1:

Sea $f(x, y)$ definida en $D \subset \mathbb{R}^2$. Si existe una constante $L > 0$ tal que

$$\left| \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) \right| \leq L$$

para todo $(x, y) \in D$, entonces f satisface una condición de Lipschitz para la variable y con una constante de Lipschitz L .

Las condiciones de este teorema son *suficientes* para que se satisfaga una condición de Lipschitz, pero no *necesarias*.

Teorema 2:

Sea

$$D = \{(x, y) \mid a \leq x \leq b, \quad -\infty < y < \infty\}$$

y sea $f(x, y)$ *continua* en D .

Si f satisface una condición de Lipschitz en D para la variable y , entonces el PVI:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

tiene una solución única $y(x)$ para $a \leq x \leq b$.

Definición:

Se dice que el PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

es un *problema bien planteado* si:

- 1) Existe una solución *única* $y(x)$ para ese problema.
- 2) Existen ctes $\epsilon > 0$ y $k > 0$ tales que *existe* una solución *única* $z(x)$ al problema:

$$\begin{cases} z' = f(x, z) + \delta(x) & a \leq x \leq b \\ z(a) = \bar{y}_0 + \epsilon_0 \end{cases}$$

donde $|z(x) - y(x)| < k\epsilon \quad \forall \quad a \leq x \leq b$,
siempre que $|\epsilon_0| < \epsilon$ y $|\delta(x)| < \epsilon$.

Teorema 3:

Sea

$$D = \{(x, y) \mid a \leq x \leq b, \quad -\infty < y < \infty\}$$

el PVI:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

está bien planteado si f es continua y satisface una condición de Lipschitz para la variable y en el conjunto D .

Ejemplo:

Sea $D = \{(x, y) \mid 0 \leq x \leq 1, -\infty < y < \infty\}$ y sea el PVI:

$$\begin{cases} y' = 1 + x - y & 0 \leq x \leq 1 \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (a)$$

- $\frac{\partial f}{\partial y} = -1$, $|\frac{\partial f}{\partial y}| = 1$, \therefore por el Teorema 1 satisface una C.L para y en D con cte $L = 1$.
- Como f es continua, por Teorema 2 el PVI tiene solución única, y por Teorema 3 está bien planteado.
- El problema perturbado:

$$\begin{cases} z' = 1 + x - y + \delta & 0 \leq x \leq 1 \\ z(a) = 1 + \epsilon_0 \end{cases} \quad (b)$$

con δ y ϵ ctes.

La solución de (a) es: $y(x) = e^{-x} + x$

La solución de (b) es: $z(x) = (1 + \epsilon_0 - \delta)e^{-x} + x + \delta$

Si $|\delta| < \epsilon$ y $|\epsilon_0| < \epsilon$, entonces:

$$|y(x) - z(x)| = |(\delta - \epsilon_0)e^{-x} - \delta| = |\delta(e^{-x} - 1) - \epsilon_0 e^{-x}| \leq |\delta| |1 - e^{-x}| + |\epsilon_0| \leq 2\epsilon$$

Se verifica el Teorema 3.

Sección 3

Métodos de un paso

- Sea el PVI

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

- Se obtendrán aproximaciones a y en determinados puntos o nodos en el intervalo $[a, b]$. Esos *puntos de red* o *nodos* están igualmente espaciados. Dividiendo (a, b) en n subintervalos, el tamaño del paso es $h = \frac{b-a}{n}$ y la abcisa del nodo i es $x_i = x_0 + i h$.
- Se ha de designar y_i a la solución numérica (o aproximación) en el punto x_i en tanto que $y(x_i)$ es el valor exacto de la función.

- Los métodos de un paso permiten evaluar la solución numérica y_{i+1} , en la abscisa x_{i+1} , con formulas del tipo:

$$y_{i+1} = y_i + h \Phi$$

donde Φ es una aproximación a $\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h}$ que, en general puede ser función de x_i , x_{i+1} , y_i , y_{i+1} y h .

- Si $\Phi(x_i, x_{i+1}, y_i, y_{i+1}, h)$ el método se dice *implícito*.
- Si Φ no depende de y_{i+1} el método se dice *explícito*.

- El método de un paso más sencillo es el Método de Euler.
- A partir de x_i aplicando Series de Taylor:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + (x_{i+1} - x_i) y'(x_i) + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 y''(\xi_i)$$

siendo $x_i < \xi_i < x_{i+1}$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{1}{2}h^2 y''(\xi_i)$$

- Despreciando el término en h^2 :

$$y(x_{i+1}) \simeq y(x_i) + h y'(x_i)$$

- Como y satisface la ec. diferencial, $y' = f(x, y)$.

$$y(x_{i+1}) \simeq y(x_i) + h f(x_i, y(x_i))$$

- Esto da lugar al Método de Euler para integrar EDO. Llamando y_i a la solución numérica obtenida para aproximar a $y(x_i)$, el algoritmo del método de Euler:

$$\left| \begin{array}{l} y_0 = y(a) = \bar{y}_0 \\ y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i) \end{array} \right. \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Algoritmo del Método de Euler

Para aproximar

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

con $n + 1$ puntos en $[a, b]$.

Entrada: a, b, n, y_0

Salida: $y_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$

1) $h = \frac{b-a}{n}$

$$x_0 = a$$

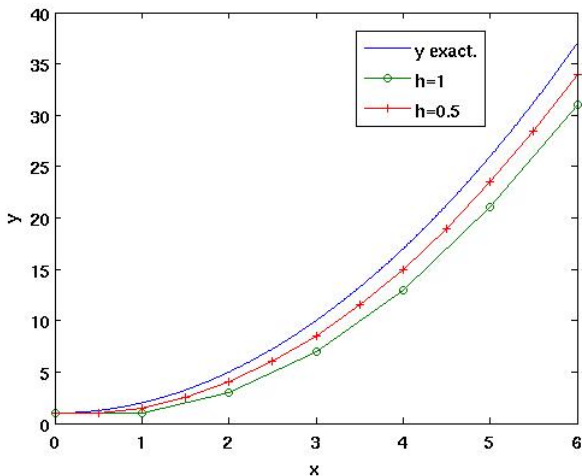
$$y_0 = \bar{y}_0$$

2) Para $i = 1, 2 \dots n$ hacer

$$\begin{cases} y_i = y_{i-1} + h f(x_{i-1}, y_{i-1}) \\ x_i = x_0 + i h \end{cases}$$

3) Salida: $(x_i, y_i) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n)$

- En la figura se muestra la solución de $y' = 2x$ en el intervalo $(0, 6)$, con $\bar{y}_0 = 1$. La solución numérica se va alejando de la solución exacta. Se muestran allí resultados con $h = 1$ y con $h = 0.5$.



Métodos de Taylor

- Si la función $f(x, y)$ es derivable varias veces, se puede escribir la serie de Taylor:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \dots + \frac{h^n}{n!} y^{(n)}(x_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} y^{(n+1)}(\xi_i)$$

para $x_i < \xi < x_{i+1}$

- De la ecuación diferencial:

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

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

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

etc.

- Despreciando el término en h^{n+1} :

$$y(x_{i+1}) \simeq y(x_i) + h f(x_i, y(x_i)) + \frac{h^2}{2} f'(x_i, y(x_i)) + \frac{h^3}{3!} f''(x_i, y(x_i)) + \dots + \frac{h^n}{n!} f^{(n-1)}(x_i, y(x_i))$$

- El método de Taylor de orden n utiliza la expresión anterior para integrar la ecuación diferencial, partiendo de la condición $y(0) = \bar{y}_0$.
- *Ventajas:*

Se puede reducir el error de truncamiento con tal de tomar suficientes derivadas.
- *Desventajas:*

Hay que derivar la función $f(x, y)$, varias veces.
- El Método de Euler es un Método de Taylor de orden 1.
- Los Métodos de Taylor de mayor orden en general no se usan pues requieren obtener las derivadas de orden superior y evaluarlas en cada punto de integración.

Errores en los métodos para PVI

- Los errores que aparecen al integrar PVI se pueden clasificar en
 - 1) errores de truncamiento local (ETL):
Aparecen en cada paso al truncar la serie de Taylor.
 - 2) errores de redondeo local (ERL):
Debido a la aritmética finita
 - 3) errores de truncamiento global (ETG):
Acumulación de ETL.
 - 4) errores de redondeo global (ERG):
Acumulación de ERL.
Aumenta al achicarse h .
 - 5) error total:
Suma de ETG y ERG.

Errores en los métodos para PVI

- El error de truncamiento local es el que se da en cada paso de integración.

$$\tau_i h = (y(x_{i+1}) - y(x_i)) - h \Phi(x_i, y(x_i), h)$$

Si el método es de orden n el ETL es orden h^{n+1} Este error disminuye al disminuir h .

(A veces se define como error de truncamiento local a τ_i , esto es al error al aproximar la secante por la derivada.)

Errores en los métodos para PVI

- El error de truncamiento global proviene de la acumulación de errores de truncamiento local. Puede escribirse:

$$e_i = y_i - y(x_i)$$

Es de orden $O(h^n)$. (n veces $O(h^{n+1}) = \frac{b-a}{h}$ veces $O(h^{n+1})$).

- Para el método de Euler, hay un teorema que asegura que el error de truncamiento global esta acotado por

$$|y_i - y(x_i)| \leq \frac{hM}{2L} [e^{L(x_i-a)} - 1]$$

para cualquier i , donde L es la constante de Lipschitz (f verifica la condicion de Lipschitz) y M acota la derivada segunda

$$|y''(x)| \leq M \quad \forall x \in (a, b)$$

- Para el Método de Euler, el menor error total (ETG+ERG) se da para un paso:

$$h = \sqrt{\frac{2\delta}{M}}$$

donde δ es la cota del error de redondeo ($|\delta_i| < \delta$), y M es la cota de la derivada $y''(\xi_i)$ ($|y''(\xi_i)| < M$).

Métodos explícitos y métodos implícitos

- La fórmula del método de Euler:

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

permite calcular la solución en x_{i+1} usando valores disponibles evaluados en x_i .

Este método se denomina también Método de Euler *progresivo* o *hacia adelante* (*forward Euler*). Y es un ejemplo de método *explícito*.

- También podría plantearse una fórmula:

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

en este caso la solución en x_{i+1} depende de y_{i+1} por lo que no puede calcularse explícitamente.

Este método es *implícito* y, en rigor, es una ecuación no lineal por lo que su resolución es más cara.

Este método se denomina también Método de Euler *regresivo* o *hacia atrás* (*backward Euler*)

- Un método más preciso que el de Euler:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2} h (f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}))$$

- Este método se denomina Método de Crank-Nicholson, ó también Método del Trapecio.
- Usa una pendiente promedio entre la pendiente de los puntos inicial y final del paso.
- Es un método implícito.

Sección 4

Métodos de Runge-Kutta

Métodos de Runge-Kutta

- El desarrollo en serie de Taylor, a partir del punto x_i :

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \dots$$

- De la ecuación diferencial (usando la notación: $f_x = \frac{\partial f}{\partial x}$, etc.):

$$y' = f$$

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

$$\begin{aligned} y''' &= \frac{d}{dx}y'' = f_{xx} + f_{xy}y' + (f_{yx}f + f_y f_x) + (f_{yy}f + f_y f_y)y' \\ &= f_{xx} + f_{xy}f + f_{yx}f + f_y f_x + f_{yy}f^2 + f_y^2 f \end{aligned}$$

etc.

- Reteniendo hasta el término en h^2 en la serie de Taylor: :

$$y(x+h) = y + h f + \frac{h^2}{2} (f_x + f f_y) + O(h^3) \quad (1)$$

donde se ha usado la notación:

$$y = y(x)$$

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

etc.

Polinomios de Taylor en 2 variables

$$f(x, y)$$

$$f(x + a, y + b) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{i!} \left(a \frac{\partial}{\partial x} + b \frac{\partial}{\partial y} \right)^i f(x, y) + E_n(x, y)$$

donde

$$\left(a \frac{\partial}{\partial x} + b \frac{\partial}{\partial y} \right)^0 f(x, y) = f(x, y)$$

$$\left(a \frac{\partial}{\partial x} + b \frac{\partial}{\partial y} \right)^1 f(x, y) = a \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) + b \frac{\partial}{\partial y} f(x, y)$$

$$\left(a \frac{\partial}{\partial x} + b \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x, y) = a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, y) + 2 a b \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f(x, y) + b^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(x, y)$$

y el error de truncamiento:

$$E_n(x, y) = \frac{1}{(n+1)!} \left(a \frac{\partial}{\partial x} + b \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n+1} f(x + \theta a, y + \theta b)$$

con $0 < \theta < 1$

- La fórmula (1):

$$y(x+h) = y + \frac{1}{2} h f + \frac{1}{2} h [f + h f_x + h f f_y] + O(h^3) \quad (2)$$

- De la fórmula de Taylor para 2 variables, con $n = 1$:

$$f(x+h, y+hf) = f + h f_x + h f f_y + O(h^2) \quad (3)$$

- La fórmula (2) puede escribirse:

$$y(x+h) = y + \frac{1}{2} h f + \frac{1}{2} h f(x+h, y+hf) + O(h^3) \quad (4)$$

- De la última fórmula puede escribirse:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2} (F_1 + F_2)$$

donde

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_{i+1}, y_i + F_1)$$

- Esta fórmula se conoce como *Fórmula de Runge-Kutta de 2º orden*.

- Las Fórmulas de Runge-Kutta de 2º orden se pueden escribir:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + w_1 h f + w_2 h f(x + \alpha h, y + \beta h f) + O(h^3)$$

Los parámetros w_1 , w_2 , α y β dan lugar a diferentes fórmulas.

- Teniendo en cuenta (3) se puede escribir:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + w_1 h f + w_2 h [f + \alpha h f_x + \beta h f f_y] + O(h^3)$$

- Comparando con (1) se ve que deben ser:

$$w_1 + w_2 = 1$$

$$w_2 \alpha = \frac{1}{2}$$

$$w_2 \beta = \frac{1}{2}$$

Método de Heun

Se da con:

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

$$\alpha = \beta = 1$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2} (F_1 + F_2)$$

donde

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_i + h, y_i + F_1)$$

Método de Euler modificado

Se da con:

$$w_1 = 0$$

$$w_2 = 1$$

$$\alpha = \beta = \frac{1}{2}$$

$$y_{i+1} = y_i + F_2$$

donde

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}F_1)$$

Se conoce también como Método del Punto Medio

Otro método de segundo orden

Se da con:

$$w_1 = \frac{1}{4}$$

$$w_2 = \frac{3}{4}$$

$$\alpha = \beta = \frac{2}{3}$$

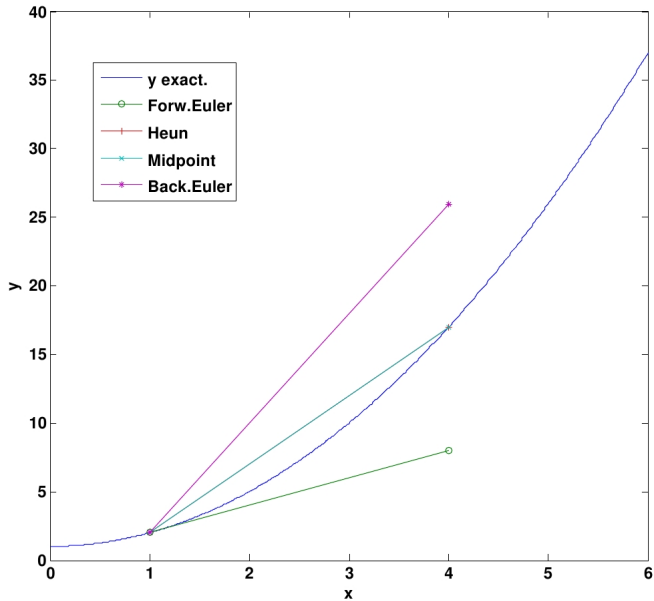
$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{4} (F_1 + 3 F_2)$$

donde

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_i + \frac{2}{3}h, y_i + \frac{2}{3}F_1)$$

Métodos de Runge-Kutta de 2º orden



- El Método de Heun se puede escribir en dos pasos:

1) $\tilde{y}_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i)$

2) $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})]$

- El primer paso puede verse como una *predicción* del valor de y en x_{i+1} . Una predicción *explícita* ya que se calcula a partir del conocimiento de los valores en x_i .
- El segundo paso puede verse como una *corrección* del valor anterior, con una fórmula *implícita*.
- Esto da lugar a los métodos llamados *predictor-corrector* que se analizarán más adelante.

Métodos de Runge-Kutta de 4º orden

- Un método muy usado es el Runge-Kutta de 4º orden:

Método de Runge-Kutta de 4º orden

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(F_1 + F_2 + F_3 + F_4)$$

donde

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}F_1)$$

$$F_3 = h f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}F_2)$$

$$F_4 = h f(x_i + h, y_i + F_3)$$

- Es de 4º orden pues contempla los términos hasta h^4 . El error es de orden h^5 .
- Hay muchas fórmulas de Runge-Kutta de 4º orden.

Métodos de Runge-Kutta de 4º orden

Algoritmo del Método de Runge-Kutta de 4º orden

Entrada: a, b, n, \bar{y}_0

Salida: $y_i \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$

1) $h = \frac{b-a}{n}, x_0 = a, y_0 = \bar{y}_0$

2) Para $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$:

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}F_1)$$

$$F_3 = h f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}F_2)$$

$$F_4 = h f(x_i + h, y_i + F_3)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(F_1 + F_2 + F_3 + F_4)$$

3) Salida

Método de Runge-Kutta de 3º orden

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(F_1 + 4 F_2 + F_3)$$

donde

$$F_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$F_2 = h f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}F_1)$$

$$F_3 = h f(x_i + h, y_i + 2 F_2 - F_1)$$

Errores en los Métodos de Runge-Kutta

- Un método RK de orden m es equivalente a tomar polinomios de Taylor hasta términos de orden m , y el error de truncamiento es $O(h^{m+1})$.
- La solución exacta $y(x_{i+1})$ sería:

$$y(x_{i+1}) = y_{i+1} + C h^{m+1}$$

donde y_{i+1} es la aproximación y el último término el error de truncamiento.

- Si se calcula $y_{i+1}^{(1)}$ con un paso h ; y $y_{i+1}^{(2)}$ con 2 pasos $h/2$,

$$y(x_{i+1}) = y_{i+1}^{(1)} + C h^{m+1}$$

$$y(x_{i+1}) = y_{i+1}^{(2)} + 2 C \left(\frac{h}{2}\right)^{m+1}$$

restando:

$$y_{i+1}^{(2)} - y_{i+1}^{(1)} = C \left(h^{m+1} - \frac{h^{m+1}}{2^m} \right) = C h^{m+1} \left(1 - \frac{1}{2^m} \right)$$

Errores en los Métodos de Runge-Kutta

- De la última expresión:

$$C h^{m+1} \simeq \frac{y_{i+1}^{(2)} - y_{i+1}^{(1)}}{(1 - 2^{-m})} \simeq y_{i+1}^{(2)} - y_{i+1}^{(1)}$$

- Para los métodos de RK:

RK de orden	Error de truncamiento local	Evaluaciones de función
2	$O(h^3)$	2
3	$O(h^4)$	3
4	$O(h^5)$	4
5	$O(h^6)$	6
6	$O(h^7)$	7

- Se prefieren los métodos de RK de orden ≤ 4

Ejemplo

Sea el problema:

$$y' = y - x^2 + 1 \quad 0 \leq x \leq 2$$

$$y(0) = 0.5$$

resuelto por el Método de Euler con $h = 0.025$; Heun con $h = 0.05$; y RK 4º orden con $h = 0.1$. En todos los casos se realizaron 20 evaluaciones de funciones.

t_i	Exact	Euler $h = 0.025$	Modified Euler $h = 0.05$	Runge-Kutta Order Four $h = 0.1$
0.0	0.5000000	0.5000000	0.5000000	0.5000000
0.1	0.6574145	0.6554982	0.6573085	0.6574144
0.2	0.8292986	0.8253385	0.8290778	0.8292983
0.3	1.0150706	1.0089334	1.0147254	1.0150701
0.4	1.2140877	1.2056345	1.2136079	1.2140869
0.5	1.4256394	1.4147264	1.4250141	1.4256384

Sección 5

Métodos Multipaso

- Hasta ahora hemos visto métodos de integración donde para calcular y_{i+1} se usan los valores calculados en x_i . No los anteriores.
Por ejemplo la fórmula de Heun:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$$

- Como el error se va acumulando, los últimos tienen errores mayores.
- Se pueden usar los puntos anteriormente calculado \rightarrow *fórmulas multipaso*:

$$y_{i+1} = \phi(y_i, y_{i-1}, y_{i-2}, \dots)$$

- El problema

$$\begin{cases} y' = f(x, y) & a \leq x \leq b \\ y(a) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

Si integramos y' :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x) dx = y_{i+1} - y_i$$

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx$$

- Podemos usar fórmulas de interpolación para aproximar $f(x, y)$ e integrar numéricamente.
- Si usamos polinomios, obtenemos fórmulas de paso múltiple.

- La forma general de un método multipaso de m pasos es:

$$y_{i+1} = a_{m-1} y_i + a_{m-2} y_{i-1} + a_{m-3} y_{i-2} + \dots + a_0 y_{i+1-m} + h [b_m f(x_{i+1}, y_{i+1}) + b_{m-1} f(x_i, y_i) + b_{m-2} f(x_{i-1}, y_{i-1}) + \dots + b_0 f(x_{i+1-m}, y_{i+1-m})]$$

para $i = m - 1, m, \dots, n - 1$

- Los a_0, \dots, a_{m-1} y b_0, \dots, b_m son constantes.
- Los y_i , (para $i = 0, 1, \dots, m - 1$) son conocidos. *Valores iniciales*
- Si $b_m = 0 \rightarrow$ método *explícito* o *abierto*
- Si $b_m \neq 0 \rightarrow$ método *implícito* o *cerrado*
- Se precisan m condiciones iniciales. Se usa un método de un paso (Runge-Kutta, Euler, etc.) para obtener los primeros m valores de y_i . Luego se arranca con el método multipaso.

Ejemplo

- Ejemplo de construcción de una fórmula multipaso mediante el método de los *Coeficientes Indeterminados*.
- Sea la fórmula de 5 pasos:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx \simeq h [A f_i + B f_{i-1} + C f_{i-2} + D f_{i-3} + E f_{i-4}] \quad (1)$$

- El procedimiento es el siguiente: por 5 puntos puede hacerse pasar un polinomio de 4º grado. Se representará $f(x, y)$ como combinación de polinomios de 4º grado y se integrará entre x_i y x_{i+1} para obtener el término de la izquierda.
- Por comodidad se tomará $t_i = 0$, con lo que $t_{i+1} = 1$, $t_{i-1} = -1$, $t_{i-2} = -2$, $t_{i-3} = -3$, y $t_{i-4} = -4$.

- En vez de tomar polinomios cualesquiera, a los efectos de facilitar las operaciones se tomarán:

$$p_0(x) = 1$$

$$p_1(x) = t$$

$$p_2(x) = t(t+1)$$

$$p_3(x) = t(t+1)(t+2)$$

$$p_4(x) = t(t+1)(t+2)(t+3)$$

y con ello

$$f(x, y) = c_0 p_0 + c_1 p_1 + c_2 p_2 + c_3 p_3 + c_4 p_4 \quad (2)$$

- Realizando la integral, tenemos el lado izquierdo de (1):

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx = c_0 1 + c_1 \frac{1}{2} + c_2 \frac{5}{6} + c_3 \frac{9}{4} + c_4 \frac{251}{30}$$

- Para evaluar el lado derecho de (1) usamos la función (2) para obtener f_i , f_{i-1} , etc.

$$f_i = f(0) = c_0$$

$$f_{i-1} = f(-1) = c_0 - c_1$$

$$f_{i-2} = f(-2) = c_0 - 2c_1 + 2c_2$$

$$f_{i-3} = f(-3) = c_0 - 3c_1 + 6c_2 - 6c_3$$

$$f_{i-4} = f(-4) = c_0 - 4c_1 + 12c_2 - 24c_3 + 24c_4$$

multiplicando la primera expresión por A , la segunda por B , etc. (y siendo $h = 1$) se puede evaluar el lado derecho de (1).

- Igualando los factores de los coeficientes c_0 , c_1 , etc. de ambos miembros de (1) se obtiene:

$$\begin{aligned}
 A + B + C + D + E &= 1 \\
 -B - 2C - 3D - 4E &= 1/2 \\
 2C + 6D + 12E &= 5/6 \\
 -6D - 24E &= 9/4 \\
 24E &= 251/30
 \end{aligned} \tag{3}$$

- La resolución del sistema (3) proporciona los coeficientes:

$$A = \frac{1901}{720}; B = -\frac{2774}{720}; C = \frac{2616}{720}; D = -\frac{1274}{720}; E = \frac{251}{720}$$

y la fórmula multipaso es:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720}[1901 f_i - 2774 f_{i-1} + 2616 f_{i-2} - 1274 f_{i-3} + 251 f_{i-4}]$$

esta fórmula es conocida como Fórmula de Adams-Bashfort de 5 pasos.

Fórmulas de Adams-Bashfort

- Las fórmulas de Adams-Bashfort son explícitas ($b_m = 0$) y tienen $a_{m-1} = 1$ y el resto de los $a_j = 0$:

$$y_{i+1} = y_i + h [b_{m-1} f(x_i, y_i) + b_{m-2} f(x_{i-1}, y_{i-1}) + \dots + b_0 f(x_{i+1-m}, y_{i+1-m})]$$

- A-B de 2 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [3 f_i - f_{i-1}]$$

- A-B de 3 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [23 f_i - 16 f_{i-1} + 5 f_{i-2}]$$

- A-B de 4 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55 f_i - 59 f_{i-1} + 37 f_{i-2} - 9 f_{i-3}]$$

- A-B de 5 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720} [1901 f_i - 2774 f_{i-1} + 2616 f_{i-2} - 1274 f_{i-3} + 251 f_{i-4}]$$

Fórmulas de Adams-Moulton

- Las fórmulas de Adams-Moulton son implícitas ($b_m \neq 0$) y tienen $a_{m-1} = 1$ y el resto de los $a_j = 0$:

$$y_{i+1} = y_i + h [b_m f(x_{i+1}, y_{i+1}) + b_{m-1} f(x_i, y_i) + \dots + b_0 f(x_{i+1-m}, y_{i+1-m})]$$

- A-M de 2 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [5 f_{i+1} + 8f_i - 1f_{i-1}]$$

- A-M de 3 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9 f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

- A-M de 4 pasos:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720} [251 f_{i+1} + 646 f_i - 264 f_{i-1} + 106 f_{i-2} - 19 f_{i-3}]$$

- Orden de un método multipaso:

Es la cantidad de términos de la serie de Taylor que contiene la aproximación.

- El error de un método de orden m es $O(h^{m+1})$.
- Los métodos de Adams-Bashfort de m pasos, requieren m evaluaciones de funciones, y su error $O(h^{m+1})$. Luego son de orden m
- Los métodos de Adams-Moulton de m pasos, requieren $m + 1$ evaluaciones de funciones, y su error $O(h^{m+2})$. Luego son de orden $m + 1$
- Un método Adams-Bashfort de m pasos es comparable a un Adams-Moulton de $(m - 1)$ pasos.
- Es preferible un método de Adams-Moulton, ya que es más estable.

Métodos Predictor-Corrector

- Los métodos implícitos no siempre se pueden resolver fácilmente. La variable incógnita no está explicitada. Habría que resolverlo iterativamente (es una ecuación No Lineal).
- Un método práctico para utilizar las fórmulas implícitas es el denominado *Predictor-Corrector*.
- El mismo opera en dos pasos:
 - 1) Una *Predicción* del valor \tilde{y}_{i+1} mediante fórmulas explícitas;
 - 2) Una *Corrección* del valor y_{i+1} mediante una fórmula implícita, donde se usa el valor predicho \tilde{y}_{i+1} , del lado derecho del signo $=$.
- Una forma de Métodos Predictor-Corrector sería usar una fórmula de Adams-Bashfort (explícita) para predecir \tilde{y}_{i+1} ; y luego una fórmula de Adams-Moulton (implícita) para corrección.
- En general se usan fórmulas A-B y A-M del mismo orden.
- Además para calcular las condiciones iniciales necesarias (los m primeros valores de y_i), se usa un método de un paso (por ejemplo Runge-Kutta), del mismo orden que las fórmulas multipaso.

Sección 6

Estabilidad y convergencia

- Nos interesa analizar si los métodos utilizados son *convergentes*.
- Se dice que un método numérico que proporciona la solución y_i es *convergente*, si:

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_i = y(x_i)$$

donde h es el tamaño del paso; e $y(x_i)$ es la solución exacta. Y esto se da para todos los nodos x_i de la red usada.

- ¿Cómo puede verse si un método es convergente? (ya que la solución exacta no es conocida)

- Se dice que un método numérico es *consistente*, si la ecuación discretizada (o numerica), cuando $h \rightarrow 0$ coincide con la ecuación diferencial.
- Esto es equivalente a decir que el error de truncamiento local τ_i tiende a cero cuando $h \rightarrow 0$.

- Por ejemplo, al resolver la ecuación

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

con el metodo de Euler, la ecuación discreta queda

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i)$$

y vemos que cuando $h \rightarrow 0$ la estimación numérica en diferencias coincide con la derivada.

- Lo mismo se podría observar a partir de la serie de Taylor, donde el error al aproximar la derivada es:

$$\tau_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - f(x_i, y_i) = \frac{1}{2}hy''(\xi)$$

que tiende a cero cuando lo hace el tamaño de paso h .

- Para analizar la consistencia de los métodos multipaso se escribirá su fórmula general:

$$a_m y_i + a_{m-1} y_{i-1} + \dots + a_0 y_{i-m} = h [b_m f_i + b_{m-1} f_{i-1} + \dots + b_0 f_{i-m}]$$

- En las fórmulas que vimos, $a_m = 1$, $a_{m-1} = -1$, y los a_j restantes nulos.
- Además, si $b_m = 0 \rightarrow$ explícito; si $b_m = 1 \rightarrow$ implícito.
- Hay dos polinomios asociados a los coeficientes a_j y b_j :

$$\begin{cases} p(z) = a_m z^m + a_{m-1} z^{m-1} + \dots + a_0 \\ q(z) = b_m z^m + b_{m-1} z^{m-1} + \dots + b_0 \end{cases}$$

- Se puede demostrar que un método multipaso es *consistente*, si:

$$\begin{cases} p(1) = 0 \\ p'(1) = q(1) \end{cases}$$

- La consistencia es posible de verificar en un método numérico. Sin embargo la consistencia no siempre implica que el método sea convergente. Es preciso analizar la *estabilidad* del método.

Considérese, por ejemplo, el método multipaso

$$y_{i+1} = 2y_{i-1} - y_i + h\left(\frac{5}{2}f_{i-1} + \frac{1}{2}f_{i-2}\right)$$

que, puede verificarse, es consistente.

Si se resuelve con esa fórmula el problema $y' = 0$ con la condición inicial $y(0) = 0$, al ser $f = 0$ la fórmula queda

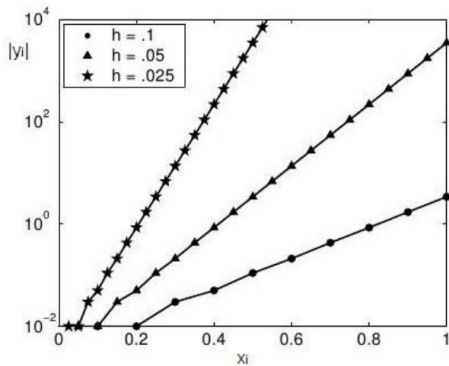
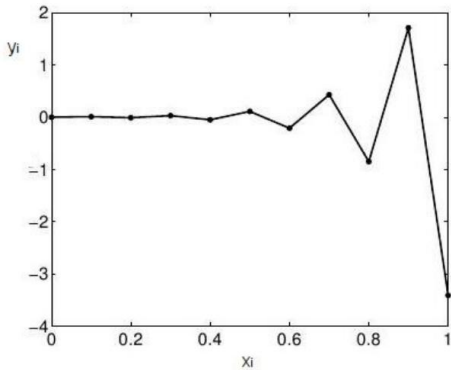
$$y_{i+1} = 2y_{i-1} - y_i$$

y para las condiciones $y_0 = 0$ y $y_1 = 0$ produce la solución exacta.

Sin embargo si las condiciones son $y_0 = 0$ y $y_1 = \epsilon$ la solución numérica “explota” luego de algunos pasos como se ve en la figura de la izquierda, donde se grafica y en función de x para $h = 0,1$ y $\epsilon = 0.01$.

Esto no se resuelve achicando el tamaño del paso. por el contrario, en la figura de la derecha se grafica $|y_i|$ en función de x_i para diferentes tamaños de paso h .

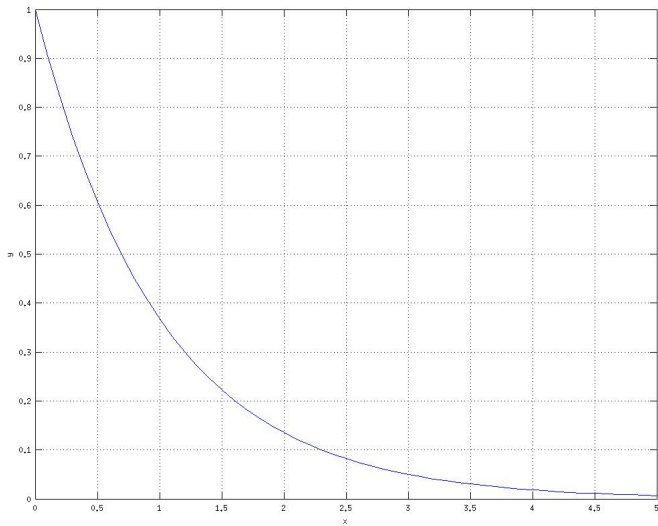
Consistencia



- La *estabilidad* hace referencia a que los errores a cada paso no se acumulen de manera que la solución crezca indefinidamente.
- Considérese el siguiente problema.
- Por ejemplo, el PVI

$$\begin{cases} y' = \lambda y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad 0 \leq x \leq \infty$$

donde $\lambda < 0$, tiene solución exacta: $y = e^{\lambda x}$ (graficada en la figura siguiente).



- Aplicando el método de Euler Progresivo:

$$y_{i+1} = y_i + h y'_i = y_i + \lambda h y_i = y_i(1 + \lambda h)$$

y dado que $y_0 = 1$

$$y_{i+1} = (1 + \lambda h)^{i+1}$$

- La solución exacta tiende a cero para $i \rightarrow \infty$, para que la solución numérica también lo haga es preciso que

$$|1 + \lambda h| < 1 \quad \text{o bien} \quad h < \frac{2}{|\lambda|}$$

- Para pasos $h > \frac{2}{|\lambda|}$, en este caso, el método de Euler Progresivo es inestable.

- Si se usa el método de Euler Regresivo:

$$y_{i+1} = y_i + h y'_{i+1} = y_i + \lambda h y_{i+1}$$

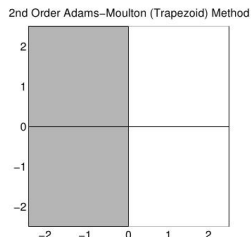
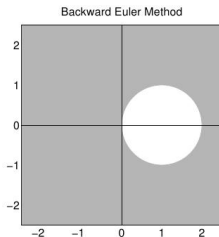
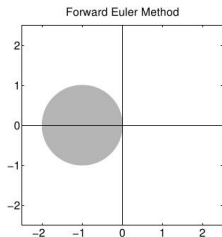
de donde

$$y_{i+1} = \left(\frac{1}{1 - \lambda h} \right)^{i+1}$$

que tiende a cero para $i \rightarrow \infty$ independientemente del valor de h .

- En forma similar puede mostrarse que también el método de Crank-Nicholson es estable independientemente del valor de h .
- El método de Euler Progresivo se dice *condicionalmente estable*, pues su estabilidad depende del tamaño del paso h .
- Los Métodos de Euler Regresivo y de Crank-Nicholson son *incondicionalmente estables*.

- Si λ puede ser complejo y se denomina $z = \lambda h$, las regiones de estabilidad para los métodos: de Euler progresivo, de Euler regresivo, y Crank-Nicholson se muestran en estas figuras en zonas grisadas



- Hay varias definiciones de estabilidad:
 - Un método se dice **absolutamente estable** cuando genera una solución del problema $y' = \lambda y$ con $y(0) = 1$, que tiende a cero cuando $x \rightarrow 0$
 - Un método se dice **A-estable** cuando es absolutamente estable para cualquier tamaño de paso (o sea que es incondicionalmente estable). Esto requiere que la región de estabilidad sea todo el semiplano complejo de z con parte real negativa.
 - Un método se dice **cero-estable** cuando la solución se mantiene acotada para pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales

- Para un *método multipaso* es sencillo analizar la condición de cero-estabilidad.
- Si todas las raíces del polinomio característico $p(z)$ se encuentran en la región $|z| \leq 1$, y si cada raíz con $|z| = 1$ es simple, se dice que el método multipaso cumple la *condición de raíz*.
- Y todo método que cumple la condición de raíz, es cero-estable.

- Se ha indicado que la consistencia por si sola no garantiza la convergencia de un método multipaso.
- Se debe verificar su estabilidad frente a perturbaciones de los datos iniciales, es decir que sea *cero-estable*.
- Con esto, la convergencia de un método multipaso esta garantizada por el siguiente teorema.
- Teorema:
Para que un método multipaso sea *convergente*, es necesario y suficiente que sea *cero-estable* y *consistente*.

- Ejemplo:

Para el método de Adams-Moulton de 2 pasos:

$$a_2 = 1; \quad a_1 = -1, \quad a_0 = 0; \quad b_2 = \frac{5}{12}; \quad b_1 = \frac{8}{12}, \quad b_0 = -\frac{1}{12}$$

$$p(z) = z^2 - z$$

$$q(z) = \frac{5}{12}z^2 + \frac{8}{12}z - \frac{1}{12}$$

- Las raíces de p : $z_1 = 1$; $z_2 = 0$

luego es cero-estable.

- $p(1) = 0$

$$p'(1) = 1$$

$$q(1) = 1$$

luego es consistente.

- Por ello es convergente

Resumiendo:

- Un método **de un paso**, si es consistente, es convergente.
- Si el método es **incondicionalmente estable**, el tamaño del paso h estará determinado por requisitos de precisión. El error de truncamiento global depende de h y disminuye con él.
- Si el método tiene **estabilidad condicional**, entonces el tamaño del paso h **debe** estar por debajo del tamaño crítico, para que haya estabilidad. A partir de allí, se puede disminuir por requisitos de precisión.
- Un método **multipaso**, debe ser consistente y cero-estable, para que sea convergente.
- A partir de allí, vale lo indicado para los métodos de un paso si la estabilidad fuese condicional.

Sección 7

Sistemas de EDO

- La solución de un sistema de EDO:

$$\begin{cases} y_1' = f_1 \\ y_2' = f_2 \\ y_3' = f_3 \\ \dots \\ y_k' = f_k \end{cases}$$

si se organizan las funciones incógnitas en un vector:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}$$

puede plantearse con las fórmulas vistas.

- Así la solución en el paso $i + 1$ será:

$$\mathbf{Y} = \phi(\mathbf{Y}_i, \mathbf{Y}_{i-1}, \dots)$$

donde ϕ es la función del método multipaso (o de un paso) utilizado.

EDO de orden superior

- Por ejemplo, si se tiene una EDO de segundo orden:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(0) = \bar{y}_0 \\ y'(0) = \bar{y}'_0 \end{cases}$$

puede reducirse a un sistema de EDO de primer orden mediante definición de una nueva variable $z = y'$:

- Así el problema anterior es equivalente al sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} z' = f(x, y, z) \\ y' = z \end{cases}$$

acompañado de las condiciones iniciales:

$$\begin{cases} z(0) = \bar{y}'_0 \\ y(0) = \bar{y}_0 \end{cases}$$

- Así pueden usarse los métodos vistos para ec. de primer orden, en la resolución de ecuaciones de orden superior.

En este capítulo hemos visto:

- Qué son los PVI
- Cómo garantizar que un PVI esté bien planteado.
- Métodos numéricos para resolver PVI
 - Métodos de un paso
 - Método de Euler
 - Metodos de Taylor
 - Metodos de Runge Kuta
 - Métodos multipaso
 - Método de Adams-Bashfort
 - Metodo de Adams-Multon
 - Metodo Predictor-Corrector
- Estabilidad y convergencia
- Sistemas de EDO