Tema 3: Métodos numéricos para resolver Problemas de Valores Iniciales

Métodos Numéricos II

Departamento de Matemática Aplicada

Universidad de Granada

Curso 2024/25

Contenidos

Contenidos

Introducción

Problema de valores iniciales (PVI) o problema de Cauchy

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

siendo $x = x(t)$ una función desconocida de t.

Se dice que $x(t)$ es una solución de (1) en un intervalo $I \ni t_0$ si es derivable en I y verifica (1) $\forall t \in I$.

- Sólo una minoría de ecuaciones diferenciales ordinarias puede resolverse mediante los métodos que aparecen en las obras dedicadas a su estudio.
- Y aún dentro de las resolubles no siempre se podrá calcular explícitamente la solución que pasa por un punto dado, o se podrá evaluar con facilidad esa solución en cualquier punto.

Introducción

Teorema 1 (existencia y unicidad)

Si $f : D \subseteq \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ es continua en $D = [a,b] \times \mathbb{R} = \{(t,x) : t \in [a,b],\ x \in \mathbb{R}\}$ y satisface la condición de Lipschitz respecto de su segunda variable

$$|f(t,u) - f(t,v)| \leq L|u - v| \quad \forall t \in [a,b] \tag{2}$$

entonces el problema (1) admite una única solución $x(t)$ en $[a,b]$. A L se la denomina constante de Lipschitz respecto de x.

La condición de Lipschitz (2) puede sustituirse por que la derivada $\frac{\partial f}{\partial x}$ exista y sea continua y acotada en D.

Introducción

Diremos que $f \in \mathcal{F}_p(D)$ si f posee derivadas parciales continuas y acotadas en D hasta orden al menos p.

En nuestro PVI (1) supondremos siempre que $f \in \mathcal{F}_p(D)$ con $p \geq 1$ de modo que la existencia y unicidad de solución de en el intervalo $[a, b]$ esté asegurada.

Este teorema se puede extender fácilmente a sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden sin más que cambiar en la condición de Lipschitz (2) los valores absolutos por normas vectoriales y matriciales apropiadas.

Introducción

Para dominios más reducidos se tiene el siguiente teorema

Teorema 2 (existencia y unicidad)

Si $f : D \subseteq \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ es una función continua en el rectángulo $R = \{(t,x) : |t - t_0| \leq r_t,\ |x - \mu| \leq r_x\}$ y satisface la condición de Lipschitz (2), entonces el problema (1) admite una única solución $x(t)$ en $[t_0 - h, t_0 + h]$ donde $h = \text{mín}\left\{r_t, \frac{r_x}{M}\right\}$ y $|f(t,x)| \leq M$ en R.

Contenidos

Métodos de discretización

En muy pocos casos se puede encontrar la solución exacta $x(t)$ de un PVI y, por tanto, es imprescindible establecer métodos aproximados de cálculo, entre los que se encuentran los basados en desarrollos en serie de potencias, en serie de Frobenius, etc, además de una categoría diferente formada por métodos numéricos.

Resolver numéricamente el PVI (1) no significa obtener la expresión analítica de $x(t)$, sino más bien su valor en una serie de puntos del intervalo de trabajo $[a, b]$. Para resolver numéricamente el PVI hay que transformar los elementos continuos, no computables, en elementos discretos, computables. Para ello se emplean diversos métodos de discretización.

Métodos de discretización

Un método numérico de discretización para resolver un PVI consiste básicamente en

- Tomar una partición $\{a = t_0 < t_1 < \cdots < t_N = b\}$ con puntos o nodos del intervalo $[a, b]$ donde se requiere evaluar la solución única $x(t)$. Habitualmente es una partición homogénea, es decir

$$h = \frac{b-a}{N}, \begin{cases} t_{n+1} = t_n + h, \ n = 0, 1, \ldots, N-1 \text{ o bien} \\ t_n = a + nh, \ n = 0, 1, \ldots, N. \end{cases} \tag{3}$$

  A h se le llama paso o longitud de paso.

- Obtener una serie de valores $\{x_n\}_{n=0}^{N}$ asociados a los nodos, que se denomina solución numérica del PVI.

El objetivo es que la solución numérica sea una aproximación de la solución exacta: $x_n \approx x(t_n)$, tanto mejor cuanto más densa sea la partición, es decir cuando $N \to \infty$ o equivalentemente $h \to 0$.

Métodos de discretización

Son varias las técnicas (integración y derivación numéricas, desarrollos de Taylor, interpolación, etc) usadas para el cálculo de tales valores.

En general, un método numérico de k pasos para el PVI (1) adopta la forma

$$\left\{ \begin{array}{l} x_0, x_1, \ldots, x_{k-1} = \text{ valores iniciales} \\ x_{n+k} = \displaystyle\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h\, \Phi(x_{n+k}, x_{n+k-1}, \ldots, x_n; t_n, h) \end{array} \right. \tag{4}$$

donde la función Φ habrá de cumplir $\forall h < h_0$

$$\begin{array}{l} f \equiv 0 \Rightarrow \Phi \equiv 0; \\ |\Phi(u_0, \ldots, u_k; t, h) - \Phi(v_0, \ldots, v_k; t, h)| \leq M \displaystyle\sum_{j=0}^{k} |u_j - v_j| \end{array} \tag{5}$$

es decir, Φ cumple una condición de Lipschitz respecto de las variables representativas de los valores numéricos de la solución $x(t)$.

Métodos de discretización

Los métodos se suelen clasificar de varias formas.

Clasificación de métodos

Por un lado, cuando $k = 1$ se hablará de un método de un paso y, en caso contrario, de un método multipaso.

Por otro lado, en el caso de que en

$$x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h\Phi(x_{n+k}, x_{n+k-1}, \ldots, x_n; t_n, h)$$

la función Φ no dependa de su primera variable x_{n+k}, el método se clasifica como método explícito. En caso contrario, se llamará método implícito y requerirá resolver una ecuación en cada paso.

Consistencia, convergencia, estabilidad

Se definen los conceptos básicos que permiten establecer las características de comportamiento deseables para un método numérico para PVI. En lo que sigue se considera que $x(t)$ se refiere a la solución exacta de (1).

Definición (Error global y local)

- Se llama error de truncatura global o simplemente error global a

$$e_n = x(t_n) - x_n.$$

- Se llama error de truncatura local o simplemente error local a

$$R_{n+k} = x(t_{n+k}) - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x(t_{n+j}) - h\Phi(x(t_{n+k}), x(t_{n+k-1}), \ldots, x(t_n); t_n, h).$$

Recordemos que $x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x_{n+j} + h\Phi(x_{n+k}, x_{n+k-1}, \ldots, x_n; t_n, h)$

Consistencia, convergencia, estabilidad

Para un método de un paso

$$\begin{cases} x_0 = \text{ valor inicial} \\ x_{n+1} = \alpha_0\, x_n + h\,\Phi(x_{n+1}, x_n; t_n, h) \end{cases}$$

se verá que necesariamente tiene que ser $\alpha_0 = 1$ para que cumpla propiedades adecuadas, es decir, el método será de la forma:

$$\begin{cases} x_0 = \text{ valor inicial} \\ x_{n+1} = x_n + h\Phi(x_{n+1}, x_n; t_n, h) \end{cases}$$

el error local toma la forma

$$R_{n+1} = x(t_{n+1}) - x(t_n) - h\Phi(x(t_{n+1}), x(t_n); t_n, h)$$

y si además fuera explícito,

$$R_{n+1} = x(t_{n+1}) - x(t_n) - h\Phi(x(t_n); t_n, h).$$

Consistencia, convergencia, estabilidad

El error global mide simplemente las diferencias entre la solución aproximada y la exacta, y lo deseable es que sea lo más pequeño posible y tienda a cero cuando $N \to \infty$.

El error local mide la desviación que introduce el método en cada paso, es decir, el error que produce si partiera de los valores de la solución exacta. El error local podría provocar un efecto acumulador perjudicial. Aunque es de esperar que $R_{n+k} \to 0$ cuando $h \to 0$, no basta para controlar el efecto de acumulación del error local. Para ello se define la propiedad de consistencia.

Definición: Consistencia

Un método (4) se dirá consistente con el PVI (1) si

$$\lim_{\substack{h \to 0 \\ t=a+nh}} \frac{R_{n+k}}{h} = 0. \tag{6}$$

Consistencia, convergencia, estabilidad

Definición: Primer polinomio característico

Dado el método:

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

su primer polinomio característico es

$$p(\lambda) = \lambda^k - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j \lambda^j. \tag{7}$$

Consistencia, convergencia, estabilidad

Teorema (Caracterización de la consistencia)

El método

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

es consistente con el PVI (1) si y solo si

$$\begin{cases} p(1) = 0, \\ \Phi(x(t_n), \ldots, x(t_n); t_n, 0) = p'(1) f(t_n, x(t_n)). \end{cases}$$

Idea de la demostración:

Si en la expresión de R_{n+k}dividimos por h, tenemos

$$\frac{x(t_{n+k}) - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x(t_{n+j})}{h} - \Phi(x(t_{n+k}), x(t_{n+k-1}), \ldots, x(t_n); t_n, h)$$

si ahora tomamos límite cuando h tiende a 0 y tenemos en cuenta que ese límite debe ser cero:

$$\lim_{h \to 0} \frac{x(t_{n+k}) - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x(t_{n+j})}{h} = \Phi(x(t_n), x(t_n), \ldots, x(t_n); t_n, 0)$$

Desarrollando $x(t_n + jh) \approx x(t_n) + x'(t_n)jh = x(t_n) + f(t_n, x(t_n))jh$ obtenemos la relación que queríamos.

Consistencia, convergencia, estabilidad

Definición (Convergencia)

El método (4) se dice convergente para (1) si y solo si

$$\lim_{N\to\infty} \max_{0\le n\le N} |x_n - x(t_n)| = 0$$

o bien (definición alternativa equivalente)

$$\lim_{\substack{h\to 0\\ t=a+nh}} x_n = x(t).$$

Un método no convergente se dice divergente.

La propiedad de convergencia es la que se debe exigir a todo método que pretenda ofrecer utilidad práctica.

La convergencia de un método implica su consistencia, pero el recíproco no es cierto.

Consistencia, convergencia, estabilidad

Un método puede ser consistente, pero muy sensible a perturbaciones de Φ, errores de redondeo en la computación o los errores inherentes a la discretización. Se requiere otra definición más para precisar el concepto.

Supongamos que el método (4) sufre una perturbación δ_{n+k} en la evaluación de Φ de manera que en lugar de x_{n+k} se obtiene una solución perturbada z_{n+k} en la forma

$$\begin{aligned} &z_n = x_n + \delta_n, \quad n = 0, 1, \ldots, k-1 \\ &z_{n+k} = \textstyle\sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j z_{n+j} + h\left(\Phi(z_{n+k}, z_{n+k-1}, \ldots, z_n; t_n, h) + \delta_{n+k}\right),\ n \geq 0. \end{aligned}$$

Definición (Estabilidad o 0-estabilidad)

Sean $\{\delta_n\}$ y $\{\delta_n^*\}$ dos perturbaciones del método (4) y $\{z_n\}$ y $\{z_n^*\}$ sus respectivas soluciones perturbadas. Diremos que el método es estable o cero-estable si existen constantes M y h_0 tales que $\forall h \leq h_0$ se cumple

$$|z_n - z_n^*| \leq M\varepsilon,\ \forall n \quad \text{siempre que} \quad |\delta_n - \delta_n^*| \leq \varepsilon \quad \forall n$$

Consistencia, convergencia, estabilidad

Teorema (Caracterización de la estabilidad)

El método (4) es estable si y solo si el primer polinomio característico tiene todos sus ceros en el disco unidad y los ceros de módulo 1 son simples.

Teorema (Caracterización de la convergencia)

Un método (4) es convergente si y sólo si es consistente y cero-estable.

La demostración de estos dos teoremas la podéis ver en Analysis of Numerical Methods, E. Isaacson and H. B. Keller.

Por último, dos o más métodos para un mismo problema pueden compararse respecto de su precisión usando el concepto de *orden*.

Definición (Orden)

Diremos que (4) es de orden $p \geq 1$ si $\forall f \in \mathcal{F}_p(D)$ se cumple

$$R_{n+k} = O(h^{p+1}).$$

Contenidos

Métodos de un paso: Generalidades

Particularizamos lo anterior para el caso $k = 1$.
Un método de un paso para el PVI viene expresado, según el caso, como

Método de un paso explícito
$x_0 = \mu,\ t_0 = a$ para $n = 0, 1, \ldots, N-1$ $\quad t_{n+1} = t_n + h$ $\quad x_{n+1} = x_n + h\Phi(x_n; t_n, h)$

(8)

Método de un paso implícito
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$ para $n = 0, 1, \ldots, N-1$ $\quad t_{n+1} = t_n + h$ $\quad$ resolver $x_{n+1} = x_n + h\Phi(x_{n+1}, x_n; t_n, h)$

(9)

Métodos de un paso: Generalidades

La condición de Lipschitz (5) para Φ asegura no solamente la existencia y unicidad de solución exacta, sino también la de solución numérica en el caso implícito (9).

En efecto, x_{n+1} es la solución de una ecuación (en general no lineal) del tipo $z = g(z)$ donde $g(z) = x_n + h\Phi(z, x_n; t_n, h)$ y se cumple

$$|g(u) - g(v)| \leq hM|u - v|$$

siendo M la constante de Lipschitz de Φ en (5).

Entonces siempre habrá un h_0 tal que $h_0M < 1$ y para cualquier $h \leq h_0$, $g(z)$ será contráctil, por lo que la ecuación $z = g(z)$ tendrá solución y el método de iteración funcional asociado (ver Tema 1) convergerá hacia ella.

Métodos de un paso: Generalidades

Los conceptos asociados a los métodos de un paso toman la forma que se comenta seguidamente. Por simplicidad en las notaciones se presenta el caso explícito.

- **Error de truncatura global**. Es el mismo. $(e_n = x(t_n) - x_n)$
- **Error de truncatura local**.

$$R_{n+1} = x(t_{n+1}) - x(t_n) - h\Phi(x(t_n); t_n, h).$$

- **Consistencia**. Es igual. $\left(\lim_{\substack{h\to 0\\ t=a+nh}} \dfrac{R_{n+1}}{h} = 0 \right)$
- **Primer polinomio característico**.

$$p(\lambda) = \lambda - 1.$$

- **Caracterización de la consistencia**.

$$\begin{cases} p(1) = 0 \text{ ya la cumple (hemos tomado } \alpha_0 = 1), \\ \Phi(x(t_n); t_n, 0) = f(t_n, x(t_n)). \end{cases}$$

Métodos de un paso: Generalidades

- **Convergencia**. La definición es igual.
- **Estabilidad**. La definición es igual.
- **Caracterización de la estabilidad**. El método es estable porque la única raíz de $p(\lambda)$ es $\lambda = 1$ simple.
- **Caracterización de la convergencia**. Al ser estable, la convergencia equivale a la consistencia.
- **Orden**. (8) es de orden $p \geq 1$ si $\forall f \in \mathcal{F}_p(D)$ se cumple

$$R_{n+1} = x(t_{n+1}) - x(t_n) - h\Phi(x(t_n); t_n, h) = O(h^{p+1}).$$

Notaciones

Dado que el análisis del orden requiere usar desarrollos de Taylor tanto de la solución $x(t)$ como de la función $f(t,x)$, será de gran ayuda la notación abreviada que facilita el operador $D^m_{\phi,\psi}$ que actúa sobre cualquier función de dos variables $g = g(t,x)$ suficientemente derivable.

$$D^m_{\phi,\psi} g = \left(\phi \frac{\partial \bullet}{\partial t} + \psi \frac{\partial \bullet}{\partial x}\right)^m g = \sum_{j=0}^{m} \binom{m}{j} \phi^{m-j} \psi^j \frac{\partial^m g}{\partial t^{m-j} \partial x^j} \qquad (10)$$

En particular para la función f de (1) usaremos

$$F = D_{1,f} f,\ G = D^2_{1,f} f \ \text{ y } \ H = D^3_{1,f} f.$$

Así, el desarrollo de Taylor de una función cualquiera g de dos variables alrededor del punto (t,x) viene expresado por (donde $g = g(t,x)$

$$\begin{aligned} g(t+h, x+\kappa) &= g + D_{h,\kappa} g + \frac{1}{2!} D^2_{h,\kappa} g + \cdots + \frac{1}{p!} D^p_{h,\kappa} g + (\text{Resto}) \\ &= T_p(g; h, \kappa) + (\text{Resto}) \end{aligned}$$

Notaciones

De igual modo, las derivadas sucesivas de la solución $x(t)$ de (1) pueden ponerse como

$$
\begin{array}{rcccl}
x' & = & f & & \\
x'' & = & f' & = & f_t + f_x x' = f_t + f_x f = F \\
x''' & = & f'' & = & F' = F_t + F_x f = G + f_x F \\
x^{iv} & = & f''' & = & (f'')_t + (f'')_x f = H + 3F(f_{xx} f + f_{tx}) + f_x(G + f_x F) \\
 & \vdots & & &
\end{array}
\tag{11}
$$

Ejercicio: desarrollar y comprobar.

Contenidos