Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias

María González Taboada

Mayo, 2007

Esquema:

Introducción

- **Ecuación diferencial ordinaria (e.d.o.) de primer orden**:

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

  La incógnita es la función $y = y(x)$.

- **Condición inicial**:

$$y(x_0) = y_0$$

- Problema de valor inicial (P.V.I.):

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

Introducción

- Este tipo de problemas solo puede resolverse de manera exacta en algunos casos particulares.
- En general, es necesario emplear métodos numéricos que proporcionan una aproximación de la solución en un número finito de puntos.
- En los puntos intermedios, la solución se aproxima normalmente por interpolación de Hermite.

Introducción

- Dado $h > 0$, consideramos los puntos

$$x_k = x_0 + k\,h \qquad k = 0, 1, \ldots$$

- Un método numérico para resolver el P.V.I. proporcionará aproximaciones y_k de $y(x_k)$, para $k = 0, 1, \ldots$.
- De hecho, al implementar el método numérico en el ordenador, se obtienen valores, $\tilde{y}_k$, para $k = 0, 1, \ldots$, afectados por errores de redondeo.

Tipos de errores

- Error de discretización:

$$e_k = |y(x_k) - y_k|$$

- Error de redondeo:

$$r_k = |y_k - \tilde{y}_k|$$

- Error total:

$$E_k = |y(x_k) - \tilde{y}_k|$$

  Se verifica que

$$E_k \leq e_k + r_k$$

Clasificación de los métodos numéricos para e.d.o.'s

- Se distinguen:
  - **Métodos de un paso:**
    y_{k+1} se calcula a partir de y_k.
  - **Métodos multipaso:**
    Un método es de p pasos si y_{k+1} se calcula a partir de $y_k, y_{k-1}, \ldots, y_{k-p+1}$.
- Otra clasificación:
  - **Métodos explícitos:**
    y_{k+1} se obtiene directamente, mediante una fórmula explícita.
  - **Métodos implícitos:**
    Para calcular y_{k+1}, hay que resolver una ecuación o sistema de ecuaciones (generalmente no lineal).

Métodos de un paso

- **Forma general de los métodos de un paso:**
  1. $y_0 = y(x_0)$
  2. Para $k \geq 0$,

$$y_{k+1} = y_k + h\,\phi(x_k, y_k, x_{k+1}, y_{k+1})$$

- La función ϕ se llama función incremento.
- Si ϕ depende de y_{k+1}, el método es implícito.

  En caso contrario ($\phi = \phi(x_k, y_k, x_{k+1})$), el método es explícito.

Procedimiento general para obtener métodos de un paso

1. Se parte de la e.d.o.

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

2. Se integra la e.d.o. en el intervalo $[x_k, x_{k+1}]$:

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx$$

3. Se aproxima la integral mediante una fórmula de integración numérica.

Método de Euler explícito

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

- Integrando la e.d.o. en $[x_k, x_{k+1}]$, se tiene que:

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx$$

- La integral se aproxima mediante la fórmula del rectángulo con nodo x_k:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx \approx h\, f(x_k, y(x_k))$$

- Entonces, queda que

$$y(x_{k+1}) \approx \; y(x_k) \; + \; h\, f(x_k, y(x_k))$$

Método de Euler explícito

- Esto motiva la definición del método de Euler explícito:
  1. $y_0 = y(x_0)$
  2. Para $k \geq 0$, $\quad y_{k+1} = y_k + h\,f(x_k, y_k)$
- En este caso,

$$\phi(x_k, y_k, x_{k+1}, y_{k+1}) = f(x_k, y_k)$$

Método de Euler implícito

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

- Integrando la e.d.o. en $[x_k, x_{k+1}]$, se tiene que:

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx$$

- La integral se aproxima mediante la fórmula del rectángulo con nodo x_{k+1}:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx \approx h\, f(x_{k+1}, y(x_{k+1}))$$

- Entonces, queda que

$$y(x_{k+1}) \approx \ y(x_k) \ + \ h\, f(x_{k+1}, y(x_{k+1}))$$

Método de Euler implícito

- Esto motiva la definición del método de Euler implícito:
  1. $y_0 = y(x_0)$
  2. Para $k \geq 0$, $\quad y_{k+1} = y_k + h\,f(x_{k+1}, y_{k+1})$
- En este caso,

$$\phi(x_k, y_k, x_{k+1}, y_{k+1}) = f(x_{k+1}, y_{k+1})$$

- En general, para determinar y_{k+1}, es necesario resolver una ecuación no lineal:

$$\alpha = y_k + h\,f(x_{k+1}, \alpha)$$

  Normalmente, se resuelve por un método de punto fijo, con $g(\alpha) = y_k + h\,f(x_{k+1}, \alpha)$.

Método del trapecio

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

- Integrando la e.d.o. en $[x_k, x_{k+1}]$, se tiene que:

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx$$

- La integral se aproxima mediante la fórmula del trapecio:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx \approx \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y(x_k)) + f(x_{k+1}, y(x_{k+1}))\Big)$$

- Entonces, queda que

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y(x_k)) + f(x_{k+1}, y(x_{k+1}))\Big)$$

Método del trapecio

- Esto motiva la definición del método del trapecio:
  1. $y_0 = y(x_0)$
  2. Para $k \geq 0$,

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})\Big)$$

- En este caso,

$$\phi(x_k, y_k, x_{k+1}, y_{k+1}) = \frac{1}{2}\Big(f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})\Big)$$

- Se trata de un método implícito (para determinar y_{k+1} habrá que resolver, en general, una ecuación no lineal).

Métodos de Taylor

- Los métodos de Taylor se basan en un desarrollo de Taylor de la solución de la e.d.o.
- Suponemos que la solución de la e.d.o.

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

  es suficientemente derivable.
- Haciendo un desarrollo de Taylor de orden p de la solución en el punto x_k y despreciando el resto:

  $$y(x_k + h) \approx y(x_k) + h\, y'(x_k) + \frac{h^2}{2}\, y''(x_k) + \ldots + \frac{h^p}{p!} y^{p)}(x_k)$$

  El método de Taylor de orden p se deduce a partir de esta fórmula.
- Solo consideraremos los casos $p = 1$ y $p = 2$.

Método de Taylor de orden 1

- Haciendo un desarrollo de Taylor de orden 1 de la solución en el punto x_k y despreciando el resto, se tiene que:

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + h\, y'(x_k)$$

- Como y es la solución de la e.d.o.

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

de modo que

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + h\, f(x_k, y(x_k))$$

- A partir de esta ecuación, se define el método de Taylor de orden 1, que resulta ser el método de Euler explícito.

Método de Taylor de orden 2

- Haciendo un desarrollo de Taylor de orden 2 de la solución en el punto x_k y despreciando el resto, se tiene que:

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + h\,y'(x_k) + \frac{h^2}{2}\,y''(x_k)$$

- Sabemos que $y'(x_k) = f(x_k, y(x_k))$.
- Queda calcular $y''(x_k)$:

$$y''(x_k) = \frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y(x_k)) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y(x_k))f(x_k, y(x_k))$$

Método de Taylor de orden 2

- Sustituyendo las expresiones de $y'(x_k)$ e $y''(x_k)$, resulta que:

$$
\begin{aligned}
y(x_{k+1}) &\approx y(x_k) + h\, f(x_k, y(x_k)) \\
&+ \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y(x_k)) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y(x_k)) f(x_k, y(x_k))\right)
\end{aligned}
$$

- Esta expresión motiva la definición del método de Taylor de orden 2:

1. $y_0 = y(x_0)$
2. Para $k \geq 0$,

$$y_{k+1} = y_k + h\, f(x_k, y_k) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y_k) f(x_k, y_k)\right)$$

Método de Taylor de orden 2

- En el método de Taylor de orden 2,

$$\phi(x_k, y_k, x_{k+1}, y_{k+1}) = f(x_k, y_k) +$$

$$+ \frac{h}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y_k) f(x_k, y_k)\right)$$

- Se trata de un método explícito.

Algunos comentarios sobre los métodos de Taylor

- Los métodos de Taylor son métodos explícitos.
- Para valores de p elevados, consiguen una precisión muy alta.
- Presentan el inconveniente de que son costosos:

  En el método de Taylor de orden p, hay que evaluar *en cada paso* las derivadas parciales de la función f hasta el orden $p - 1$.

Métodos de Runge-Kutta

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

- Integrando la e.d.o. en $[x_k, x_{k+1}]$, se tiene que:

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx$$

- La integral se aproxima mediante una fórmula de integración numérica con q nodos:

$$x_{k,i} = x_k + h\, c_i \qquad i = 1, 2, \ldots, q$$

donde $c_i \in [0,1]$, para $i = 1, 2, \ldots, q$.

Métodos de Runge-Kutta

- Dada una fórmula de integración numérica en $[0,1]$:

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{q} \beta_i\, f(c_i)$$

usando las propiedades de las fórmulas de integración numérica (invarianza por traslaciones y variación por homotecias), se deduce una fórmula de integración numérica en $[x_k, x_{k+1}]$:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\,dx \approx h \sum_{i=1}^{q} \beta_i\, f(x_{k,i}, y(x_{k,i}))$$

Métodos de Runge-Kutta

- Entonces tenemos que

$$y(x_{k+1}) \approx y(x_k) + h \sum_{i=1}^{q} \beta_i f(x_{k,i}, y(x_{k,i}))$$

- En la expresión anterior, aparece el valor de la solución en los q nodos $x_{k,i} \in [x_k, x_{k+1}]$, $i = 1, 2, \ldots, q$.
- Para determinar estos valores, integramos la e.d.o. en $[x_k, x_{k,i}]$:

$$y(x_{k,i}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k,i}} f(x, y(x))\, dx$$

Métodos de Runge-Kutta

- Dada la fórmula de integración numérica

$$\int_0^{c_i} f(x)\,dx \approx \sum_{j=1}^{q} a_{ij}\, f(c_j)$$

usando otra vez las propiedades de las fórmulas de integración numérica (invarianza por traslaciones y variación por homotecias), se aproxima:

$$\int_{x_k}^{x_{k,i}} f(x, y(x))\,dx \approx h \sum_{j=1}^{q} a_{ij}\, f(x_{k,j}, y(x_{k,j}))$$

Métodos de Runge-Kutta

- Entonces

$$y(x_{k,i}) \approx y(x_k) + h\sum_{j=1}^{q} a_{ij}\, f(x_{k,j}, y(x_{k,j}))$$

- El método de Runge-Kutta correspondiente es:

1. $y_0 = y(x_0)$
2. Para $k \geq 0$,
   1. Calcular
   $$y_{k,i} = y_k + h\sum_{j=1}^{q} a_{ij}\, f(x_{k,j}, y_{k,j}) \qquad i = 1, 2, \ldots, q$$
   2. Calcular $\quad y_{k+1} = y_k + h\sum_{i=1}^{q} \beta_i\, f(x_{k,i}, y_{k,i})$

Métodos de Runge-Kutta: observaciones

- En el caso más general, para calcular las aproximaciones intermedias $y_{k,i}$, $i = 1, 2, \ldots, q$, es necesario resolver un sistema de q ecuaciones con q incógnitas, en general no lineal.
- Si la matriz $A = (a_{ij})$ es estrictamente triangular inferior,

$$y_{k,i} = y_k + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(x_{k,j}, y_{k,j}) \qquad i = 1, 2, \ldots, q$$

  En este caso, no es necesario resolver un sistema (el método es explícito).

Métodos de Runge-Kutta: observaciones

- Los nodos de cuadratura, c_i, y los pesos de las fórmulas, a_{ij} y β_i, se dan habitualmente en forma de tabla:

$$
\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1q} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2q} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_q & a_{q1} & a_{q2} & \dots & a_{qq} \\
\hline
 & \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_q
\end{array}
$$

Diagrama de Butcher

Referencias

- R.L. Burden y J.D. Faires, *Análisis numérico*, Thomson, 2002.
- J.F. Epperson, *An introduction to numerical methods and analysis*, John Wiley & Sons, 2002.
- E. Hairer, S.P. Norsett y G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, Springer, 2002.
- A. Quarteroni y F. Saleri, *Cálculo científico con* MATLAB *y Octave*, Springer, 2006.
- L.F. Shampine, *Design of software for ODEs*, J. Comput. Appl. Maths. 205 (2007) 901-911.