

## Un vistazo al método de Taylor con diferenciación automática para problemas de valor inicial

<sup>a</sup>Jaime Burgos-García, <sup>b</sup>Simón Rodríguez Rodríguez.

<sup>a,b</sup>Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Autónoma de Coahuila. Unidad Campo redondo, Edificio A. Saltillo, Coahuila, 25020. México.

<sup>a</sup>jburos@uadec.edu.mx, <sup>b</sup>simonrodriguez@uadec.edu.mx.

### Abstract

Among the several numerical methods to approximate solutions of ordinary differential equations, Taylor's method is one of the ancient methods to do so. Its developing is not too hard to understand from a theoretical point of view, as a consequence, such a method is studied in early courses of numerical analysis. However, the implementation of this method may result too much expensive because of the computation of the derivatives involved in the expansion. So, it was necessary to develop other methods where the computations of the derivatives are avoided, the classical methods of Runge-Kutta, Adams-Moulton, Adams-Bashfort are good examples of these methods. The main objective of this work is to expose an alternative approach to implement the Taylor's method with the aid of the technique called *automatic differentiation*. This approach allows us to compute the derivatives without the need of numerical approximations or analytic calculations.

### Resumen

El método de Taylor para la aproximación numérica de soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias es uno de los métodos más antiguos que se conocen para este fin. Su implementación no es complicada de comprender desde un punto de vista teórico por lo que es costumbre abordarlo en los primeros temas de solución numérica de problemas de valor inicial. Sin embargo, típicamente la implementación directa del método puede resultar en extremo costosa debido al cálculo de las  $n$ -ésimas derivadas para la expansión de la solución. Por esta razón se desarrollaron otros métodos que son computacionalmente más económicos como son los métodos clásicos de Runge-Kutta, Adams-Moulton, Adams-Bashfort, etc. El objetivo de este trabajo es exponer al lector una forma alternativa de implementar el método de Taylor por medio de la técnica denominada *diferenciación automática*. Esto permite obtener los coeficientes de la serie de Taylor de la solución sin necesidad de calcular analíticamente las derivadas o aproximarlas numéricamente.

---

*Keywords and phrases* : Numerical methods, automatic differentiation, Taylor's method, simple pendulum.

2010 *Mathematics Subject Classification* 34A34 , 34A12, 65L05.

---

## 1. Introducción

La historia nos ha enseñado la tremenda relevancia que han jugado las ecuaciones diferenciales y la búsqueda de sus soluciones en el conocimiento humano. Se sabe que el estudio del viejo problema de la dinámica de la Luna llevó a Newton y sus contemporáneos al desarrollo del cálculo diferencial y posteriormente al desarrollo de la teoría de ecuaciones diferenciales. La búsqueda de soluciones para la ecuación diferencial de la propagación del calor llevó a Fourier a sentar las bases del análisis que hoy lleva su nombre. Los estudios de Poincaré en el célebre problema gravitacional de tres cuerpos llevó al descubrimiento de comportamiento caótico en un sistema. Lo antes mencionado es sólo un intento de mencionar la importancia que ha tenido la búsqueda de soluciones de ecuaciones diferenciales, sin embargo, haría falta, sin exagerar, un libro entero para recopilar las tantas contribuciones que ésto ha aportado a la ciencia.

Podemos englobar tres distintos enfoques para estudiar un sistema dinámico descrito por un conjunto de ecuaciones diferenciales y sus soluciones. El primero, llamado analítico, tiene como objetivo la obtención de fórmulas que relacionan a las variables involucradas de manera tal que estas expresiones describan el comportamiento del sistema en una cierta región de interés. El segundo, llamado cualitativo, se centra en hacer un estudio topológico-geométrico del problema con el fin de obtener información del comportamiento de las trayectorias del sistema sin conocer fórmulas explícitas que las describan. El tercero, es por medio del uso de aproximaciones de las soluciones por medio de los métodos numéricos. Actualmente, estos tres enfoques se utilizan no solo por separado, sino en sus distintas fusiones para estudiar un determinado sistema. Sin embargo, en la vasta mayoría de sistemas que modelan la naturaleza solo es posible obtener información cuantitativa por medio de aproximaciones numéricas de las soluciones.

El advenimiento de las computadoras y su enorme desarrollo a lo largo de las décadas recientes ha facilitado e impulsado la implementación de las aproximaciones numéricas, lo que ha permitido tratar con problemas que hasta hace 100 años eran extremadamente difíciles o imposibles de estudiar. Sin embargo, el precio a pagar al usar aproximaciones es naturalmente la introducción de errores entre las soluciones verdaderas (garantizadas por los teoremas de existencia y unicidad) y las aproximadas, lo cual origina un nuevo problema que coloquialmente podemos resumir en la siguiente pregunta: ¿Qué tan “cercanas” podemos hacer nuestras aproximaciones a las soluciones verdaderas? La respuesta a la pregunta anterior no es para nada trivial y de hecho, sigue siendo una rama activa de investigación en nuestros días. El lector interesado puede consultar, por ejemplo, [Al2016] para más detalles.

El presente trabajo no pretende hacer una revisión exhaustiva, ya sea teórica o histórica, de los métodos numéricos disponibles para obtener soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales; tampoco pretende profundizar en los temas relacionados al control del error, más bien, el objetivo principal es hacer uso de uno de los métodos más clásicos en el análisis numérico, que a saber es el llamado *método de Taylor*, para introducir al lector a los denominados *métodos de alto orden* que permiten mejores aproximaciones de las soluciones de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. De esta forma, el lector se convencerá, que por medio del método expuesto en el presente trabajo, una respuesta práctica a la pregunta antes planteada sería a *grosso modo*: se puede hacer la aproximación tan cercana como se desee siempre y cuando lo permita la aritmética de punto flotante que se use. Haremos más precisos los términos *error*, *orden* y *mejor aproximación* en una aplicación a un sistema bastante conocido, *el péndulo simple*.

## 2. El péndulo simple y su solución

Uno de los problemas más básicos, pero no menos importantes, que se estudian en cursos introductorios de sistemas dinámicos es el *péndulo simple*. Dicho sistema corresponde a una idealización del problema de describir el movimiento de un objeto esférico de masa  $m$  en el extremo de una barra rígida de longitud  $l$  y masa despreciable, donde dicha barra puede girar alrededor de un punto fijo en el otro extremo. La ecuación

diferencial que describe el movimiento es de la forma

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0,$$

donde  $g$  representa la aceleración debida a la gravedad y  $\theta \in [-\pi, \pi]$  representa el ángulo como función del tiempo que forma el péndulo con respecto a la vertical. Se ha supuesto que las oscilaciones solo se efectúan en un plano y no hay fricción en el sistema. El lector que no esté familiarizado con este sistema puede consultar el capítulo 5 del libro [De2012] para más detalles.

Se puede realizar un primer análisis cualitativo del problema al considerar que bajo las condiciones ideales impuestas, la energía mecánica total del sistema (denotada como  $E$ ) está dada por energía cinética más energía potencial

$$E = \frac{1}{2} \dot{\theta}^2 - \frac{g}{l} \cos \theta, \quad (2.1)$$

la cual se conserva, es decir, permanece constante en el tiempo. Las curvas de nivel de la función (2.1) nos proporcionan la geometría de las trayectorias del sistema en el llamado *espacio fase* cuya estructura se muestra en la siguiente figura.

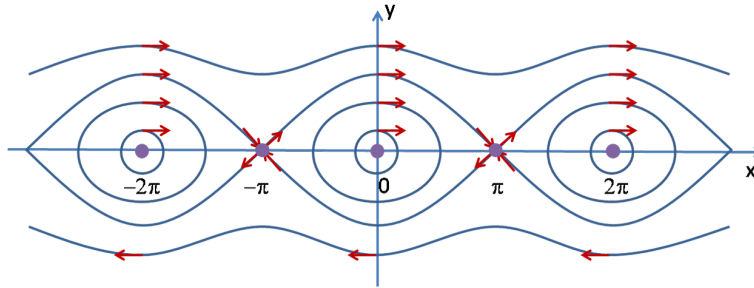


Figura 1: El retrato fase del péndulo simple con las identificaciones  $x := \theta$  y  $y := \dot{\theta}$ .

Cabe mencionar que existe una trayectoria especial llamada órbita heteroclínica o *separatriz* que *nace* en un punto de equilibrio para  $\theta = (2n + 1)\pi$ ,  $n \in \mathbb{Z}$  y *termina* en otro punto de equilibrio del mismo tipo. Como su nombre lo indica, el papel de esta órbita es separar los distintos tipos de movimiento ya que dentro de la región confinada por la separatriz las trayectorias son curvas cerradas que representan movimiento oscilatorio como en un antiguo reloj de péndulo, por fuera de esta región las trayectorias corresponden a circulaciones (vueltas completas) del péndulo. Para obtener información cuantitativa del valor del ángulo en función del tiempo necesitamos ya sea obtener una expresión que relacione estas variables o bien estimar los valores numéricamente. En los textos clásicos solo se aborda el aspecto cualitativo del problema [Go2011], [Th2003], [De2012], sin embargo, para nuestros propósitos es conveniente considerar la solución analítica del problema, vea el capítulo 3 del libro [Fa2013]. En lo que sigue analizaremos el caso oscilatorio (curvas cerradas en el espacio fase), por medio de una traslación en el tiempo podemos suponer que  $\dot{\theta}(0) = 0$ .

Por medio de la relación (2.1) se puede obtener la ecuación,

$$\omega_0 t = \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2 z^2)}} - \int_0^z \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2 s^2)}}, \quad (2.2)$$

donde  $\omega_0 = \sqrt{g/l}$ ,  $k = \sin(\theta_0/2)$ ,  $z = \sin(\theta/2)/\sin(\theta_0/2)$  siendo  $\theta_0$  la posición inicial del péndulo, es decir,  $\theta(0) = \theta_0$ . La primera integral en la expresión anterior

$$K(k) := \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2 z^2)}},$$

es lo que se conoce como una integral elíptica completa de primer tipo con módulo  $k$  y a la segunda integral

$$F(k, z) := \int_0^z \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2 s^2)}},$$

se le conoce como una integral elíptica incompleta. La primera integral nos proporciona el periodo  $T$  de las oscilaciones

$$T = \frac{4}{\omega_0} \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}} = \frac{4}{\omega_0} K(k).$$

Por otra parte, la expresión (2.2) se puede escribir con la notación introducida anteriormente como

$$F(z, k) = K(k) - \omega_0 t$$

y aquí entra en juego una de las llamadas funciones elípticas de Jacobi estudiada precisamente por este personaje, N. H. Abel, entre otros. Estos estudios fueron un esfuerzo por extender las tablas de integración elementales que se usan en cálculo. La función requerida es la función  $sn(u, k)$  que a grosso modo se puede decir que es una generalización de la función seno solo que definida sobre una elipse de excentricidad  $k$ . El lector interesado puede consultar el apéndice del libro [Fa2013] para más detalles al respecto. Una de las virtudes de la función  $sn(u, k)$  es que es la inversa de la función  $F(z, k)$ , por lo tanto la ecuación anterior se puede escribir como

$$z = sn(K(k) - \omega_0 t, k),$$

o en términos de las variables originales

$$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) sn\left(K\left(\frac{\theta_0}{2}\right) - \omega_0 t, \sin^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right)\right),$$

o bien

$$\theta(t) = 2 \sin^{-1}\left(\sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) sn\left(K\left(\frac{\theta_0}{2}\right) - \omega_0 t, \sin^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right)\right)\right).$$

La expresión anterior nos servirá para probar la eficacia del método de Taylor de orden arbitrario que se desarrollará en las siguientes secciones.

### 3. El método de Taylor y la diferenciación automática

Dado el problema de valor inicial (P.V.I)  $\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t))$ ,  $y(t_0) = y_0$ ,  $y \in D \subset \mathbb{R}^m$ ,  $t \in [t_0, t_f] \subset \mathbb{R}$  y dada una discretización del intervalo,  $t_{i+1} = t_i + h_i$  con  $h_i$  un tamaño de paso. Si se supone que  $f \in C^p(\Omega)$  con  $\Omega = [t_0, t_f] \times D$  podemos aproximar una solución del P.V.I como una expansión en serie de Taylor a orden  $p$  como

$$y(t_0) = y_0,$$

$$y(t_{i+1}) \approx y(t_i) + \frac{dy(t_i)}{dt} h_i + \frac{1}{2!} \frac{d^2 y(t_i)}{dt^2} h_i^2 + \dots + \frac{1}{p!} \frac{d^p y(t_i)}{dt^p} h_i^p.$$

Si usamos la notación  $y_i := y(t_i)$  y el campo vectorial obtenemos

$$y_{i+1} \approx y_i + f(t_i, y_i) h_i + \frac{1}{2} f^{(1)}(t_i, y_i) h_i^2 + \dots + \frac{1}{p} f^{(p-1)}(t_i, y_i) h_i^p,$$

donde hemos usado la siguiente notación

$$f^{(k)}(t_i, y_i) := \frac{1}{k!} \frac{d^k f}{dt^k}(t_i, y_i) = \frac{1}{k!} \frac{d^{k+1} y}{dt^{k+1}}(t_i) = (k+1) y^{(k+1)}(t_i)$$

para  $k = 0, 1, \dots, p-1$ . El defecto del método radica en el cálculo de las derivadas del campo vectorial en cada punto  $(t_i, y_i)$  para  $i = 1, 2, 3, \dots$ . Los enfoques clásicos para realizar esto podemos resumirlos como sigue

1. Cálculo analítico de  $f^{(k)}(t, y)$  para cada  $k = 1, 2, 3, \dots$  y su posterior evaluación en cada punto  $(t_i, y_i)$ .
2. Aproximación por diferencias finitas. Por ejemplo, en una variable la primera derivada sería aproximada por la expresión  $f'(x_i) \approx \frac{f(x_i+h) - f(x_i)}{h}$  con  $h$  “pequeño”.

### 3. Cálculo de $f^{(k)}(t_i, y_i)$ como coeficientes de expansiones en series de potencia.

Para ver la dificultad de la primera estrategia, considere el ejemplo en una dimensión,  $f(x) = e^{\cos(e^{\sin(x^2+1)})}$ . Si bien el cálculo analítico a mano de las primeras dos derivadas sería un buen ejercicio para un estudiante, el cálculo posterior se vuelve tedioso y complejo, inclusive el lector puede verificar que en una computadora el cálculo de las derivadas para  $p \geq 10$  lleva un tiempo de ejecución y cantidad de memoria considerable. Por otra parte, el segundo enfoque tiene ciertas dificultades de índole práctica. Considere las expresiones  $f(x_i + h) = \bar{f}(x_i + h) + e(x_i + h)$  y  $f(x_i) = \bar{f}(x_i) + e(x_i)$  donde  $e(\cdot)$  representa el inevitable error de redondeo y  $\bar{f}$  es la evaluación numérica en cada caso. En los cursos introductorios se muestra que el error absoluto entre el valor real y el valor aproximado se ve como

$$\left| f'(x_0) - \frac{\bar{f}(x_0 + h) - \bar{f}(x_0)}{h} \right| \leq \frac{Mh}{2} + \frac{2\delta}{h},$$

donde  $M$  es una cota para la segunda derivada en el intervalo en cuestión y  $\delta$  se supone como una cota para los errores de redondeo. Es claro que no se puede tomar la cantidad  $h$  “grande” ya que la aproximación sería mala y por otra parte tampoco podemos hacer tender a cero como dicta la definición ya que el error de redondeo aumentaría arruinando los cálculos. Por lo tanto, el segundo enfoque requiere que se tomen tamaños de paso óptimos en cada punto lo que a su vez conlleva a trabajo extra. Por supuesto, existen otros métodos más eficientes para aproximar numéricamente las derivadas de primer orden e inclusive de orden superior (fórmula de tres, cinco puntos, etc o inclusive métodos que involucran extrapolación). Sin embargo, todos estos métodos tienen el mismo inconveniente de realizar trabajo extra para estimar el paso óptimo. Más aún, en aplicaciones en soluciones numéricas de sistemas de ecuaciones diferenciales, por el propio tamaño del sistema y por el hecho de que el campo necesita ser derivado implícitamente, el trabajo puede aumentar considerablemente. El lector interesado en profundizar en los detalles técnicos acerca del cálculo de derivadas puede consultar los libros [Bu2002], [No2006], [Pr2002] para más información.

El tercer enfoque es el que vale la pena discutir para nuestros fines. Considere las series alrededor de un punto  $x_0$  con  $x_0, \alpha \in \mathbb{R}$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n,$$

$$g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n (x - x_0)^n,$$

Recordemos las operaciones básicas entre series de potencias en términos de sus coeficientes

1.  $(f + g)^{(n)} = a_n + b_n$ ,
2.  $(\alpha f)^{(n)} = \alpha a_n$ ,
3.  $(f')^{(n)} = (n + 1)a_n$ ,
4.  $(f \cdot g)^{(n)} = \sum_{k=0}^n a_{n-k} b_k$ .

Suponga por ejemplo que queremos calcular la serie  $e^{f(x)}$ , la estrategia natural sería considerar la expansión en serie de la función exponencial hacer la composición con la serie  $f(x)$  por medio de múltiples aplicaciones de la operación 4; esto tampoco es práctico si pretendemos calcular numerosos coeficientes de  $e^{f(x)}$ . Para sortear esta dificultad, hacemos uso de la técnica denominada *diferenciación automática* introducida en los años sesenta. El lector puede consultar [Mo1966] y [No2006] para más detalles al respecto. En aras de la simplicidad, discutiremos esta técnica en el ejemplo en cuestión.

La técnica explota fuertemente las propiedades de las funciones en cuestión, en este caso de la función exponencial. No es difícil ver que el primer término de la serie a calcular es  $(e^f)^{(0)} = e^{f(x_0)} = e^{a_0}$ , si  $a_0$  es

conocido entonces el primer coeficiente estará determinado. Ahora bien, usando la notación ya introducida definimos

$$e^{f(x)} := g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n (x - x_0)^n,$$

donde  $b_0$  ya es conocido y quedan por determinar los coeficientes  $b_n$  para  $n \geq 1$ . Una aplicación básica de la regla de la cadena nos da

$$\frac{d}{dx} g(x) = e^{f(x)} f'(x) = g(x) f'(x),$$

y usando las operaciones 3 y 4 obtenemos la relación

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1) b_{n+1} (x - x_0)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \sum_{k=0}^n b_{n-k} (k+1) a_{k+1} \right) (x - x_0)^n,$$

donde igualando coeficientes obtenemos las relaciones

$$b_n = \begin{cases} e^{a_0} & \text{si } n = 0 \\ \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} b_{n-(k+1)} (k+1) a_{k+1} & \text{si } n \geq 1. \end{cases}$$

Las fórmulas anteriores representan una relación que permite calcular los coeficientes de manera recursiva para cada  $n \geq 1$ . Por ejemplo, recuerde que  $b_0 = e^{a_0}$  y los coeficientes  $a_n$  ya son conocidos, el primer paso se lee como  $b_1 = b_0 a_1$  que determina al siguiente coeficiente, en un segundo paso tenemos  $b_2 = \frac{1}{2} (b_1 a_1 + 2b_0 a_2)$  el cual puede ser calculado con la información anterior y así sucesivamente. El lector puede notar que no son necesarias las expansiones convencionales del método de Taylor del campo vectorial en cuestión, lo que representa un gran ahorro de esfuerzo computacional. Por otro lado, tampoco es necesario realizar truncamientos *a priori* tanto en la expansiones del campo vectorial como de las soluciones, lo que da libertad de escoger *a posteriori* el orden de expansión para las soluciones.

## 4. Ejemplos de implementación y resultados

### 4.1. Implementación en el péndulo simple

Consideremos la ecuación del péndulo simple correspondiente al sistema de la sección (2)

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0.$$

Para facilitar la exposición supongamos unidades adecuadas tales que  $g/l = 1$ . Para ver la ecuación anterior como un sistema, introducimos coordenadas  $u_1 = \theta$ ,  $u_2 = \dot{\theta}$  entonces

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= u_2, \\ \dot{u}_2 &= -\sin(u_1). \end{aligned}$$

Supongamos que dichas coordenadas se desean expandir en serie de potencias, entonces la segunda ecuación lleva a un problema similar del ejemplo de la sección anterior: la composición de una serie con una función diferenciable. Para aplicar la filosofía de la diferenciación automática, introducimos las variables auxiliares  $u_3 = \sin(u_1)$  y  $u_4 = \cos(u_1)$ , entonces  $\dot{u}_3 = \cos(u_1) \dot{u}_1 = u_4 u_2$  y  $\dot{u}_4 = -\sin(u_1) \dot{u}_1 = -u_3 u_2$  por lo que obtenemos el nuevo sistema

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= u_2, \\ \dot{u}_2 &= -u_3, \\ \dot{u}_3 &= u_4 u_2, \\ \dot{u}_4 &= -u_3 u_2, \end{aligned} \tag{4.1}$$

con condiciones iniciales

$$\begin{aligned} u_1(0) &= \theta_0, \\ u_2(0) &= \dot{\theta}_0, \\ u_3(0) &= \sin(u_1(0)), \\ u_4(0) &= \cos(u_1(0)). \end{aligned}$$

Como el lector puede notar el campo vectorial ha tomado una forma polinomial la cual facilita la manipulación de las series de las soluciones del sistema ya que se reduce el problema a simples productos de series.

Aquí vale la pena reflexionar sobre el costo y beneficio de la implementación de la diferenciación automática, se puede ver el costo a pagar ha sido un aumento en el tamaño del sistema, sin embargo, el beneficio ha sido que se ha evitado la composición de series y se ha reemplazado por un producto de las mismas como se deseaba. Si suponemos para cada coordenada  $j = 1, 2, 3, 4$ . y cada tiempo  $t_i \in [t_0, t_f]$

$$u_j(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_j^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n$$

entonces, sustituyendo en el nuevo sistema obtenemos las relaciones

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)u_1^{(n+1)}(t_i)(t - t_i)^n &= \sum_{n=0}^{\infty} u_2^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n, \\ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)u_2^{(n+1)}(t_i)(t - t_i)^n &= - \sum_{n=0}^{\infty} u_3^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n, \\ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)u_3^{(n+1)}(t_i)(t - t_i)^n &= \sum_{n=0}^{\infty} u_2^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)u_4^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n, \\ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)u_4^{(n+1)}(t_i)(t - t_i)^n &= - \sum_{n=0}^{\infty} u_2^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)u_3^{(n)}(t_i)(t - t_i)^n. \end{aligned}$$

Igualando coeficientes y usando las reglas básicas antes mencionadas obtenemos

$$(n+1)u_1^{(n+1)}(t_i) = u_2^{(n)}(t_i), \quad (4.2)$$

$$(n+1)u_2^{(n+1)}(t_i) = -u_3^{(n)}(t_i), \quad (4.3)$$

$$(n+1)u_3^{(n+1)}(t_i) = \sum_{k=0}^n u_2^{(n-k)}(t_i)u_4^{(k)}(t_i), \quad (4.4)$$

$$(n+1)u_4^{(n+1)}(t_i) = - \sum_{k=0}^n u_2^{(n-k)}(t_i)u_3^{(k)}(t_i), \quad (4.5)$$

sujetas a las condiciones iniciales  $u^{(0)}(t_0) := (u_1^{(0)}(t_0), u_2^{(0)}(t_0), u_3^{(0)}(t_0), u_4^{(0)}(t_0))$ .

Las relaciones anteriores proporcionan fórmulas recursivas que deben ser calculadas para cada  $t_i \in [t_0, t_f]$  y cada  $n \geq 0$ . Por ejemplo, para una aproximación de las soluciones por el método de Taylor a un orden predeterminado con paso constante (de hecho se pueden considerar tanto orden como paso variables) consideremos  $h = (t_f - t_0)/N$ ,  $N \in \mathbb{N}$ ,  $w_j^{(i+1)} \approx u_j(t_{i+1})$  y un orden  $p$  para la expansión en serie, entonces con  $t_i = t_0 + ih$  tenemos las fórmulas iterativas para  $i = 0, 1, 2, \dots, N-1$

$$w_j^{i+1} = w_j^i + \sum_{n=1}^p u_j^{(n)}(t_0 + ih)h^n,$$

donde  $w_j^0 := u_j^{(0)}(t_0)$  son las condiciones iniciales para  $j = 1, 2, 3, 4$ . Por lo tanto, para determinar el paso siguiente  $w_j^1$  (con  $i = 0$ ) es necesario calcular los coeficientes  $u_j^{(n)}(t_0)$  con  $j = 1, 2, 3, 4$  y  $n = 1, 2, 3, \dots, p$ . Las fórmulas (4.2-4.5) para  $n = 0$  se ven como

$$\begin{aligned} u_1^{(1)}(t_0) &= u_2^{(0)}(t_0), \\ u_2^{(1)}(t_0) &= -u_3^{(0)}(t_0), \\ u_3^{(1)}(t_0) &= u_2^{(0)}(t_0)u_4^{(0)}(t_0), \\ u_4^{(1)}(t_0) &= -u_2^{(0)}(t_0)u_3^{(0)}(t_0), \end{aligned}$$

y están completamente determinadas por las condiciones iniciales. La información anterior se utilizará para determinar el siguiente vector

$$(u_1^{(2)}(t_0), u_2^{(2)}(t_0), u_3^{(2)}(t_0), u_4^{(2)}(t_0))$$

y así sucesivamente hasta calcular el vector

$$(u_1^{(p)}(t_0), u_2^{(p)}(t_0), u_3^{(p)}(t_0), u_4^{(p)}(t_0)).$$

Naturalmente, el siguiente paso  $w_j^{(2)}$  requiere de  $w_j^{(1)}$  y del cálculo de  $p$  vectores de coeficientes  $(u_1^{(n)}(t_1), u_2^{(n)}(t_1), u_3^{(n)}(t_1), u_4^{(n)}(t_1))$ ,  $n = 1, 2, \dots, p$ .

#### 4.1.1. Resultados numéricos

En esta sección se muestran algunas exploraciones numéricas realizadas por medio del método de Taylor en el péndulo simple con distintos ordenes, tamaños de paso y condiciones iniciales. Cabe mencionar que sin pérdida de generalidad usaremos condiciones iniciales del tipo  $\theta(0) = \theta_0$ ,  $\dot{\theta}(0) = 0$ . En cada tabla hemos usado la notación introducida previamente en el texto para el orden  $p$ , el tamaño de paso  $h$ , el número  $N$  de puntos usados en la partición del intervalo y el error relativo (denotado por  $e_r$ ) generado en el último paso, es decir  $e_r = (|\theta(t_N) - w_N|)/|\theta(t_N)|$  con  $\theta(t_N)$  dado por la solución analítica (2). Dado que para los métodos de un paso el error tiende a ser acumulativo y el sistema carece de singularidades, consideramos que mostrar el error en el último paso ilustra lo que sucede en los cálculos.

En la tabla (1) se muestran las pruebas realizadas con la condición inicial  $\theta_0 = \pi/4$  en el intervalo  $[0, T]$  con  $T$  dado por la función elíptica ya mencionada; en este caso  $T \approx 6.534345$ . Las primeras tres líneas de la tabla muestran el error relativo cometido en el último paso de la caminata tomando 100 puntos, de hecho el error cometido en cada punto de la caminata no se aleja mucho de ese orden de magnitud. Si se desean tomar menos puntos, lo que conlleva a un mayor tamaño de paso, se necesita aumentar el orden para mantener el error global del mismo orden que para  $N = 100$  puntos.

$p$	$N$	$h$	$e_r$
5	100	$6.53 \times 10^{-2}$	$1.70 \times 10^{-8}$
7	100	$6.53 \times 10^{-2}$	$4.21 \times 10^{-12}$
9	100	$6.53 \times 10^{-2}$	$2.40 \times 10^{-15}$
5	50	$1.30 \times 10^{-1}$	$5.38 \times 10^{-7}$
10	50	$1.30 \times 10^{-1}$	$9.32 \times 10^{-15}$

Tabla 1: Pruebas para el péndulo simple con  $\theta_0 = \pi/4$

En la tabla (2) se muestran las pruebas realizadas para un intervalo de integración mucho mayor que el ejemplo anterior. Dado que para  $\theta_0 = \pi$ ,  $T = \infty$ , tomamos la aproximación  $\theta_0 = 3.14$  en el intervalo  $[0, T]$  con  $T \approx 34.087186$ . Las primeras dos líneas de la tabla muestran el efecto de duplicar el número de puntos, o equivalentemente, disminuir el tamaño de paso en la integración para intentar mejorar la precisión. Sin embargo, en nuestra implementación tenemos la ventaja de que en lugar de disminuir el tamaño de paso,



$p$	$N$	$h$	$e_r$
9	100	$3.40 \times 10^{-1}$	$3.31 \times 10^{-5}$
9	200	$1.70 \times 10^{-1}$	$1.67 \times 10^{-7}$
22	100	$3.40 \times 10^{-1}$	$3.57 \times 10^{-13}$
42	50	$6.81 \times 10^{-1}$	$1.27 \times 10^{-12}$

Tabla 2: Pruebas para el péndulo simple con  $\theta_0 = 3.14$ 

podemos aumentar el orden de las expansiones para tratar de mejorar la precisión. En la última línea se muestra un ejemplo más dramático en el que hemos tomado inclusive menos puntos, lo cual puede ser útil cuando solo se desea obtener la información de los últimos puntos del intervalo, con un coste de aumentar considerablemente el orden del método en aras de no aumentar el error global cometido.

Con el fin de resaltar las virtudes del método realizamos algunas comparaciones con uno de los mejores integradores comerciales en cuanto a precisión se refiere, a saber, este integrador está basado en un método predictor corrector Adams-Bashfort-Moulton (*ode113*) de orden y paso variables, y se encuentra disponible en la *ODE suite* de Matlab. El mayor orden utilizado para obtener los resultados es 12 mientras que el orden 13 se usa para controlar el error. El lector puede encontrar más detalles en [Sh1997]. Para el caso de  $\theta_0 = 3.14$  y con tolerancias especificadas de  $10^{-12}$  para el error relativo y  $10^{-14}$  para el error absoluto en las opciones de *ode113*, encontramos en el paso final un error relativo de  $6.98 \times 10^{-10}$ , donde se emplearon 525 puntos con un tiempo de ejecución promedio de aproximadamente 0.11 segundos. Por otra parte, el método de Taylor con 160 puntos y con orden  $p = 12$  produce, después de un tiempo de ejecución promedio de 0.096 segundos, un error relativo en el paso final de  $6.54 \times 10^{-10}$  el cual es ligeramente menor pero en el que se usan muchos menos puntos en la caminata. Cabe mencionar que los cálculos realizados se efectuaron en una computadora de escritorio bastante estandar con un procesador *AMD A9-9430 RADEON R5, 3200Mhz*. El lector puede encontrar códigos disponibles para *C++* y Matlab en <https://github.com/numericfcfm/Numerics-for-ode>.

## 5. Conclusiones y comentarios

Las ecuaciones del péndulo simple permiten realizar experimentos que permiten manejar de manera manual el número de pasos y el orden del integrador para mejorar los resultados. Sin embargo, en sistemas caóticos y/o con singularidades esto no se vuelve práctico y más aún, un paso constante tampoco ayuda dado que en regiones problemáticas, por ejemplo, cerca de una singularidad, el tamaño de paso se debe tomar muy pequeño desde el comienzo de la integración a causa de las divisiones entre valores cercanos a cero. Esto implicaría que en las regiones donde el campo vectorial varía lentamente se estarían realizando una cantidad incesaria de evaluaciones, esto lleva a la necesidad de considerar un método de Taylor con orden y paso variable que se ajuste automáticamente para satisfacer una tolerancia dada para el error, que es lo que de manera profesional se emplea. El lector puede consultar la referencia [Bu2019] para ver una aplicación en un problema de dinámica orbital. En este punto confiamos que el lector haya podido convencerse de la utilidad del método cuando se requieren cálculos de gran precisión sin sacrificar tiempo de implementación y ejecución de las rutinas y sin necesidad de grandes modificaciones en los códigos, como sería el caso de cambiar de orden en un método de Runge-Kutta.

En el ejemplo del péndulo se obtiene un campo vectorial polinomial a expensas de aumentar el número de ecuaciones diferenciales, esto ocurrirá siempre que haya funciones elementales no polinomiales en el campo vectorial. Por sencillez es deseable (aunque no necesario) que los polinomios sean de grado dos como ocurre en este caso. En el caso de que el campo vectorial sea polinomial pero de grado mayor que dos es necesario definir nuevas variables para reducir el grado de los polinomios a dos. En este caso no se aumenta el número de ecuaciones diferenciales como se verá en los siguientes ejemplos.

Las ecuaciones de Van del Pol, que describen un oscilador con amortiguamiento no lineal, expresadas

como un sistema son

$$\begin{aligned}\dot{x} &= y, \\ \dot{y} &= (1 - x^2)y - x,\end{aligned}$$

si se definen tres variables auxiliares  $u_1 = x$ ,  $u_2 = y$  y  $u_3 = 1 - x^2$  el sistema de ecuaciones queda como

$$\begin{aligned}\dot{u}_1 &= u_2, \\ \dot{u}_2 &= u_3 u_2 - u_1,\end{aligned}$$

donde se puede observar que el sistema en las variables  $u_1$  y  $u_2$  ya es cuadrático por lo que se puede aplicar la misma estrategia aplicada en el caso del péndulo simple. Otro ejemplo interesante es la ecuación de Duffing autónoma

$$\ddot{x} + \delta \dot{x} + \alpha x + \beta x^3 = 0,$$

que es una aproximación del sistema del péndulo con amortiguamiento para ángulos no tan pequeños. La ecuación se puede escribir como un sistema de ecuaciones polinomiales cuadráticas si se definen las variables auxiliares  $u_1 = x$ ,  $u_2 = \dot{x} = \dot{u}_1$  y  $u_3 = x^2$  el sistema queda como

$$\begin{aligned}\dot{u}_1 &= u_2, \\ \dot{u}_2 &= -\delta u_2 - \alpha u_1 - \beta u_3 u_1.\end{aligned}$$

Se puede ver que en ambos ejemplos no fue necesario aumentar el sistema de ecuaciones diferenciales, solo fue necesario definir variables auxiliares donde se aplicarán la mismas reglas básicas de suma, producto y diferenciación de series de potencia. El lector interesado en estos ejemplos puede consultar [De2012], [Fa2013].

Por supuesto que este trabajo introductorio solo es la punta del gran iceberg que representa el área de estudio de los métodos rigurosos de integración. Ya fue mencionado en varias ocasiones que se pueden implementar métodos de tamaño de paso y orden variables basados en la técnica de diferenciación automática. En un trabajo futuro mostraremos la potencia de este método en el sistema de Lorenz, que resulta ser caótico, [De2012]. Como comentario final, debemos decir que desde luego el método tiene limitaciones, por ejemplo, una de ellas es que el campo vectorial debe estar expresado en término de funciones elementales. Referimos a lector interesado al trabajo [Jo2005] y su bibliografía para mayores detalles.

## Agradecimientos

El primer autor desea agradecer al Dr. Jason Mireles-James por sus valiosas aportaciones en las épocas tempranas de investigación del autor en este campo. La parte final de este trabajo contó con el apoyo del proyecto COAH-2019-C13-B04.

## Referencias

- [Pr2002] W.H. Press, *et al.* Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing *CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS*. Second Edition, 2002.
- [No2006] J. Nocedal, S.J. Wright. Numerical Optimization. *Springer*. Second Edition, 2006.
- [De2012] P. Blanchard, R.L. Devaney, G.R. Hall. Differential Equations. *Brooks/ Cole*, CENGAGE Learning, 2012.
- [Bu2002] R.L. Burden, J.D. Faire. Análisis numérico. *Séptima edición*, Thomson Learning 2002.
- [Bu2019] J. Burgos-García, J.D Mireles James, J.P Lessard. Spatial periodic orbits in the equilateral circular restricted four body problem. computer-assisted proofs of existence. *Celest. Mech. Dyn. Astr.*, 131(2), 2019.

- [Fa2013] A. Fasano, S. Marmi. Analytical mechanics. *Oxford Graduate Texts*, Oxford University Press, Oxford, 2013.
- [Go2011] H. Goldstein, C.P. Poole, J.L. Safko. Classical Mechanics, 3rd edition. *Pearson Education*, 2011.
- [Al2016] A. Hungria, J.P Lessard, J.D Mireles James. Rigorous numerics for analytic solutions of differential equations: the radii polynomial approach. *Math. Comp.*, 85(299):1427-1459, 2016.
- [Jo2005] A. Jorba, M. Zou. A software package for the numerical integration of ODEs by means of high-order Taylor methods. *Experiment Math.*, 14(1):99–117, 2005.
- [Mo1966] R. E. Moore. Interval Analysis. *Englewood Cliffs*, N.J. Prentice-Hall, 1966.
- [Sh1997] L.F. Shampine, M.W. Reichelt. "The MATLAB ODE Suite". *SIAM J. Sci.Comput.*, 18(1)1-22, 1997 .
- [Th2003] S.T. Thornton, J.B. Marion. Classical Dynamics of Particles and Systems, 5th edition. *Brooks/Cole*, CENGAGE Learning, 2003.