Tema 3: Métodos numéricos para resolver Problemas de Valores Iniciales

Métodos Numéricos II

Departamento de Matemática Aplicada

Universidad de Granada

Curso 2021/22

Contenidos

3.2 El método de Euler. Variantes

Se trata de un método elemental de un paso, explícito, para

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

en el que la elección $\Phi(x; t, h) = f(t, x)$ es la más simple posible.
Se formula así:

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

El método de Euler

La deducción de éste y otros métodos se puede hacer por diversas vías, entre las que se pueden destacar las siguientes:

1. **Deducción por integración numérica.** Se trata de usar la representación integral de la solución exacta en cada subintervalo $[t_n, t_{n+1}]$, a saber

$$x(t_{n+1}) - x(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} x'(s)\, ds = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, x(s))\, ds$$

   y usando la fórmula de integración numérica del rectángulo izquierda (ver Tema 2) se tiene

$$\cdots \approx hf(t_n, x(t_n)) \;\Rightarrow\; \boxed{x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n)}$$

El método de Euler

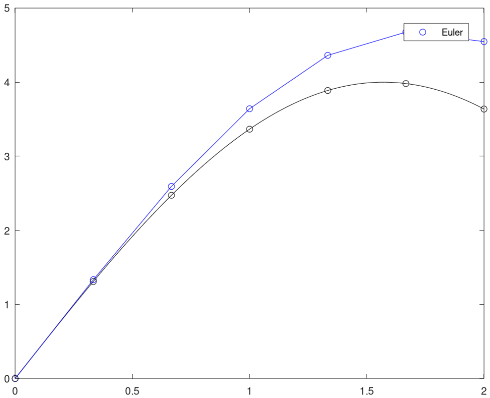
2. **Deducción por derivación numérica.**
Usando la fórmula de derivación numérica de diferencia progresiva para $x'(t_n)$ (ver Tema 2)

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

$$\Rightarrow \quad \boxed{x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n)}$$

El método de Euler

3. **Deducción geométrica.** La aproximación x_{n+1} se obtiene como el valor en $t = t_{n+1}$ de la recta que pasa por (t_n, x_n) y tiene pendiente $f(t_n, x_n)$. Dicha recta es una aproximación a la recta tangente a la curva solución $(t, x(t))$ en el punto $(t_n, x(t_n))$.



Método de Euler para el PVI $x' = 4\cos t,\ x(0) = 0.$

El método de Euler

Ejemplos

Vamos a ir probando los métodos en dos ejemplos sencillos:

1. $$\left\{ \begin{array}{l} x' = 4\,\cos(t) \\ x(0) = 0 \end{array} \right.$$

   Intervalo $[0, \pi]$ y $N = 6$

2. $$\left\{ \begin{array}{l} x' = x \\ x(0) = 1 \end{array} \right.$$

   Intervalo $[0, 1]$ y $N = 10$

Método de Euler implícito

Si en lugar de la fórmula de integración del rectángulo izquierda se usa la del rectángulo derecha, o en lugar de la fórmula de derivación de diferencia progresiva se usa la regresiva, o en lugar de la tangente en (t_n, x_n) se usa la tangente en (t_{n+1}, x_{n+1}), entonces se obtiene el

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

Es sencillo comprobar (hágase) que ambos métodos (3) y (8) son consistentes con el problema (1), estables, y sus errores locales de truncatura son

$$R_{n+1} = \frac{h^2}{2}x''(t) + O(h^3) \ \text{ y } \ R_{n+1} = -\frac{h^2}{2}x''(t) + O(h^3)$$

respectivamente, por lo que ambos métodos tienen orden $p = 1$.

Método de Euler mejorado o del punto medio

Esta variante del método de Euler se consigue aplicando la fórmula de integración del punto medio, o trazando la tangente en el punto $(t_n + \frac{h}{2})$.
El problema es cómo obtener el valor de $x\left(t_n + \frac{h}{2}\right)$.
Runge[1] pensó que se podría aproximar ese valor por el obtenido al aplicar la fórmula de Euler con un paso mitad, de manera que
$x\left(t_n + \frac{h}{2}\right) \approx x_n + \frac{h}{2} f(t_n, x_n)$.
De esta forma queda el

Método de Euler mejorado (punto medio)
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$
para $n = 0, 1, \ldots, N-1$
$\quad t_{n+1} = t_n + h$
$\quad x_{n+1} = x_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2} f(t_n, x_n)\right)$

Este método tiene un error de truncatura local
$R_{n+1} = \dfrac{h^3}{6}\left(\dfrac{1}{4}G + f_x F\right) + O(h^4)$, por lo que tiene orden $p = 2$.

[1] Carl Runge (1856-1927), matemático, físico y espectroscopista alemán.

Método de Euler modificado o de Heun

Se consigue aplicando la fórmula de integración del trapecio, o la de derivación de diferencia centrada, o la recta secante que pasa por (t_n, x_n) y (t_{n+1}, x_{n+1}).
Análogamente al anterior, se presenta aquí el problema de evaluar $x(t_{n+1})$, que se resuelve aproximándolo por Euler.

Método de Euler modificado (Heun)
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$ para $n = 0, 1, \dots, N-1$ $\quad t_{n+1} = t_n + h$ $\quad x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}\left(f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_n + hf(t_n, x_n))\right)$

Su error de truncatura local es $R_{n+1} = \dfrac{h^3}{6}\left(-\dfrac{1}{2}G + f_x F\right) + O(h^4)$, por lo que también tiene orden $p = 2$.

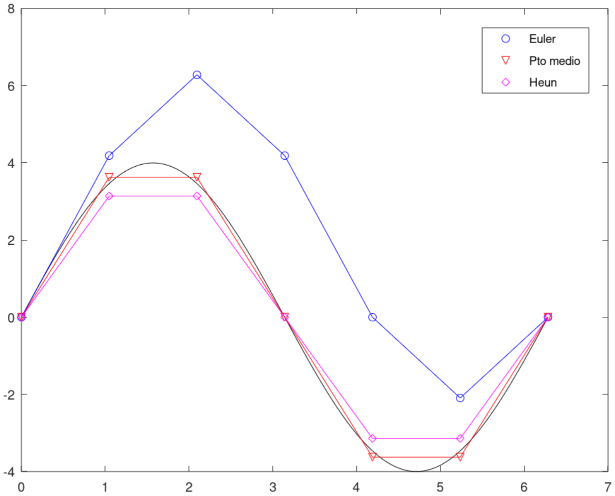


Figura: Comparación de los métodos de Euler, punto medio y Heun para el PVI $x' = 4\cos t,\ x(0) = 0.$

Comparación de los métodos

La figura anterior muestra una comparación de los métodos de Euler, Punto medio y Heun con $N = 6$ para el PVI

$$\begin{cases} x' = 4\cos(t) \\ x(0) = 0 \end{cases}$$

en $[0, \pi]$, de solución trivial $x(t) = 4\sin t$.

Se puede apreciar que el método de Euler sufre un grave efecto de acumulación del error de truncatura local, que lo hace desviarse de la curva exacta, aunque a partir de $\frac{\pi}{2}$ los errores locales son de signo contrario y van contrarrestando a los primeros, de forma que en el extremo del intervalo el error global llega a anularse.

Los métodos de Punto medio y de Heun, ambos de orden 2, parecen comportarse mejor, aunque hay que tener en cuenta que exigen mayor esfuerzo computacional porque emplean dos evaluaciones de f en casa paso.

Métodos de Taylor

Si la función f del PVI (1) es suficientemente diferenciable, entonces es sencillo obtener un método de orden $p \geq 1$ sin más que usar el desarrollo de Taylor para $x(t)$

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + \frac{h^2}{2}x''(t) + \cdots + \frac{h^p}{p!}x^{(p)}(t) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}x^{(p+1)}(\xi_t)$$

para deducir el

Método de Taylor
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$ para $n = 0, 1, \ldots, N-1$ $\quad t_{n+1} = t_n + h$ $\quad x_{n+1} = x_n + hx'_n + \frac{h^2}{2}x''_n + \cdots + \frac{h^p}{p!}x_n^{(p)}$

donde los valores $x_n^{(r)}$ se obtienen evaluando en (t_n, x_n) las sucesivas derivadas de $f(t, x(t))$ que se vieron en una sección anterior.

Métodos de Taylor

Método de Taylor de orden $p = 1$

Se trata del método de Euler explícito.

Método de Taylor de orden $p = 2$

Método de Taylor de orden $p = 2$
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$
para $n = 0, 1, \ldots, N-1$
$\quad t_{n+1} = t_n + h$
$\quad x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n) + \frac{h^2}{2} F(t_n, x_n)$

donde

$$F(t,x) = \frac{\partial f}{\partial t}(t,x) + f(t,x)\frac{\partial f}{\partial x}(t,x)$$

Métodos de Taylor

Ejercicio

Usa el método de Taylor de orden 4 para aproximar el valor de la solución del PVI:

$$\left.\begin{aligned} x' &= \frac{t-x}{2} \\ x(0) &= 1 \end{aligned}\right\}$$

en $[0,3]$ con $h = \frac{1}{4}$.

Compara los resultados obtenidos en los casos $h = 1$, $h = \frac{1}{2}$ y $h = \frac{1}{8}$ para las aproximaciones de $x(1)$, $x(2)$ y $x(3)$.

Nota: La solución exacta es $x(t) = 3e^{-t/2} + t - 2$

Métodos de Taylor

En el ejercicio anterior:

t_k	$h=1$	$h=\frac{1}{2}$	$h=\frac{1}{4}$	$h=\frac{1}{8}$	Valor exacto
0	1	1	1	1	1
1	0.82031	0.81963	0.81959	0.81959	0.81959
2	1.104512	1.103683	1.103684	1.103639	1.103638
3	1.670186	1.669431	1.669393	1.669391	1.669391

Métodos de Runge-Kutta

A la vista de la complejidad que involucra el desarrollo de las derivadas sucesivas de $x(t)$ para un orden elevado $p \geq 3$, los métodos de Taylor no son muy populares.

Por ello se intenta conseguir métodos de orden elevado que eviten la evaluación de derivadas.

Es el objetivo de los métodos de Runge-Kutta[2] (en adelante RK), que se basan en varias evaluaciones de $f(t, x)$ en puntos del intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ de modo que resulten equivalentes en cierta medida a métodos de Taylor de orden alto.

[2] Martin Wilhelm Kutta (1867-1944), físico y matemático alemán. En 1901 desarrolló el método RK junto con Runge.

Métodos de Runge-Kutta

De forma más precisa, un método de RK de m evaluaciones es como sigue.

Método de RK de m evaluaciones
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$ para $n = 0, 1, \dots, N-1$ $\quad t_{n+1} = t_n + h$ $\quad x_{n+1} = x_n + h \sum_{j=1}^{m} b_j K_j(t_n, x_n)$ donde $K_i(t,x) = f\left(t + c_i h, x + h \sum_{j=1}^{m} a_{ij} K_j(t,x)\right) \ \ i = 1, \dots, m$

Métodos de Runge-Kutta

Arreglo de Butcher

Cualquier método de RK queda determinado por el arreglo de Butcher

$$\begin{array}{|c|ccc|}
\hline
c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1m} \\
c_2 & a_{21} & \cdots & a_{2m} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_m & a_{m1} & \cdots & a_{mm} \\
\hline
 & b_1 & \cdots & b_m \\
\hline
\end{array} \tag{2}$$

Métodos de Runge-Kutta: observaciones

- El método de RK es, en general implícito.
- Si $a_{ij} = 0 \ \forall i \leq j$, (matriz triangular inferior con los elementos de la diagonal 0) entonces el método será explícito.
- Si $a_{ij} = 0 \ \forall i < j$, (matriz triangular inferior) entonces el método se dirá diagonalmente implícito.
- El método de RK es consistente si y solo si $b_1 + \cdots + b_m = 1$.
- Para simplificar el análisis supondremos $c_i = a_{i1} + a_{i2} + \cdots + a_{im} \ \forall i$.
- Un método de RK explícito tendrá, por tanto,

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t, x) \\ K_i &= f\left(t + c_i h, x + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j\right) \quad i = 2, \ldots, m \end{aligned}$$

A continuación veremos algunos métodos de Runge-Kutta clásicos.

Método de RK explícito de 2 evaluaciones

Teniendo en cuenta las condiciones de consistencia, podemos escribir

Método de RK de 2 evaluaciones explícito
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$
para $n = 0, 1, \ldots, N-1$
$\quad t_{n+1} = t_n + h$
$\quad x_{n+1} = x_n + h\left((1-\alpha)K_1 + \alpha K_2\right)$
donde
$\quad K_1 = f(t_n, x_n)$
$\quad K_2 = f(t_n + \beta h, x_n + h\beta K_1)$

donde α y β han de ser elegidos adecuadamente, tras un análisis del error de truncatura local para deducir el orden máximo del método. Así

$$R_{n+1}(t) = x(t+h) - x(t) - h\left((1-\alpha)K_1 + \alpha K_2\right)$$

donde $K_1 = f(t, x(t)),\ K_2 = f(t + \beta h, x + h\beta f(t, x(t)))$.

Método de RK explícito de 2 evaluaciones

Recordemos que el desarrollo de Taylor de una función cualquiera g de dos variables alrededor del punto (t, x) viene expresado por

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

donde $D^m_{h,\kappa} g = \left(h\frac{\partial}{\partial t} + \kappa \frac{\partial}{\partial x}\right)^m g$.

Desarrollando por Taylor K_2 alrededor del punto $(t, x(t))$, tenemos

$$\begin{aligned} K_2 &= f(t+\beta h, x+\beta h f) = T_2(f; \beta h, \beta h f) + O(h^3) \\ &= f + D_{\beta h, \beta h f} f + \frac{1}{2!} D^2_{\beta h, \beta h f} f + O(h^3) \\ &= f + \beta h D_{1,f} f + \frac{1}{2!} \beta^2 h^2 D^2_{1,f} f + O(h^3) \\ &= f + \beta h F + \frac{\beta^2 h^2}{2} G + O(h^3) \end{aligned}$$

Método de RK explícito de 2 evaluaciones

Entonces:

$$K_2 = f + \beta h F + \frac{\beta^2 h^2}{2} G + O(h^3)$$

Además:

$$x(t+h) = x(t) + hx' + \frac{h^2}{2}x'' + \frac{h^3}{6}x''' + O(h^4)$$

y por lo tanto sustituyendo en $R_{n+1}(t)$ tendremos que

$$\begin{aligned} R_{n+1}(t) &= x(t+h) - x(t) - h\left((1-\alpha)K_1 + \alpha K_2\right) \\ &= hx' + \frac{h^2}{2}x'' + \frac{h^3}{6}x''' + O(h^4) \\ &\quad - h\left((1-\alpha)f + \alpha\left(f + \beta h F + \frac{\beta^2 h^2}{2}G + O(h^3)\right)\right) \end{aligned}$$

Método de RK explícito de 2 evaluaciones

Teniendo en cuenta que:

$$\begin{array}{rcl} x' & = & f \\ x'' & = & f' \quad = \quad f_t + f_x x' = f_t + f_x f = F \\ x''' & = & f'' \quad = \quad F' = F_t + F_x f = G + f_x F \end{array}$$

obtenemos:

$$\begin{aligned} R_{n+1}(t) &= hf + \frac{h^2}{2}F + \frac{h^3}{6}(G + f_x F) + O(h^4) \\ &\quad - h\left(f + \alpha\beta h F + \frac{\alpha\beta^2 h^2}{2}G + O(h^3)\right) \\ &= h^2\left(\frac{1}{2} - \alpha\beta\right)F + \frac{h^3}{6}((1 - 3\alpha\beta^2)G + f_x F) + O(h^4) \end{aligned}$$

de donde se deduce que el método será de orden 2 si el coeficiente de h^2 se hace cero, es decir, $\alpha\beta = \frac{1}{2}$.

Método de RK explícito de 2 evaluaciones

La igualdad anterior conduce a toda una familia de métodos de RK de orden 2

$$x_{n+1} = x_n + h\Big((1-\alpha)f(t_n, x_n) + \alpha f(t_n + \beta h, x_n + \beta h f(t_n, x_n))\Big),$$

con $\alpha\beta = \frac{1}{2}$. En particular tendremos:

- Para $\alpha = 1,\ \beta = \frac{1}{2}$

$$x_{n+1} = x_n + hf\left(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}hf(t_n, x_n)\right)$$

  se obtiene el método de Euler mejorado o Punto medio.

- Para $\alpha = \frac{1}{2},\ \beta = 1$

$$x_{n+1} = x_n + h\Big(\frac{1}{2}f(t_n, x_n) + \frac{1}{2}f(t_n + h, x_n + hf(t_n, x_n))\Big),$$

  se obtiene el método de Euler modificado o Heun.

Método de RK explícito de 2 evaluaciones

- Para $\alpha = \frac{3}{4},\ \beta = \frac{2}{3}$ el método resultante es

$$\boxed{\begin{array}{l} x_0 = \mu,\ t_0 = a, \\ \text{para } n = 0, 1, \ldots, N-1 \\ \quad t_{n+1} = t_n + h \\ \quad x_{n+1} = x_n + \dfrac{h}{4}\left(f(t_n, x_n) + 3f\left(t_n + \dfrac{2}{3}h, x_n + \dfrac{2}{3}hf(t_n, x_n)\right)\right) \end{array}}$$

Además, podemos decir que en cierto sentido la elección de estos parámetros α, β es óptima. ¿En qué sentido?

$$R_{n+1}(t) = \frac{h^3}{6}((1 - 3\alpha\beta^2)G + f_x F) + O(h^4) = \frac{h^3}{6}\, f_x F + O(h^4)$$

RK explícito de 4 evaluaciones (Runge-Kutta clásico)

Es un método de orden 4 así:

Método de RK de 4 evaluaciones explícito
$x_0 = \mu,\ t_0 = a,$ para $n = 0, 1, \ldots, N-1$ $\quad t_{n+1} = t_n + h$ $\quad x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$ donde $\quad K_1 = f(t_n, x_n)$ $\quad K_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}K_1)$ $\quad K_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}K_2)$ $\quad K_4 = f(t_n + h, x_n + hK_3)$

RK explícito de 4 evaluaciones (Runge-Kutta clásico)

El orden del método se obtiene mediante desarrollos de Taylor adecuados. Después de las oportunas simplificaciones se llega a la expresión:

$$
\begin{aligned}
R_{n+1}(t) &= hx' + \frac{h^2}{2}x'' + \frac{h^3}{6}x''' + \frac{h^4}{24}x^{iv} + O(h^5) \\
&\quad - h\frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6} \\
&= \cdots + \frac{h^4}{24}\left(x^{iv} - (H + f_x G + F(f_x^2 + 3f_{tx} + 3f f_{xx}))\right) + O(h^5)
\end{aligned}
$$

y usando las expresiones de las derivadas que se vieron anteriormente se comprueba que se anulan los términos en h, h^2, h^3 y h^4, por lo que el orden del método será al menos 4. Si se desea conocer el término principal de error de truncatura local, es decir el sumando que corresponde a h^5, entonces se debe usar en cada desarrollo un sumando más, lo que complica un poco los cálculos.

Métodos de RK

Ejercicio

Se pretende aproximar la solución del PVI:

$$\left.\begin{aligned} x' &= \frac{t-x}{2} \\ x(0) &= 1 \end{aligned}\right\}$$

en $[0,3]$.

1. Usa el método de Runge Kutta de 2 evaluaciones con $\alpha = \frac{3}{4}$ y $\beta = \frac{2}{3}$ para $h = 1$, $h = \frac{1}{2}$, $h = \frac{1}{4}$ y $h = \frac{1}{8}$ y compara los resultados obtenidos.
2. Repite el apartado anterior usando Runge Kutta clásico.

Nota: La solución exacta es $x(t) = 3e^{-t/2} + t - 2$