

Análisis Numérico III
Problemas de valores iniciales
de ecuaciones diferenciales ordinarias (Parte I)
Módulo 1, Presentación 1

Raimund Bürger

14 de marzo de 2022

1.0. Introducción

Un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) de primer orden es dado por

$$\begin{aligned}y_1' &= f_1(x, y_1, \dots, y_n), \\y_2' &= f_2(x, y_1, \dots, y_n), \\&\vdots \\y_n' &= f_n(x, y_1, \dots, y_n).\end{aligned}\tag{1.1}$$

Cada sistema de funciones

$$y_1 = y_1(x), \dots, y_n = y_n(x), \quad y_i \in C^1(a, b), \quad i = 1, \dots, n$$

que satisface (1.1) idénticamente se llama **solución** de (1.1).

Problemas de valores iniciales:

$$y_i' = f_i(x, y_1, \dots, y_n), \quad y_i(a) = y_a^i, \quad i = 1, \dots, n.\tag{1.2}$$

1.0. Introducción

Notación compacta:

$$\mathbf{y} := \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}_a := \begin{pmatrix} y_a^1 \\ \vdots \\ y_a^n \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1, \dots, y_n) \\ \vdots \\ f_n(x, y_1, \dots, y_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x, \mathbf{y}) \\ \vdots \\ f_n(x, \mathbf{y}) \end{pmatrix},$$

entonces (1.2) se escribe como

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_a. \quad (1.3)$$

Cada problema de valores iniciales (PVI) de una EDO del orden n puede ser reducido a (1.2) o (1.3).

$$y^{(n)} := \frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}), \quad (1.4)$$
$$y^{(j)}(a) = y_a^j, \quad j = 0, \dots, n-1.$$

1.0. Introducción

Podemos identificar la j -ésima derivada $y^{(j)}$ de la función escalar $y = y(x)$ con la $(j + 1)$ -ésima componente y_{j+1} de un vector

$$\mathbf{y}(x) = (y_1(x), \dots, y_n(x))^T$$

de n funciones escalares,

$$y^{(j)} = y_{j+1}, \quad j = 0, \dots, n-1,$$

y así convertir (1.4) en el siguiente sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias escalares de primer orden:

$$\begin{aligned} y_1' &= y_2, \\ y_2' &= y_3, \\ &\vdots \\ y_{n-1}' &= y_n, \\ y_n' &= f(x, y_1, \dots, y_n). \end{aligned}$$

1.0. Introducción

Obtenemos un sistema de EDOs del tipo (1.3) con

$$\mathbf{y}(a) = \begin{pmatrix} y_a^0 \\ y_a^1 \\ \vdots \\ y_a^{n-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} y_2 \\ \vdots \\ y_n \\ f(x, y_1, \dots, y_n) \end{pmatrix}.$$

La componente $y_1(x)$ de la solución del sistema corresponde a la solución $y(x)$ del PVI (1.4).

1.1. Métodos de paso simple explícitos

1.1.1 Método general Para la aproximación numérica del problema (1.2) o (1.3), se subdivide el intervalo $[a, b]$ en N subintervalos del tamaño

$$h := \frac{b - a}{N} > 0,$$

el cual se llama **tamaño de paso**. Los puntos

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, \dots, N$$

se llaman **puntos de malla**; la totalidad de los puntos para un valor de $h > 0$ se llama **malla** G_h .

Queremos calcular **aproximaciones**

$$\mathbf{y}_i^h := (y_{1i}^h, \dots, y_{ni}^h)^T$$

de los valores **exactos**

$$\mathbf{y}(x_i) = (y_1(x_i), \dots, y_n(x_i))^T$$

de la solución (incógnita) en los puntos de la malla.

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Los métodos mas simples son **métodos de paso simple explícitos**. Estos métodos permiten la computación de \mathbf{y}_{i+1}^h cuando se conoce solamente \mathbf{y}_i^h (para h dado). Usando una función vectorial

$$\Phi := (\Phi_1, \dots, \Phi_n)^T,$$

obtenemos el método general

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{i+1}^h &= \mathbf{y}_i^h + h\Phi(x_i, \mathbf{y}_i^h; h), \quad i = 0, \dots, N-1, \\ \mathbf{y}_0^h &= \mathbf{y}_a.\end{aligned}\tag{1.5}$$

En detalle,

$$\begin{aligned}y_{1,i+1}^h &= y_{1i}^h + h\Phi_1(x_i, y_{1i}^h, \dots, y_{ni}^h; h), \\ &\vdots \\ y_{n,i+1}^h &= y_{ni}^h + h\Phi_n(x_i, y_{1i}^h, \dots, y_{ni}^h; h), \\ y_{k0}^h &= y_a^k, \quad k = 1, \dots, n.\end{aligned}$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

El sistema (1.5) es un sistema de **ecuaciones de diferencias**. Obviamente, hay que elegir la función Φ de tal forma que los vectores \mathbf{y}_i^h efectivamente sean aproximaciones de $\mathbf{y}(x_i)$.

En el caso más simple, el sistema (1.5) resulta del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias a través de reemplazar todas las derivadas por cuocientes de diferencias. El método (1.5) se llama **método de diferencias finitas de paso simple**.

1.1.2 Método de Euler Consideremos el caso $n = 1$, o sea una ecuación diferencial ordinaria del tipo

$$y' = f(x, y). \quad (1.6)$$

Si $y = y(x)$ es una solución suficientemente suave de (1.6), tenemos la fórmula de Taylor

$$y(x + h) = \sum_{k=0}^m \frac{h^k}{k!} y^{(k)}(x) + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} y^{(m+1)}(x + \theta h), \quad \theta \in [0, 1]. \quad (1.7)$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Para $x = x_i$ y no considerando el término $\frac{h^{m+1}}{(m+1)!} y^{(m+1)}(x + \theta h)$ de (1.7), podemos calcular $y(x_i + h)$ de $y(x_i)$, dado que

$$y' = f, \quad (1.8)$$

$$y'' = f_x + f f_y, \quad (1.9)$$

$$y''' = f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f(f_y)^2, \quad \text{etc.}$$

Motivación:

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Este método es poco útil, salvo en aquellos casos donde podemos desarrollar la función f en una serie de potencias. Sin embargo, para $m = 1$ tenemos

$$y(x_i + h) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + \frac{h^2}{2}y''(x_i + \theta h).$$

Despreciando el término $\frac{h^2}{2}y''(x_i + \theta h)$, llegamos al método

$$y_{i+1}^h = y_i^h + hf(x_i, y_i^h), \quad i = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.10)$$

Ejemplo ad-hoc:

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Este método es un **método de paso simple** con

$$\Phi(x, y; h) = f(x, y),$$

o sea, la función Φ **no depende de h** .

Para el caso del **sistema (1.3)**, un cálculo análogo entrega el método

$$\mathbf{y}_{i+1}^h = \mathbf{y}_i^h + h\mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i^h), \quad i = 0, \dots, N-1, \quad (1.11)$$

donde

$$\Phi(x, \mathbf{y}; h) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}).$$

En ambos casos, (1.10) y (1.11), podemos reescribir el método como

$$\frac{1}{h}(\mathbf{y}_{i+1}^h - \mathbf{y}_i^h) = \mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i^h), \quad i = 0, \dots, N-1,$$

lo que ilustra la idea básica de la construcción.

1.1. Métodos de paso simple explícitos

El método (1.10) o (1.11) se llama **método de Euler explícito** o **método de trazado poligonal**. Este método es el más simple posible. (Por supuesto, el término “método de Euler explícito” indica que existe también una versión implícita, la cual vamos a conocer más adelante.)

Motivación:

1.1. Métodos de paso simple explícitos

1.1.3 Métodos de Taylor Consideremos la fórmula (1.7):

$$y(x+h) = \sum_{k=0}^m \frac{h^k}{k!} y^{(k)}(x) + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} y^{(m+1)}(x+\theta h), \quad \theta \in [0, 1].$$

Las derivadas de y son reemplazadas por evaluaciones de la función f y ciertos términos que involucran sus derivadas parciales. Por ejemplo, partiendo del desarrollo en serie de Taylor truncado

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \mathcal{O}(h^3)$$

y utilizando (1.8) y (1.9), obtenemos

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + hf(x, y(x)) \\ &\quad + \frac{h^2}{2} \left(f_x(x, y(x)) + f(x, y(x))f_y(x, y(x)) \right) + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned}$$

de lo cual sigue el **método de Taylor de segundo orden**

$$y_{i+1}^h = y_i^h + hf(x_i, y_i^h) + \frac{h^2}{2} \left(f_x(x_i, y_i^h) + f(x_i, y_i^h)f_y(x_i, y_i^h) \right).$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

$$y_{i+1}^h = y_i^h + hf(x_i, y_i^h) + \frac{h^2}{2} \left(f_x(x_i, y_i^h) + f(x_i, y_i^h) f_y(x_i, y_i^h) \right).$$

Ejemplo ad-hoc:

1.1. Métodos de paso simple explícitos

La gran desventaja de estos métodos es la necesidad de **evaluar numéricamente** (o por derivación automática o simbólica) las derivadas parciales de la función f . Salvo por casos excepcionales, **no es aceptable** el esfuerzo computacional requerido por tales métodos. Los **métodos del tipo Runge-Kutta** requieren solamente la evaluación de la función f misma.

1.1.4 Métodos de Runge-Kutta Los métodos que vamos a introducir ahora no se distinguen en los casos de ecuaciones escalares y de **sistemas de ecuaciones**, por lo tanto los presentamos desde el principio para el caso de sistemas.

Sea la solución $\mathbf{y} = \mathbf{y}(x)$ del problema de valores iniciales (1.3)

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_a$$

conocida en x , y queremos evaluarla en $x + h$, $h > 0$. Utilizando el Teorema Principal del Cálculo Diferencial e Integral, tenemos

$$\mathbf{y}(x + h) = \mathbf{y}(x) + h \int_0^1 \mathbf{y}'(x + \tau h) d\tau. \quad (1.12)$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

La integral se aproxima por una **fórmula de cuadratura**, donde los **nodos** α_i y los **pesos** γ_i , $i = 1, \dots, m$, se refieren al intervalo de integración $[0, 1]$:

$$\int_0^1 \mathbf{g}(w) dw \approx \sum_{i=1}^m \gamma_i \mathbf{g}(\alpha_i). \quad (1.13)$$

dado que la fórmula de cuadratura (1.13) debe ser exacta por lo menos para $\mathbf{g} \equiv \text{const.}$, obtenemos la restricción

$$\sum_{i=1}^m \gamma_i = 1. \quad (1.14)$$

Aproximando la integral en (1.12) por la fórmula de cuadratura (1.13), obtenemos

$$\mathbf{y}(x+h) \approx \mathbf{y}(x) + h \sum_{i=1}^m \gamma_i \mathbf{y}'(x_i + \alpha_i h). \quad (1.15)$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Usando la ecuación diferencial $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$, podemos convertir (1.15) en

$$\mathbf{y}(x+h) \approx \mathbf{y}(x) + h \sum_{i=1}^m \gamma_i \mathbf{f}(x + \alpha_i h, \mathbf{y}(x + \alpha_i h)).$$

Para $\alpha_i \neq 0$ los valores $\mathbf{y}(x + \alpha_i h)$ son incógnitos. Para su aproximación, usamos nuevamente el ya mencionado Teorema Principal. Ahora

$$\mathbf{y}(x + \alpha_i h) = \mathbf{y}(x) + h \int_0^{\alpha_i} \mathbf{y}'(x + \tau h) d\tau, \quad i = 1, \dots, m. \quad (1.16)$$

Nuevamente queremos aproximar las integrales en (1.16) por fórmulas de cuadratura. Los nodos de las nuevas fórmulas de cuadratura sean los mismos valores $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ de (1.13).

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Para la aproximación de la integral en (1.16) sobre el intervalo $[0, \alpha_i] \subset [0, 1]$ usamos una fórmula del tipo

$$\int_0^{\alpha_i} \mathbf{g}(w) dw \approx \sum_{j=1}^m \beta_{ij} \mathbf{g}(\alpha_j), \quad i = 1, \dots, m,$$

donde los pesos β_{ij} aún no están especificados, y los nodos α_j dados no necesariamente deben pertenecer a $[0, \alpha_i]$. Se debe satisfacer

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^m \beta_{ij}, \quad i = 1, \dots, m. \quad (1.17)$$

Un **método de Runge-Kutta de m pasos** es dado por las fórmulas

$$\mathbf{y}^h(x + h) = \mathbf{y}^h(x) + h \sum_{i=1}^m \gamma_i \mathbf{k}_i, \quad (1.18)$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{f} \left(x + \alpha_i h, \mathbf{y}^h(x) + h \sum_{j=1}^m \beta_{ij} \mathbf{k}_j \right), \quad i = 1, \dots, m. \quad (1.19)$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

En general, (1.19) representa un sistema de m ecuaciones no lineales para m vectores $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_m$, cada uno con n componentes escalares. Incluso para una ecuación escalar, tenemos un sistema de m ecuaciones (algebraicas) de la dimensión m .

Para el caso $\alpha_1 = 0$ y $\beta_{ij} = 0$ para $j \geq i$, (1.19) no es intrínsecamente un sistema de ecuaciones no lineales, ya que en este caso podemos calcular \mathbf{k}_2 explícitamente de $\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x))$, \mathbf{k}_3 de \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 , etc. En este caso, se habla de un **método de Runge-Kutta explícito**.

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Dado que las fórmulas (1.18) y (1.19) son las mismas para todos los métodos de Runge-Kutta, pero hay una gran cantidad de coeficientes α_i , γ_i y β_{ij} propuestos en la literatura, es muy común representar un método de Runge-Kutta a través del llamado **diagrama de Butcher**:

$$\begin{array}{c|cccc} \alpha_1 & \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1m} \\ \alpha_2 & \beta_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \alpha_m & \beta_{m1} & \cdots & \cdots & \beta_{mm} \\ \hline & \gamma_1 & \gamma_2 & \cdots & \gamma_m \end{array} \quad (1.20)$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Ejemplo 1.1 (Métodos de Heun) Para $m = 3$, los métodos de Heun son dados por

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 2 & 0 \\ \hline & 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{array} \quad y \quad \begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 0 & 0 \\ 2/3 & 0 & 2/3 & 0 \\ \hline & 1/4 & 0 & 3/4 \end{array} .$$

En detalle, combinando (1.18) y (1.19) con el diagrama de Butcher, podemos, por ejemplo, escribir el segundo método como

$$\mathbf{y}_{i+1}^h = \mathbf{y}_i^h + h \left(\frac{1}{4} \mathbf{k}_1^{(i)} + \frac{3}{4} \mathbf{k}_3^{(i)} \right),$$

$$\text{donde } \mathbf{k}_1^{(i)} = \mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i^h),$$

$$\mathbf{k}_2^{(i)} = \mathbf{f} \left(x_i + \frac{h}{3}, \mathbf{y}_i^h + \frac{h}{3} \mathbf{k}_1^{(i)} \right),$$

$$\mathbf{k}_3^{(i)} = \mathbf{f} \left(x_i + \frac{2h}{3}, \mathbf{y}_i^h + \frac{2h}{3} \mathbf{k}_2^{(i)} \right).$$

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Ejemplo 1.2 (Método clásico de Runge-Kutta de cuatro pasos)

Este método con $m = 4$ corresponde al diagrama

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	0	0	1	0
<hr/>				
	1/6	1/3	1/3	1/6

1.1. Métodos de paso simple explícitos

Ejemplo 1.2 (continuación) Es decir, este método corresponde a la fórmula

$$\mathbf{y}_{i+1}^h = \mathbf{y}_i^h + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1^{(i)} + 2\mathbf{k}_2^{(i)} + 2\mathbf{k}_3^{(i)} + \mathbf{k}_4^{(i)})$$

o equivalentemente, al método (1.5) con

$$\Phi(x_i, \mathbf{y}_i^h; h) = \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1^{(i)} + 2\mathbf{k}_2^{(i)} + 2\mathbf{k}_3^{(i)} + \mathbf{k}_4^{(i)}),$$

donde

$$\mathbf{k}_1^{(i)} = \mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i^h),$$

$$\mathbf{k}_2^{(i)} = \mathbf{f}\left(x_i + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_i^h + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1^{(i)}\right),$$

$$\mathbf{k}_3^{(i)} = \mathbf{f}\left(x_i + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_i^h + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2^{(i)}\right),$$

$$\mathbf{k}_4^{(i)} = \mathbf{f}(x_{i+1}, \mathbf{y}_i^h + h\mathbf{k}_3^{(i)}).$$