Tema 3: Métodos numéricos para resolver Problemas de Valores Iniciales

Métodos Numéricos II

Departamento de Matemática Aplicada

Universidad de Granada

Curso 2021/22

Contenidos

Recordamos...

Un método multipaso para el PVI

$$\boxed{\begin{array}{l} x' = f(t,x) \\ x(t_0) = \mu \end{array}} \qquad \begin{array}{l} f : D \subseteq \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R} \\ (t_0, \mu) \in D \end{array} \tag{1}$$

es de la forma

$$\begin{cases} x_0, x_1, \ldots, x_{k-1} = \text{ valores iniciales} \\ x_{n+k} = \displaystyle\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h\Phi(x_{n+k}, x_{n+k-1}, \ldots, x_n; t_n, h) \end{cases}$$

donde la función Φ cumple la condición de Lipschitz

$$|\Phi(u_0, \ldots, u_k; t, h) - \Phi(v_0, \ldots, v_k; t, h)| \leq M \sum_{j=0}^{k} |u_j - v_j|$$

Métodos multipaso lineales (MML)

Nos limitaremos aquí a los métodos multipaso en los que la función Φ es lineal.

Método multipaso lineal MML

Diremos que un método de k pasos es un método multipaso lineal (MML) si se puede escribir en la forma

$$x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$$

donde se usa la notación $f_i = f(t_i, x_i)$.

Observaciones:

- Podría ocurrir que $\alpha_0 = \beta_0 = 0$ con lo que el método ya no sería de k pasos. Así, el método anterior es exactamente de k pasos si al menos uno de estos dos coeficientes no es nulo, esto es, $|\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0$.
- Si $\beta_k = 0$ entonces el método es explícito; de lo contrario es implícito.

Métodos multipaso lineales (MML)

En el caso $\beta_k \neq 0$ (método MML implícito), se plantea la cuestión de la existencia de solución para x_{n+k}.

Proposición

Sea $f(t,x)$ lipschitziana con constante de Lipschitz L y sea el método con $\beta_k \neq 0$.

Si $h < \dfrac{1}{|\beta_k| L}$ entonces $x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$ admite solución.

Métodos multipaso lineales (MML)

Gran parte del análisis de los MML se fundamenta en las propiedades que satisfacen los polinomios asociados.

Polinomios característicos de un MML

Dado el MML $x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$,

- Primer polinomio característico: $p(\lambda) = \lambda^k - \alpha_{k-1}\lambda^{k-1} - \cdots - \alpha_0$
- Segundo pol. característico: $q(\lambda) = \beta_k \lambda^k + \beta_{k-1}\lambda^{k-1} + \cdots + \beta_0$

Un MML es consistente con el PVI (1) si y solo si se verifica

1. $p(1) = 0$, es decir, $\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j = 1$,
2. $p'(1) = q(1)$, es decir, $k - \sum_{j=1}^{k-1} j\alpha_j = \sum_{j=0}^{k} \beta_j$.

Diseño de MML

Tanto para ayudarnos en la obtención de MML como para comprobar su orden, nos será útil el operador lineal asociado

$$\mathcal{L}_k(z(t);h) = z(t+kh) - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j z(t+jh) - h \sum_{j=0}^{k} \beta_j z'(t+jh)$$

donde $z \in \mathcal{C}^1[a,b]$.

Con esto es fácil observar que el error de truncatura local es

$$R_{n+k} = \mathcal{L}_k(x(t_n);h)$$

y su orden será $p \geq 1$ si y solo si $\mathcal{L}_k(z(t);h) = O(h^{p+1})$.

Diseño de MML

Si hacemos el desarrollo de Taylor de $z(t+jh)$ y $z'(t+jh)$ obtenemos:

$$z(t+jh) = z(t) + z'(t)jh + \frac{z''(t)}{2}j^2h^2 + \cdots + \frac{z^{(m)}}{m!}j^mh^m + \dots$$
$$z'(t+jh) = z'(t) + z''(t)jh + \frac{z'''(t)}{2}j^2h^2 + \cdots + \frac{z^{(m+1)}}{m!}j^mh^m + \dots$$

Sustituyendo en

$$\mathcal{L}_k(z(t);h) = z(t+kh) - \sum_{j=0}^{k-1}\alpha_j z(t+jh) - h\sum_{j=0}^{k}\beta_j z'(t+jh)$$

se tiene:

$$\mathcal{L}_k(z(t);h) = \Big(1 - \sum_{j=0}^{k-1}\alpha_j\Big)z(t) + \Big(k - \sum_{j=0}^{k-1}j\alpha_j - \sum_{j=0}^{k}\beta_j\Big)hz'(t)$$
$$+\Big(\frac{k^2}{2} - \sum_{j=0}^{k-1}\frac{j^2}{2}\alpha_j - \sum_{j=0}^{k}j\beta_j\Big)h^2z''(t) + \Big(\frac{k^3}{3!} - \sum_{j=0}^{k-1}\frac{j^3}{3!}\alpha_j - \sum_{j=0}^{k}\frac{j^2}{2!}\beta_j\Big)h^3z'''(t) + \dots$$

Diseño de MML

Como consecuencia de lo anterior:

Proposición

Si $z(t)$ es suficientemente derivable, entonces

$$\mathcal{L}_k(z(t);h) = C_0 z(t) + C_1 z'(t)h + \cdots + C_m z^{(m)}(t)h^m + \cdots$$

donde

$$\boxed{\begin{array}{rcl} C_0 & = & 1 - \displaystyle\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j; \\ C_1 & = & k - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} j\alpha_j - \sum_{j=0}^{k} \beta_j; \\ C_m & = & \dfrac{k^m}{m!} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} \frac{j^m}{m!}\alpha_j - \sum_{j=1}^{k} \frac{j^{m-1}}{(m-1)!}\beta_j, \quad m = 2, 3, \ldots \end{array}}$$

Diseño de MML

Como $\mathcal{L}_k(z(t);h) = C_0 z(t) + C_1 z'(t)h + \cdots + C_m z^{(m)}(t)h^m + \cdots$,
si $C_0 = C_1 = \cdots = C_p = 0$ y $C_{p+1} \neq 0$ entonces:

$$R_{n+k} = \mathcal{L}_k(x(t_n);h) = C_{p+1}h^{p+1}x^{(p+1)}(t_n) + \ldots$$

de donde se deduce el siguiente Teorema:

Teorema (Orden de un MML)

El MML

$$x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h\sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$$

es de orden exactamente $p \geq 1$ si y solo si

$$C_0 = C_1 = \cdots = C_p = 0 \text{ y } C_{p+1} \neq 0.$$

La constante C_{p+1} se llama constante principal de error y el término $C_{p+1}h^{p+1}x^{(p+1)}(t_n)$ parte principal del error de truncatura local.

Diseño de MML

Teniendo en cuenta estas definiciones y resultados, pueden obtenerse MML de k pasos y orden p

$$x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$$

resolviendo sistemas de ecuaciones lineales de $p+1$ ecuaciones con $2k$ o $2k+1$ incógnitas α_j y β_j según se desee un MML explícito o implícito, respectivamente.

$$\left.\begin{array}{rcll}
C_0 & = & 1 - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j & = 0 \\
C_1 & = & k - \sum_{j=1}^{k-1} j\alpha_j - \sum_{j=0}^{k} \beta_j & = 0 \\
 & \vdots & & \\
C_p & = & \frac{k^p}{p!} - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{j^p}{p!}\alpha_j - \sum_{j=1}^{k} \frac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j & = 0
\end{array}\right\}$$

Diseño de MML

Por tanto, en principio parece factible obtener:

- MML explícitos de k pasos y orden $p = 2k - 1$ ($p + 1$ ecuaciones y $2k$ incógnitas, $p + 1 = 2k$) y
- MML implícitos de k pasos y orden $p = 2k$ ($p + 1$ ecuaciones y $2k + 1$ incógnitas, $p + 1 = 2k + 1$).

Sin embargo, podrían no ser convergentes. El siguiente resultado debido a Dahlquist limita el orden de los MML convergentes.

Teorema (Dahlquist)

El orden máximo de un MML

$$x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f_{n+j}$$

de k pasos cero-estable (o convergente) es $p = k + 1$ si k es impar, o $p = k + 2$ si k es par. Además existen métodos de orden máximo y son implícitos.

Diseño de MML

¿Qué métodos podrían tener orden máximo según el teorema de Dahlquist y máximo *global* teórico?

Hemos visto que el máximo global es $p = 2k$ (implícitos), así que dependiendo de la paridad de k tendría que ser $k+1 = 2k$ o $k+2 = 2k$, lo cual solo deja dos posibilidades:

$$k+1 = 2k \quad \Rightarrow \quad k = 1 \text{ y } p = 2$$

$$k+2 = 2k \quad \Rightarrow \quad k = 2 \text{ y } p = 4$$

El método del trapecio y el método de Simpson, del que veremos ejemplos más adelante, corresponden con el primer y segundo caso respectivamente.

Un método con orden máximo global se califica de óptimo y maximal.

MML basados en cuadraturas

Una de las principales vías de obtención de MML para el PVI (1) es utilizando las fórmulas de integración numérica de tipo interpolatorio clásico vistas en el Tema 2.

Supongamos que deseamos diseñar un MML de k pasos. Teniendo en cuenta que la ecuación diferencial

$$x'(t) = f(t, x(t))$$

se puede expresar de forma equivalente como

$$x(\tau_2) - x(\tau_1) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} f(s, x(s))\, ds,$$

entonces podemos escribir

$$x(t_{n+k}) - x(t_{n+k-q}) = \int_{t_{n+k-q}}^{t_{n+k}} f(s, x(s))\, ds$$

con q comprendido entre 1 y k.

MML basados en cuadraturas

Entonces tendremos para nuestro método:

$$x_{n+k} = x_{n+k-q} + \int_{t_{n+k-q}}^{t_{n+k}} f(s, x(s))\, ds$$

donde ahora para aproximar la integral se puede aplicar una fórmula de cuadratura basada en un cierto subconjunto de nodos anteriores $\{t_j\} \subseteq \{t_n, \ldots, t_{n+k}\}$ y sus correspondientes $\{f_j\} \subseteq \{f_n, \ldots, f_{n+k}\}$.

Por simplificar supongamos un subconjunto de nodos consecutivos desde t_{n+m} hasta t_{n+k-r} (no tiene mucha utilidad un subconjunto de nodos no uniformemente espaciados).

Tanto m como r pueden tomar valores enteros desde 0 hasta k, pero para que haya como mínimo un nodo se ha de cumplir $m + r \leq k$. No hay inconveniente en que algunos de los nodos caigan fuera del intervalo de integración $[t_{n+k-q}, t_{n+k}]$.

MML basados en cuadraturas

Aplicando a la integral la correspondiente fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio clásico en los nodos elegidos, tenemos

$$\int_{t_{n+k-q}}^{t_{n+k}} f(s,x(s))\,ds \approx h\sum_{j=m}^{k-r}\beta_j f_{n+j}$$

lo cual nos permite escribir el MML basado en cuadratura

$$\boxed{x_{n+k} = x_{n+k-q} + h\sum_{j=m}^{k-r}\beta_j f_{n+j}.}$$

que será implícito si $r=0$, explícito en caso contrario.

Por otro lado, para que el método resultante sea realmente de k pasos, debe aparecer x_n en algún lugar por lo que o bien $q=k$ o bien $m=0$. El parámetro q es independiente de m y de r.

Dependiendo de los valores de q, m, r surgen algunas conocidas familias de métodos. Se citan seguidamente.

Métodos tipo Adams

Son aquellos con $q = 1$ (y por tanto $m = 0$).

$$x_{n+k} = x_{n+k-1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-r} f_{n+k-r})$$

En este caso $\alpha_{k-1} = 1$ y todas las demás $\alpha_j = 0$. Entonces:

$$\left.\begin{array}{rcl}
1 - \displaystyle\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j & = & 0 \\
k - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} j\alpha_j - \sum_{j=0}^{k} \beta_j & = & 0 \\
\vdots & & \\
\dfrac{k^p}{p!} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} \frac{j^p}{p!}\alpha_j - \sum_{j=1}^{k} \frac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j & = & 0
\end{array}\right\} \Rightarrow
\begin{array}{l}
1 - 1 \\
k - (k-1) - \displaystyle\sum_{j=0}^{k-r} \beta_j \\
\vdots \\
\dfrac{k^p}{p!} - \dfrac{(k-1)^p}{p!} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-r} \frac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j
\end{array}$$

Métodos tipo Adams

Son aquellos con $q = 1$ (y por tanto $m = 0$).

$$x_{n+k} = x_{n+k-1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-r} f_{n+k-r})$$

En este caso $\alpha_{k-1} = 1$ y todas las demás $\alpha_j = 0$. Entonces:

$$\left.\begin{array}{rcl}
1 - \displaystyle\sum_{j=0}^{k-r} \beta_j & = & 0 \\
\dfrac{k^2 - (k-1)^2}{2} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-r} j\beta_j & = & 0 \\
 & \vdots & \\
\dfrac{k^p - (k-1)^p}{p!} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-r} \dfrac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j & = & 0
\end{array}\right\}$$

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

Son métodos tipo Adams explícitos con exactitud máxima: $q = 1$, $m = 0$, $r = 1$

$$x_{n+k} = x_{n+k-1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-1} f_{n+k-1}).$$

Deben cumplir:

$$\left.\begin{array}{rcl} 1 - \displaystyle\sum_{j=0}^{k-1} \beta_j & = & 0 \\ \dfrac{k^2 - (k-1)^2}{2} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} j\beta_j & = & 0 \\ & \vdots & \\ \dfrac{k^p - (k-1)^p}{p!} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} \dfrac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j & = & 0 \end{array}\right\}$$

Debe ser $p = k$ pues tenemos en este caso k incógnitas.

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

Ejemplos:

- Para $k = 1$:

$$x_{n+1} = x_n + h\beta_0 f_n$$

donde debe cumplirse

$$C_1 = 1 - \beta_0 = 0 \;\Rightarrow\; \beta_0 = 1 \;\Rightarrow\; x_{n+1} = x_n + hf_n$$

es el método de Euler.

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

- Para $k = 2$[1] es:

$$x_{n+2} = x_{n+1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1})$$

donde debe cumplirse[2]:

$$\left.\begin{array}{rcl} 1 - \beta_0 - \beta_1 & = & 0 \\ \dfrac{2^2 - 1^2}{2} - \beta_1 & = & 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \ \beta_1 = \frac{3}{2}, \beta_0 = -\frac{1}{2}$$

Entonces: $x_{n+2} = x_{n+1} + \frac{h}{2}(3f_{n+1} - f_n)$.

En este caso, el error de truncatura local es: $R_{n+2} = \frac{5}{12}x'''(\mu_n)h^3$

[1] $x_{n+k} = x_{n+k-1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-1} f_{n+k-1})$

[2] $1 - \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j = 0, \frac{k^2-(k-1)^2}{2} - \sum_{j=1}^{k-r} j\beta_j = 0 \ldots, \frac{k^p-(k-1)^p}{p!} - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j = 0$

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

Para $k = 2$ veamos cómo se deduce la fórmula utilizando integración e interpolación:

$$x(t_{n+2}) - x(t_{n+1}) = \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} x'(t)dt = \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} f(t, x(t))dt$$

Sustituimos el integrando por su interpolante de grado 1 (con nodos t_{n+1} y t_n) más el resto:

$$\int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} f(t, x(t))dt = \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} (P_1(t) + R(t))dt$$

Observemos que si usamos para interpolar el nodo t_{n+2} obtendríamos un método implícito. Si se usa rectángulo izquierda se obtiene Euler desplazado. Por este motivo se utilizan t_{n+1} y t_n.

Usando las expresiones de P_1 y R:

$$P_1(t) = f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) + \frac{f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) - f(t_n, x(t_n))}{h}(t - t_{n+1})$$

$$R(t) = f[t_n, t_{n+1}, t](t - t_n)(t - t_{n+1})$$

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

(Caso $k = 2$, cont.)
Tenemos:

$$\int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} P_1(t)dt$$
$$= \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} \Big(f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) + \frac{f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) - f(t_n, x(t_n))}{h} (t - t_{n+1}) \Big) dt$$
$$= f(t_{n+1}, x(t_{n+1}))h + \frac{f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) - f(t_n, x(t_n))}{h} \frac{h^2}{2}$$
$$= \frac{h}{2} \Big(3f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) - f(t_n, x(t_n)) \Big)$$

de donde se obtiene la fórmula: $x_{n+2} = x_{n+1} + \frac{h}{2}(3f_{n+1} - f_n)$.

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

(Caso $k = 2$, cont.)
En cuanto al error:

$$\begin{aligned}
\int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} R(t)dt &= \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} f[t_n, t_{n+1}, t](t - t_n)(t - t_{n+1})dt \\
&= f[t_n, t_{n+1}, \xi] \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} (t - t_n)(t - t_{n+1})dt \\
&= \frac{f''(\mu_n)}{2!} \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} (t - t_{n+1} + t_{n+1} - t_n)(t - t_{n+1})dt \\
&= \frac{f''(\mu_n)}{2} \int_{t_{n+1}}^{t_{n+2}} \Big((t - t_{n+1})^2 + h(t - t_{n+1})\Big)dt \\
&= \frac{x'''(\mu_n)}{2}\Big(\frac{h^3}{3} + h\frac{h^2}{2}\Big) = \frac{5}{12}x'''(\mu_n)h^3
\end{aligned}$$

Entonces: $R_{n+2} = \frac{5}{12}x'''(\mu_n)h^3$

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

- Para $k = 3$[3] es:

$$x_{n+3} = x_{n+2} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \beta_2 f_{n+2})$$

donde debe cumplirse[4]:

$$\left.\begin{array}{lcl} 1 - \beta_0 - \beta_1 - \beta_2 & = & 0 \\ \dfrac{3^2 - 2^2}{2} - \beta_1 - 2\beta_2 & = & 0 \\ \dfrac{3^3 - 2^3}{6} - \dfrac{1^2}{2}\beta_1 - \dfrac{2^2}{2}\beta_2 & = & 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \ \beta_2 = \frac{23}{12}, \beta_1 = -\frac{16}{12}, \beta_0 = \frac{5}{12}$$

Entonces: $x_{n+3} = x_{n+2} + \frac{h}{12}(5f_n - 16f_{n+1} + 23f_{n+2})$.

En este caso, el error de truncatura local es: $R_{n+3} = \frac{3}{8}x^{(iv)}(\mu_n)h^4$

¿A qué tipo de fórmula de integración numérica corresponde?

[3] $x_{n+k} = x_{n+k-1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-1} f_{n+k-1})$

[4] $1 - \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j = 0, \frac{k^2-(k-1)^2}{2} - \sum_{j=1}^{k-r} j\beta_j = 0 \ldots, \frac{k^p-(k-1)^p}{p!} - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j = 0$

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

- Para $k = 4$ es:

$$x_{n+4} = x_{n+3} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \beta_2 f_{n+2} + \beta_3 f_{n+3})$$

donde debe cumplirse:

$$\left.\begin{array}{rcl}
1 - \beta_0 - \beta_1 - \beta_2 - \beta_3 & = & 0 \\
\dfrac{3^2 - 2^2}{2} - \beta_1 - 2\beta_2 - 3\beta_3 & = & 0 \\
\dfrac{3^3 - 2^3}{6} - \dfrac{1^2}{2}\beta_1 - \dfrac{2^2}{2}\beta_2 - \dfrac{3^2}{2}\beta_3 & = & 0 \\
\dfrac{3^4 - 2^4}{24} - \dfrac{1^3}{6}\beta_1 - \dfrac{2^3}{6}\beta_2 - \dfrac{3^3}{6}\beta_3 & = & 0
\end{array}\right\}$$

Entonces: $x_{n+4} = x_{n+3} + \frac{h}{24}(-9f_n + 37f_{n+1} - 59f_{n+2} + 55f_{n+3})$.

En este caso, el error de truncatura local es: $R_{n+4} = \frac{251}{720}x^{(v)}(\mu_n)h^5$

Métodos de Adams-Bashforth (AB)

- Para $k = 5$ es:

$$x_{n+5} = x_{n+4} + \frac{h}{720}(1901 f_{n+4} - 2774 f_{n+3} + 2616 f_{n+2} - 1274 f_{n+1} + 251 f_n)$$

El error de truncatura local es: $R_{n+5} = \frac{95}{288} x^{(vi)}(\mu_n) h^6$

Métodos de Adams-Moulton (AM)

Son métodos tipo Adams implícitos con exactitud máxima: $q = 1$, $m = 0$, $r = 0$

$$x_{n+k} = x_{n+k-1} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_k f_{n+k}).$$

Deben cumplir:

$$\left.\begin{array}{rcl} 1 - \displaystyle\sum_{j=0}^{k} \beta_j & = & 0 \\ \dfrac{k^2 - (k-1)^2}{2} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k} j\beta_j & = & 0 \\ & \vdots & \\ \dfrac{k^p - (k-1)^p}{p!} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \dfrac{j^{p-1}}{(p-1)!}\beta_j & = & 0 \end{array}\right\}$$

Debe ser $p = k + 1$ pues tenemos en este caso $k + 1$ incógnitas.

Métodos de Adams-Moulton (AM)

- Para $k = 1$: $x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})$. (Método del trapecio) con error de truncatura local: $R_{n+1} = -\frac{1}{12}x^{(iii)}(\mu_n)h^3$.
- Para $k = 2$:

$$x_{n+2} = x_{n+1} + \frac{h}{12}(-f_n + 8f_{n+1} + 5f_{n+2}).$$

  con error de truncatura local: $R_{n+2} = -\frac{1}{24}x^{(iv)}(\mu_n)h^4$.
- Para $k = 3$:

$$x_{n+3} = x_{n+2} + \frac{h}{24}(f_n - 5f_{n+1} + 19f_{n+2} + 9f_{n+3}).$$

  con error de truncatura local: $R_{n+3} = -\frac{19}{720}x^{(v)}(\mu_n)h^5$.
- Para $k = 4$:

$$x_{n+4} = x_{n+3} + \frac{h}{720}(-19f_n + 106f_{n+1} - 264f_{n+2} + 646f_{n+3} + 251f_{n+4})$$

  con error de truncatura local: $R_{n+1} = -\frac{3}{160}x^{(vi)}(\mu_n)h^6$.

Observaciones sobre los métodos de Adams

Comparamos AB de 4 pasos:

$$x_{n+4} = x_{n+3} + \frac{h}{24}(-9f_n + 37f_{n+1} - 59f_{n+2} + 55f_{n+3})$$

donde $R_{n+4} = \frac{251}{720}x^{(v)}(\mu_n)h^5$

con AM de 3 pasos:

$$x_{n+3} = x_{n+2} + \frac{h}{24}(f_n - 5f_{n+1} + 19f_{n+2} + 9f_{n+3})$$

donde $R_{n+3} = -\frac{19}{720}x^{(v)}(\mu_n)h^5$, observamos:

- Ambos realizan el mismo número de evaluaciones de la función.
- Ambos tienen el error de truncatura del mismo orden y la derivada del mismo orden de x.
- Los coeficientes β_j y la constante en el error de truncatura local son más pequeños en el método implícito que en el explícito. Eso hace a los implícitos más estables.
- El inconveniente del método implícito es que requiere resolver una ecuación en cada paso.

Métodos de Milne-Simpson generalizados

Son implícitos con $q = 2$, $m = 0$, $r = 0$

$$x_{n+k} = x_{n+k-2} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_k f_{n+k}).$$

Métodos Nyström

Son explícitos con $q = 2$, $m = 0$, $r \geq 1$

$$x_{n+k} = x_{n+k-2} + h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-r} f_{n+k-r}).$$

Métodos tipo Newton-Cotes

Son métodos con $q = k$. Distinguiremos dos clases:

- Si $m = r = 1$ son métodos explícitos o abiertos:

$$x_{n+k} = x_n + h(\beta_1 f_{n+1} + \cdots + \beta_{k-1} f_{n+k-1})$$

- Si $m = r = 0$ son métodos implícitos o cerrados:

$$x_{n+k} = x_n + h(\beta_0 f_n + \cdots + \beta_k f_{n+k})$$

Ejemplos

- Método del trapecio: $x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})$. Cerrado, implícito, de $k = 1$ paso. Si se sustituyera f_{n+1} por una aproximación $f(t_{n+1}, x_n + h f_n)$ sería el método de Heun, explícito.
- Método de Simpson: $x_{n+2} = x_n + \frac{h}{3}(f_n + 4f_{n+1} + f_{n+2})$.
- Fórmula abierta de 4 pasos: $x_{n+3} = x_{n-1} + \frac{4h}{2}(2f_n - f_{n+1} + 2f_{n+2})$.

Métodos predictor-corrector

Por lo general, los MML implícitos son sustancialmente más exactos que los explícitos de los mismos pasos y orden, por lo que vale la pena usarlos a pesar de las dificultades que conllevan por tener que resolver una ecuación en cada paso.

Para resolver la ecuación de un MML implícito

$$x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j} + h\beta_k f(t_{n+k}, x_{n+k}),$$

lo ideal sería usar un método de iteración funcional (véase el Tema 1) a partir de su misma formulación:

$$x_{n+k}^{(v)} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j} + h\beta_k f(t_{n+k}, x_{n+k}^{(v-1)})$$

partiendo de una semilla adecuada $x_{n+k}^{(0)}$.

¿Será convergente la sucesión de iteraciones $\{x_{n+k}^{(v)}\}_{v\geq 0}$?

Métodos predictor-corrector

Restando las dos ecuaciones anteriores:

$$x_{n+k} - x_{n+k}^{(v)} = h\beta_k \left(f(t_{n+k}, x_{n+k}) - f(t_{n+k}, x_{n+k}^{(v-1)}) \right).$$

Si L es la constante de Lipschitz de f respecto de su segunda variable, entonces:

$$|x_{n+k} - x_{n+k}^{(v)}| \leq h|\beta_k|L|x_{n+k} - x_{n+k}^{(v-1)}|$$

y, por inducción,

$$|x_{n+k} - x_{n+k}^{(v)}| \leq (h|\beta_k|L)^v|x_{n+k} - x_{n+k}^{(0)}|$$

con lo que podríamos asegurar la convergencia del método iterativo sin más que tomar

$$h < \frac{1}{|\beta_k|L}$$

es decir, con el tamaño de paso suficientemente pequeño.

Métodos predictor-corrector

Sin embargo, la velocidad de convergencia del método iterativo no pasa de ser simplemente lineal.

Tomar un tamaño de paso h muy pequeño para que la constante asintótica del error sea pequeña y así aumentar la velocidad no suele compensar el esfuerzo computacional necesario.

En la práctica es mucho más habitual emplear algún método explícito para elegir una semilla $x_{n+k}^{(0)}$ con la máxima precisión (predicción), para así realizar un bajo número de iteraciones (corrección).

Bajo estas premisas surgen los métodos predictor-corrector.

Métodos predictor-corrector

Forma general de un MML predictor-corrector de k pasos

$$
\begin{aligned}
\text{Pred.} \quad P: \quad x_{n+k}^{(0)} &= \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j^* x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* f_{n+j} \\
\text{Corr.} \quad C^m: \quad x_{n+k}^{(v)} &= \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f_{n+j} + h\beta_k f(t_{n+k}, x_{n+k}^{(v-1)}) \\
& v = 1, \ldots, m
\end{aligned}
$$

donde m indica el número (habitualmente fijo) de correcciones.

Métodos predictor-corrector

Ejemplo: Método de Adams-Bashforth-Moulton de orden 5

Se obtiene combinando:

- Un MML predictor AB de 5 pasos con
- un corrector AM de 4 pasos, aplicando una sola corrección.

La forma general será:

$$\begin{aligned} P: \quad x_{n+5}^{(0)} &= x_{n+4} + \frac{h}{720}(1901 f_{n+4} - 2774 f_{n+3} + 2616 f_{n+2} \\ &\qquad - 1274 f_{n+1} + 251 f_n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C^1: \quad x_{n+5} &= x_{n+4} + \frac{h}{720}(251 f(t_{n+5}, x_{n+5}^{(0)}) + 646 f_{n+4} - 264 f_{n+3} \\ &\qquad + 106 f_{n+2} + 19 f_{n+1}) \end{aligned}$$

Orden de un método predictor-corrector

Terminamos dando un resultado que relaciona el orden de un MML predictor-corrector con los órdenes de los métodos que lo componen.

Proposición

Sea un método PC^m. Sea p^* el orden del predictor P, p el del corrector C y m el número de correcciones. Entonces:

1. Si $p^* + m > p$, entonces el método PC^m tiene orden p y su constante principal de error de truncatura local es la misma de C.
2. Si $p^* + m = p$, entonces el método PC^m tiene orden p pero su constante principal de error de truncatura local es distinta de la de C.
3. Si $p^* + m < p$, entonces el método PC^m tiene orden $p^* + m$.

En suma, el orden de PC^m es $\min\{p^* + m, p\}$.
Por tanto, para economizar esfuerzos, lo mejor es equilibrar para que sea $p^* + m = p$ y por tanto el mínimo se alcance en los dos términos. Como $m = 1$ es la costumbre más extendida, entonces $p^* + 1 = p$.

Sistemas de ED

La mayor parte de la teoría expuesta es extensible a sistemas de ecuaciones diferenciales. Sustituimos el PVI (1) por

$$\boxed{\begin{array}{l} X' = F(t, X) \\ X(t_0) = \boldsymbol{\mu} \end{array}}$$

donde:

$$X = X(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ \vdots \\ x_m(t) \end{pmatrix}, \ F(t, X) = \begin{pmatrix} f_1(t, x_1, \ldots, x_m) \\ \vdots \\ f_m(t, x_1, \ldots, x_m) \end{pmatrix} \text{ y } \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_m \end{pmatrix}.$$

Sistemas de ED

Este problema puede resolverse mediante los métodos de discretización que se han estudiado en el tema y los conceptos y resultados relativos pasan a utilizar criterios de normas en lugar de valores absolutos.

Cada método se escribiría en forma vectorial en lugar de en forma escalar.

Por ejemplo, el método de Euler aplicado al problema anterior se escribe como

$$
\begin{aligned}
&X_0 = \boldsymbol{\mu},\ t_0 = a \\
&t_{n+1} = t_n + h,\ h = \tfrac{b-a}{N} \\
&X_{n+1} = X_n + hF(t_n, X_n) \quad n = 0, \ldots, N-1
\end{aligned}
$$

Sistemas de ED

Ejercicio

Se considera el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1' = -4x_1 + 3x_2 + 6 \\ x_2' = -2.4x_1 + 1.6x_2 + 3.6 \end{array} \right.$$

con condición inicial $x_1(0) = 0$, $x_2(0) = 0$. Aproxima la solución utilizando RK clásico. Utiliza $h = 0.1$ y muestra los valores de los 5 primeros pasos.

Ecuaciones de orden superior

Una ecuación diferencial de orden superior puede transformarse en un sistema de ecuaciones de primer orden.

Como ilustración consideramos el PVI de segundo orden

$$\boxed{\begin{array}{l} x'' = f(t, x, x') \\ x(t_0) = \mu_1,\ x'(t_0) = \mu_2 \end{array}}$$

Haciendo el cambio $x_1 = x(t),\ x_2 = x'(t)$, tendremos que el problema anterior equivale a

$$\boxed{\begin{array}{l} X' = \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \end{pmatrix} = F(t, X) = \begin{pmatrix} x_2 \\ f(t, x_1, x_2) \end{pmatrix} \\ X(t_0) = \begin{pmatrix} x_1(t_0) \\ x_2(t_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix} \end{array}}$$

y de este modo la solución numérica de nuestro problema estaría formada por las primeras componentes de la solución numérica del problema equivalente.

Ecuaciones de orden superior

Ejercicio

Dado el siguiente problema de valores iniciales:

$$\begin{cases} x'' + 4x' + 5x = 0 \\ x(0) = 3, x'(0) = -5 \end{cases}$$

1. Transforma el problema en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden equivalente.
2. Utiliza RK4 para aproximar la solución en el intervalo $[0,5]$ con $N = 50$ subintervalos. Indica los valores de $x(1)$, $x(2)$, $x(3)$, $x(4)$ y $x(5)$.
3. Compara la solución numérica con la solución exacta $x(t) = 3e^{-2t}\cos(t) + e^{-2t}\,\mathrm{sen}(t)$. Representa gráficamente ambas soluciones.