

Métodos Numéricos Aplicados a Ecuaciones Diferenciales

2.1 Definición del Problema de Ecuación Diferencial

Una ecuación diferencial (ordinaria) es aquella que involucra una variable independiente, una variable dependiente y la derivada (ó derivadas) de esta última. En una ecuación diferencial, la incógnita es la variable dependiente y se espera encontrarla como función de la variable independiente, de tal forma que si se sustituye dicha variable dependiente, así como las derivadas que aparecen en la ecuación diferencial, la igualdad que resulta es verdadera.

Las ecuaciones diferenciales aparecen naturalmente al modelar situaciones físicas en las ciencias naturales, ingeniería, y otras disciplinas, donde hay envueltas razones de cambio de una ó varias funciones desconocidas con respecto a una ó varias variables independientes. Estos modelos varían entre los más sencillos que envuelven una sola ecuación diferencial para una función desconocida, hasta otros más complejos que envuelven sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas para varias funciones desconocidas. Por ejemplo, la ley de enfriamiento de Newton y las leyes mecánicas que rigen el movimiento de los cuerpos, al ponerse en términos matemáticos dan lugar a ecuaciones diferenciales. Usualmente estas ecuaciones están acompañadas de una condición adicional que especifica el estado del sistema en un tiempo o posición inicial. Esto se conoce como la *condición inicial* y junto con la ecuación diferencial forman lo que se conoce como el *problema de valor inicial*. Por lo general, la solución exacta de un problema de valor inicial es imposible ó difícil de obtener en forma analítica. Por tal razón los métodos numéricos se utilizan para aproximar dichas soluciones

La forma más general de una de ecuación diferencial sobre derivadas ordinarias es:

$$y^{(n)} = \frac{d^n y}{dt^n} = F(t, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad (1)$$

El problema anterior es una *ecuación diferencial ordinaria de orden "n"*¹, y la cual se supone la presencia de condiciones iniciales, en igual número, que el orden de la ecuación; en lo cual se dice que se trata de un problema de ecuación diferencial a condiciones iniciales o condiciones de contorno. La solución de este problema, que puede ser emprendido por variados métodos, persigue determinar el valor de la función $y(x)$, que dio origen a la ecuación diferencial.

El tipo más simple de ecuación diferencial ordinaria es la lineal de primer orden, el *Problema de Cauchy* de la forma:

¹ Se llama ecuación diferencial ordinaria (E.D.O.) a una ecuación que liga la variable independiente t , una función $y = y(t)$ (que depende solo de la variable independiente) y sus respectivas derivadas $y', y'', \dots, y^{(n)}$. Es decir, una expresión de la forma:

$$F(t, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0$$

A la función $y = y(t)$ se le llama función incógnita. <http://www.satd.uma.es/matap/jlgalan/analvect/tema5.pdf>.

$$\wp \equiv \begin{cases} y'(t) = \frac{dy(t)}{dt} = F(t, y) \\ y(t = t_0) = y_0 \end{cases}$$

Se supone que la solución del problema de la ecuación diferencial ordinaria, a condiciones iniciales, es *única, continua y diferenciable* en una región finita:

$$a \leq t \leq b \quad (2)$$

De igual forma, la función $F(t, y)$ es *definida y continua* en este mismo intervalo ($t \in [a, b]$), y que cumple con el *Teorema de Lipschitz*².

Para atacar el Problema de Cauchy, \wp ; existe gran cantidad de métodos. Los métodos numéricos cobran vigencia en la resolución de ecuaciones diferenciales cuya solución no pueden ser obtenidas por los métodos tradicionales; de ahí la necesidad de implementar métodos aproximantes para la solución de ecuaciones diferenciales. Los métodos de aproximación de mayor uso son: el Método de Euler, Método de Heun, Runge-Kutta, etc.

2.2 Series de Taylor

Las *series de Taylor*³ tienen un gran valor para el estudio de los métodos numéricos. En esencia, la serie de Taylor provee un medio para predecir el valor de una función en un punto en términos del valor de la función y sus derivadas en otro punto. En particular, el teorema establece que cualquier función suave puede ser aproximada con un polinomio.

Un buen camino para obtener más conocimiento de la serie de Taylor se obtendrá mediante su construcción término por término. Por ejemplo, el primer término de la serie es:

$$Y(t_{j+1}) \cong Y(t_j) \quad (3)$$

Esta relación, conocida como *aproximación de orden cero*, indica que el valor de Y en el nuevo punto es el mismo que el valor en el punto anterior. Este resultado se logra intuitivamente, ya que si t_j y t_{j+1} están muy próximas una de la otra, entonces es igualmente posible que el nuevo valor sea quizá similar al anterior.

La ecuación anterior da una estimación perfecta de si la función que se va a aproximar es una constante. Sin embargo, si la función se cambia en todo el intervalo, entonces se requieren los términos adicionales de las series de Taylor para obtener una mejor aproximación. Por ejemplo, la *aproximación de primer orden* se obtiene sumando otro término al anterior al anterior para obtener:

$$Y(t_{j+1}) \cong Y(t_j) + Y'(t_j)(t_{j+1} - t_j) \quad (4)$$

El término adicional de primer orden consiste de una pendiente $Y'(t_j)$ multiplicada por la distancia entre t_j y t_{j+1} . Por lo tanto, la expresión ahora representa una línea recta y es capaz de predecir un incremento o un decremento de la función entre t_j y t_{j+1} .

² Rudolf LIPSCHITZ (1832 - 1903): Fue profesor en Bonn durante la mayor parte de su vida. Se le recuerda, primordialmente, por su papel en la simplificación y la aclaración de la teoría original de Cauchy sobre la existencia y la singularidad de las soluciones de ecuaciones diferenciales.

³ Brook TAYLOR (1685 - 1731): Matemático y físico británico, nacido en Edmonton. Amigo íntimo de Halley y de Newton, a quien defendió en la controversia sobre la prioridad de la invención del cálculo infinitesimal. Introdujo las series que llevan su nombre.

Aunque la ecuación anterior puede predecir un cambio, solo es exacta para una línea recta o es de tendencia lineal. Por lo tanto, se le agrega a la serie un término de segundo orden para obtener algo de curvatura, así la función pudiera exhibir la forma:

$$Y(t_{j+1}) \cong Y(t_j) + Y'(t_j)(t_{j+1} - t_j) + \frac{Y''(t_j)}{2!}(t_{j+1} - t_j)^2 \quad (5)$$

De manera similar, se puede agregar términos adicionales para desarrollar la expansión completa de la serie de Taylor.

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + Y'(t_j)(t_{j+1} - t_j) + \frac{Y''(t_j)}{2!}(t_{j+1} - t_j)^2 + \frac{Y'''(t_j)}{3!}(t_{j+1} - t_j)^3 + \dots + \frac{Y^{(n)}(t_j)}{n!}(t_{j+1} - t_j)^n + R_n \quad (6)$$

Obsérvese que debido a que la ecuación anterior es una *serie infinita*, el signo igual reemplaza a de aproximación usada en las ecuaciones anteriores a esta. Se incluye un término residual para considerar todos los términos desde $n+1$ hasta el infinito:

$$R_n = \frac{Y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(t_{j+1} - t_j)^{n+1} \quad (7)$$

donde el subíndice n indica que el residuo es de la aproximación a n ésimo orden y ξ es un valor cualquiera de x que se encuentra entre t_j y t_{j+1} . La inclusión de ξ dentro de la serie es de mucha importancia ya que da una estimación exacta del error.

Con frecuencia es conveniente simplificar la serie de Taylor definiendo un paso $h = t_{j+1} - t_j$.

Y expresando la ecuación:

$$Y(x_{i+1}) = Y(t_j) + Y'(t_j)h + \frac{Y''(t_j)}{2!}h^2 + \frac{Y'''(t_j)}{3!}h^3 + \dots + \frac{Y^{(n)}(t_j)}{n!}h^n + R_n \quad (8)$$

donde el termino residual es ahora :

$$R_n = \frac{Y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1} \quad (9)$$

Se puede apreciar un gráfico con la aproximación de $f(x)$ en x_{i+1} mediante series de expansión de Taylor de cero, primero y segundo ordenes:

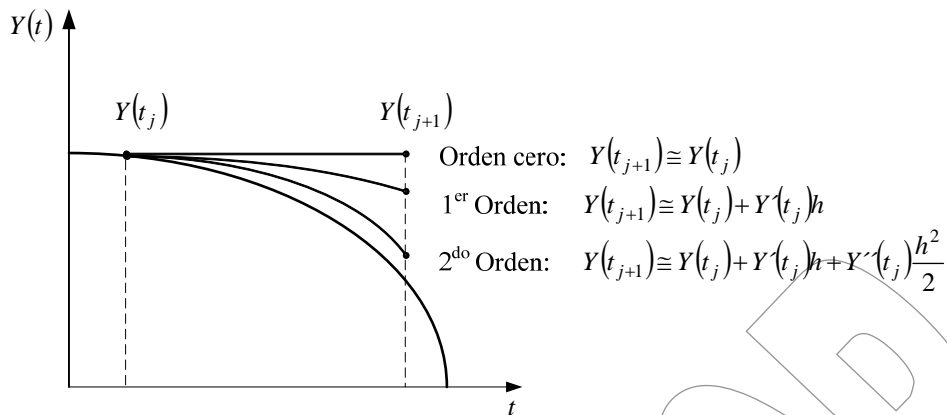


Figura 1. Representación de diferentes aproximaciones de la primera derivada

En general, la expansión en series de Taylor de n -ésimo orden debe ser exacta para un polinomio de n -ésimo orden. Para otras funciones continuas diferenciables, como las exponenciales o sinusoidales, no se obtiene una estimación exacta mediante un número finito de términos. Cada uno de los términos adicionales contribuye al mejoramiento de la aproximación, aunque sea un poco.

Aunque lo anterior se cumple, el valor práctico de las series de Taylor estriba, en la mayor parte de los casos, en el uso de un número finito de términos que darán una aproximación lo suficientemente cercana a la solución verdadera para propósitos prácticos. La decisión sobre cuantos términos se requieren para obtener un "aproximación razonable" se basa en el término residual de la expansión.

2.2.1. Método de Euler

El presente método, fue ideado por el gran matemático *Leonhard Gauss*⁴, hace más de doscientos años, este resulta ser el más fácil de entender y aplicar, y además es muy adecuado para la programación rápida, debido a su sencillez, claro está que no es tan preciso como otros métodos mas refinados (como Heun, Runge-Kutta de 4^{to} Orden, etc...)

Para explicar el Método de Euler se considera que $y(t)$ es la función desconocida (solución analítica) del problema \wp ; y que se desea estimar.

Se supone ahora que la meta de resolver el problema \wp , es determinar el valor numérico de $y(t)$ en el punto conocido $t = b$; con la condición inicial de \wp , dada en el punto $t_0 = a$. ($b > a$)

Denótese $Y(t)$, a la función aproximante de la solución analítica de la ecuación diferencial, $y(t)$. Un nuevo problema puede ser obtenido "discretizando" la variable independiente t , en una sucesión finita de puntos $\{t_j\}_0^n = t_0, t_1, t_2, \dots, t_n$.

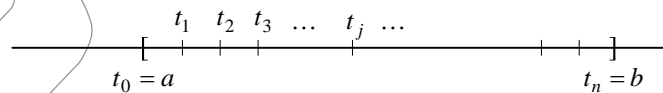


Figura 2. Representación grafica de la discretización del lapso de tiempo

⁴ Euler, Leonard (1707-1783): Leonhard Euler, nacido en Abr. 15, 1707, muerto en Sept. 18, 1783, fue el matemático más prolífico en la historia. Sus 866 libros y artículos representan aproximadamente una tercera parte del cuerpo entero de la investigación en la matemáticas, física teórica, y la ingeniería mecánica todo estos publicado entre 1726 y 1800.

Esta sucesión consta de “n” subintervalos $[t_j, t_{j+1}]$ cuya separación puede ser escrita como:

$$h_j = h(j) = t_{j+1} - t_j \tag{10}$$

Es importante mencionar que el considerar el paso variable (h_j); lejos de facilitar el problema a resolver, podría complicarlo. De modo que por simplicidad en este caso, se considera un paso constante h , e igual para cada subintervalo ($h_0 = h_1 = h_2 = \dots = h_n$).

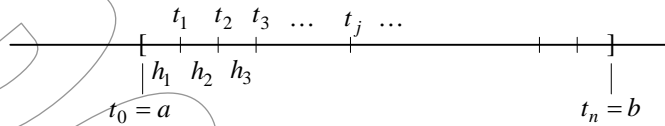


Figura 3. Representación grafica de la discretización del lapso de tiempo, mostrando el detalle del espaciado de los subintervalos

Considerando el espaciamiento homogéneo $h = h_0 = h_1 = h_2 = \dots = h_n$, los “n” subintervalos, donde se discretizó el problema, $t \in [a, b]$, queda definido por:

$$h = \frac{t_n - t_0}{n} \tag{11}$$

donde se considera que:

$$\begin{cases} t_0 = a \\ t_n = b \end{cases}$$

En base a lo antes expuesto, la sucesión de puntos discretos $\{t_j\}_0^n$, pueden ser generados fácilmente por la siguiente ecuación:

$$t_j = t_0 + hj \tag{12}$$

siendo $j = 0, 1, 2, 3, \dots, n$.

Existen muchos mecanismos para obtener el Método de Euler, esencialmente estas dependen de la forma de aproximar la derivada involucrada en la ecuación diferencial. Si se emplea el concepto de *cociente diferencial* para aproximar la derivada, entonces surge tres variantes del método: *diferencia hacia adelante*, *diferencia hacia atrás* y *diferencia central*.

2.2.2. Método de Euler Hacia Adelante

Pártase del más simple tipo de ecuación diferencial ordinaria, que la de tipo lineal de primer orden, el clásico *Problema de Cauchy* de la forma:

$$\wp \equiv \begin{cases} y'(t) = \frac{dy(t)}{dt} = F(t, y) \\ y(t = t_0) = y_0 \end{cases}$$

Considérese que el problema \wp ha sido discretizado sobre la variable t , donde se cumple:

$$t_j = t_0 + hj$$

donde

Solo para ser empleado con objetivo de evaluación, o académicos. Prohibido la reproducción total o parcial de este documento.

$$h = \frac{t_n - t_0}{n}$$

siendo: $t_0 = a$, $t_n = b$.

Denótese $Y(t)$, a la función aproximante de la solución analítica de la ecuación diferencial, $y(t)$. Supóngase que para un instante de tiempo dado t_{j+1} , se desea estimar un valor aproximado de la solución analítica de la ecuación diferencial $y(t_{j+1})$.

Para encontrar la función aproximante $Y(t_{j+1})$, tómesese el desarrollo en series de Taylor de la función $Y(t_{j+1})$ alrededor de $t = t_j$.

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + Y'(t_j)(t_{j+1} - t_j) + \frac{Y''(t_j)}{2!}(t_{j+1} - t_j)^2 + \dots + \frac{Y^{(n)}(t_j)}{n!}(t_{j+1} - t_j)^n + R_n \quad (13)$$

Supóngase que la serie se trunca en el segundo término:

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + Y'(t_j)(t_{j+1} - t_j) + R_1 \quad (14)$$

si se considera que:

$$h = t_{j+1} - t_j \quad (15)$$

entonces:

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + Y'(t_j)h + R_1 \quad (16)$$

donde el residuo producto del truncamiento queda dado por:

$$R_1 = \frac{Y''(\xi)}{2!}h^2 = O(h^2) \quad (17)$$

Ahora, si de la ecuación (16) se despeja la primera derivada $Y'(t_j)$:

$$\begin{aligned} Y(t_{j+1}) &= Y(t_j) + Y'(t_j)h + O(h^2) \\ Y(t_{j+1}) - Y(t_j) &= Y'(t_j)h + O(h^2) \\ \frac{Y(t_{j+1}) - Y(t_j)}{h} &= Y'(t_j) + O(h) \end{aligned} \quad (18)$$

Nótese, que la aproximación de la derivada por solo tomar los dos primeros términos de la serie de Taylor tiene un error por truncamiento $O(h)$, es decir, es proporcional al paso h .

$$O(h) = \frac{Y''(\xi)}{2!}h \quad (19)$$

Ahora bien, si se toma la versión discretizada del problema φ , se tiene:

$$\Leftrightarrow \begin{cases} Y'(t_j) = F(t_j, Y_j) \\ Y(t = t_0) = Y_0 \end{cases}$$

De tal modo que resulta evidente:

$$\frac{Y(t_{j+1}) - Y(t_j)}{h} = F(t_j, Y_j) + O(h) \tag{20}$$

Reacomodando:

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + hF(t_j, Y_j) + O(h^2) \tag{21}$$

Si por simplicidad se denota: $Y_{j+1} = Y(t_{j+1})$ y $F_j = F(t_j, Y_j)$, resulta:

$$Y_{j+1} = Y_j + hF_j + O(h^2) \tag{22}$$

donde:

$$Y_0 = y_0 \tag{23}$$

Es importante mencionar que el error final del método de Euler hacia delante cumple con $O(h^2)$, lo que indica que el error es función del cuadrado.

En definitiva, el método de Euler hacia delante, se basa en determinar aproximaciones sucesivas, punto a punto, mediante el siguiente juego de ecuaciones:

$$\begin{cases} Y_{j+1} = Y_j + hF_j \\ Y_0 = y_0 \end{cases} \tag{22}$$

donde el subíndice j varía entre 0 hasta $n-1$.

Aunque el Método de Euler hacia delante es muy sencillo, debe utilizarse cuidadosamente para evitar dos tipos de errores; el primer tipo lo forman los *errores de truncamiento*, el segundo tipo lo constituye la *inestabilidad*, que aparece cuando la constante de tiempo es negativa (la solución tiende a cero si no hay término fuente), a menos que el intervalo de tiempo, h , sea lo suficientemente pequeño.

Para longitudes de paso h , pequeños, el Método de Euler da resultados más precisos (suponiendo que no hay error de redondeo apreciable, lo que no es una suposición necesariamente cierta).

Es típico en el Método de Euler que la longitud de paso h necesita ser muy pequeña para tener un error de truncamiento razonablemente pequeño. Para evitar la aritmética y la evaluación de funciones que consumen mucho tiempo en un número grande de iteraciones, una computadora programable es una necesidad práctica. Una alternativa es utilizar mejores métodos que no requieran un paso h , tan pequeño. En cuyo caso se pueden obtener resultados precisos con la ayuda de una calculadora de mano.

2.2.3. Método de Euler Modificado

El *método de Euler modificado* tiene dos motivaciones. La primera es que es más preciso que el método de Euler por diferencias hacia delante o hacia atrás. La segunda es que este método es más estable que su homólogo hacia delante.

El método se obtiene de aplicar la regla del trapecio, para integrar $y' = F(y,t)$:

$$Y_{j+1} = Y_j + \frac{h}{2} [F(Y_{j+1}, t_{j+1}) + F(Y_j, t_j)] \quad (24)$$

Si la función F es lineal en Y , la ecuación anterior se puede resolver fácilmente en términos de Y_{j+1} .

Si la función no es lineal en Y , las ecuaciones una función no lineal de Y_{j+1} , por lo que se requiere un algoritmo para resolver ecuaciones no lineales. Uno de los métodos ampliamente utilizados para resolver ecuaciones no lineales es la sustitución sucesiva.

$$Y_{j+1}^{(k)} - Y_j^{(k)} = \frac{h}{2} [F(Y_{j+1}^{(k-1)}, t_{j+1}) + F(Y_j^{(k-1)}, t_j)] \quad (25)$$

Donde $Y_{j+1}^{(k)}$ es la k -ésima aproximación iterativa de y_{j+1} . Esta iteración se detiene si $\|Y_{j+1}^{(k)} - Y_{j+1}^{(k-1)}\| \leq \varepsilon$, es decir, si la diferencia en la aproximación entre dos iteraciones sucesivas es menor que una cierta tolerancia previamente establecida (ε).

En el caso que solo se utilice un paso más de iteración, el esquema se convierte en el método de Runge Kutta de segundo orden.

Para dar una explicación sobre la precisión del método de Euler modificado, solo se requiere mencionar que el error local (generado en cada paso) del método de Euler hacia delante es proporcional a h^2 , mientras que el error global es proporcional a h , en tanto que el error local del método de Euler modificado es proporcional a h^3 , y su error global es proporcional a h^2 . El orden del error del método hacia atrás es igual al del método de Euler hacia delante.

Al aplicar el método de Euler modificado a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, la ecuación debe resolverse en forma simultánea o implícita. Sin embargo, la ventaja de la solución implícita consiste en el hecho de que el método es más estable que el método de Euler hacia delante, por lo que permite un mayor intervalo de tiempo.

2.3 Método de Heun

El método de Euler posee un serio defecto en su aproximación para determinar la pendiente usando en cada paso de la iteración. El paso de iteración de t_j a t_{j+1} usa solo la pendiente en el punto t_j al final del intervalo. A menos que la función $Y(t)$ sea esencialmente una línea recta en el plano x - y , el uso de la pendiente evaluada solamente en un punto terminal del intervalo resulta en el uso de una pendiente que no necesariamente representa muy bien la pendiente promedio a lo largo del intervalo. Un esquema en el cual sea deseable hacer la modificación al método de Euler resulta de la forma:

$$Y_{j+1} = Y_j + \frac{h}{2} [F(t_j, Y_j) + F(t_{j+1}, Y_{j+1})] \quad (26)$$

En el cual se usa el promedio de la pendiente a lo largo del intervalo. Por supuesto la dificultad aquí es que debido a que no se conoce la función $Y(t)$, no se conoce el promedio de Y_{j+1} al final del intervalo, así que el esquema basado en la pendiente promedio sobre el intervalo no es directamente posible.

De hecho, una vía muy usada de ver la dependencia de la solución $Y(t_{j+1})$ en el valor de $Y(t)$ sobre el intervalo $[t_j, t_{j+1}]$ viene de escribir la forma integral de la antiderivada:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} Y'(t) dt = Y(t_{j+1}) - Y(t_j) \tag{27}$$

De modo que reorganizando la expresión resulta:

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + \int_{t_j}^{t_{j+1}} F(t, Y(t)) dt \tag{28}$$

Donde se ha usado la ecuación diferencial $Y'(t) = F(t, Y)$. Se puede escribir de la siguiente forma:

$$Y(t_{j+1}) = Y(t_j) + h \langle F(t, Y) \rangle_{[t_j, t_{j+1}]} \tag{29}$$

Donde $\langle F(t, Y) \rangle_{[t_j, t_{j+1}]}$, es solo el valor medio de $F(t, Y)$ en el intervalo. Esto resulta hacer más fácil el intento de modificar el método de Euler razonablemente, pero también hace muy claro la necesidad de obtener más información acerca de $Y(t)$, en el intervalo para calcular $Y(t)$ al final del intervalo.

El *método de Heun*⁵ está basado en la evaluación de una estimación $F(t_{j+1}, Y_{j+1})$, reemplazando el valor de Y_{j+1} con una estimación de la derivada del método original de Euler, con lo que resulta el siguiente esquema de iteración:

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{j+1} &= Y_j + hF(t_j, Y_j) \\ Y_{j+1} &= Y_j + \frac{h}{2} [F(t_j, Y_j) + F(t_{j+1}, \tilde{Y}_{j+1})] \end{aligned} \tag{30}$$

El *paso predictor* obtiene una estimación preliminar, \tilde{Y}_{j+1} , para $Y(t_{j+1})$ basado en el método de Euler simple, y entonces el *paso corrector* usa ese valor en lugar del valor actual de $Y(t_{j+1})$ para obtener una mejor estimación de la pendiente en el extremo final del intervalo. En la evaluación del valor medio de la pendiente sobre el intervalo, el uso del promedio basado en los valores de los dos puntos terminales es equivalente al uso de la regla de integración trapezoidal, de tal modo que el error de este valor promedio se simplifica debido a que la integración involucrada en el proceso de promedio es del orden de h^3 . Debido al uso del paso de tamaño h , sobre el mismo intervalo en t , requiere un número de pasos que es proporcional a $1/h$, el error global en este caso será del orden de h^2 ; de modo que dividiendo h debe lograrse aumentar la precisión global en un factor de cerca de 4.

Esta variación significativa en el nombre aplicado a varias modificaciones del Método de Euler. Algunos textos refieren el método de Heun como simplemente el método de Euler Modificado, mientras que otros utilizan el término de Método de Punto Medio (*midpoint method*) donde la pendiente es usada en cada paso en el cálculo de la pendiente desde el predictor del paso al punto medio del intervalo; mas que el promedio basado en el punto medio de la pendiente.

2.3.1. Métodos de Runge-Kutta

La convergencia lenta del método de Euler y lo restringido de su región de estabilidad absoluta lleva a considerar métodos de orden de convergencia mayor. Se conoce que en cada paso el método de Euler se mueve a lo largo de la tangente de una cierta curva que está "cerca" a la curva desconocida o buscada. Los métodos Runge-Kutta extienden esta idea geométrica al utilizar varias derivadas o tangentes intermedias, en

⁵ Karl Heun (1859 - 1929): Contemporáneo de Carl Runge y de R. Kutta. Contribuyó a la mecánica clásica, a la teoría de funciones espaciales y a los métodos de cuadratura de Gauss.

lugar de solo una, para aproximar la función desconocida. Los métodos Runge-Kutta⁶, más simples se obtienen usando dos de estas derivadas intermedias.

De modo que una mejora es que para cada intervalo h , se toman varios puntos intermedios y se calculan en ellos las pendientes o derivadas. Se gana en precisión a cambio de un aumento notable del tiempo de cálculo.

El uso de las series de Taylor como elementos de aproximación posee ciertas características deseables, particularmente su habilidad de mantener pequeño el error, pero esto implica una fuerte desventaja, como lo es requerir de la evolución de las derivadas de orden superior de la función $F(t,y)$. En el método de las series de Taylor, cada una de estas derivadas de orden superior son evaluadas en el punto t_j , al comienzo del intervalo, en atención a evaluar $Y(t_{j+1})$ al final del intervalo. Se sabe que el método de Euler puede ser mejorado por el cálculo de la función $F(t,y)$ a un punto predictor lejos al final del paso en t .

La aproximación de Runge-Kutta, apunta a las características deseables del método de la serie de Taylor, pero reemplaza los requerimientos de evaluación de las derivadas de orden superior con el requerimiento de evaluar $F(t,y)$ en los mismos puntos dentro del intervalo t_j a t_{j+1} . Debido a que inicialmente no es conocido a que puntos del intervalos las evaluaciones deben ser hechas, es posible elegir esos puntos en tal forma que el resultado sea consistente con la solución de la serie de Taylor para algunos en particular, los cuales darán el nombre al orden del método de Runge-Kutta.

Inicialmente, pártase de la derivación del hacia adelante, el cual no es particularmente útil en la practica, es muy interesante para entender los métodos de Runge-Kutta. Pártase de escribir la serie de Taylor de la solución $Y(t)$ en la forma:

$$Y(t+h) = Y(t) + hF(t,Y) + \frac{h^2}{2} Y'(t) + O(h^3) \quad (31)$$

Se ha tomado la ecuación diferencial $Y'(t) = F(t,y)$ para evaluar $Y'(t)$, pero esta se mantiene para evaluar $Y''(t)$. Usando el resultado inicial de la diferenciación de la función como $F(t,y(t))$, se tiene:

$$Y''(t) = F_t(t,Y) + F_y(t,Y)Y'(t) \quad (32)$$

Donde los subíndices t indica diferenciación parcial respecto a t , manteniendo y constante; y en forma similar para el subíndice y . Debido a que $Y'(t) = F(t,y)$, se puede escribir lo siguiente:

$$Y''(t) = F_t(t,Y) + F_y(t,Y)F(t,Y) \quad (33)$$

Y el desarrollo en series de Taylor se transforma en:

$$Y(t+h) = Y(t) + hF(t,Y) + \frac{h^2}{2} [F_t(t,Y) + F_y(t,Y)F(t,Y)] + O(h^3) \quad (34)$$

El método de Runge-Kutta asume que el valor correcto de la pendiente sobre el intervalo puede ser escrito como una combinación lineal de la función $F(t,Y)$ evaluado a ciertos puntos dentro del intervalo.

En el método de segundo orden, esto resulta en escribir el paso de iteración en la forma:

⁶ Martin Wilhelm Kutta: Nació el 3 Nov de 1867 en Pitschen, Upper Silesia (ahora Byczyna, Polonia) y murió el 25 Diciembre de 1944 en Fürstfeldbruck, Alemania. Es muy conocido pro el método que junto a Runge, inventaron para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. Carle David Tolmé Runge: nació el 30 agosto de 1856 in Bremen, Alemania y murió el 3 de enero de 1927 en Göttingen, Alemania

$$Y(t+h) = Y(t) + AhF_0 + BhF_1 \tag{35}$$

donde:

$$\begin{aligned} F_0 &= F(t, Y) \\ F_1 &= F(t + Ph, Y + QhF_0) \end{aligned} \tag{36}$$

Las constantes, A , B , P y Q son quienes deben ser determinadas; y las cuales harán la comparación de la ecuación de Runge-Kutta de Segundo Orden y las series de Taylor dada antes. Mientras que F_0 envuelve solo la información ya disponible a la posición inicial (t, Y) , F_1 debe ser evaluada por el desarrollo de Taylor de la expansión de $F(t, Y)$, alrededor del punto t . Debido a que $F(t, Y)$ es una función tanto de t como de y , el desarrollo en series de Taylor de $F(t, Y)$ puede ser escrito como

$$F_1 = F(t, Y) + F_t(t, Y)Ph + F_y(t, Y)QhF_0 + O(h^2) \tag{37}$$

Esto puede ser entonces usado en la formula de Runge-Kutta por $Y(t+h)$ para obtener:

$$F(t+h) = Y(t) + (A+B)hF(t, Y) + Bh^2PF_t(t, Y) + Bh^2QF_y(t, Y)F(t, Y) + O(h^3) \tag{38}$$

En comparación directa de este con la serie de Taylor de $Y(t)$, se conoce:

$$\begin{aligned} A + B &= 1 \\ BP &= \frac{1}{2} \\ BQ &= \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{39}$$

Entonces hay tres condiciones en las cuatros constantes tales que directamente la serie Taylor y la formula de Runge-Kutta concuerden con el segundo orden de h .

Hay un número interesante de elecciones pueden ser hechas, debido a que se tiene solo tres condiciones para las constantes A , B , P y Q . Si se selecciona $A = 1/2$, se obtiene $B = 1/2$ y $P = Q = 1$, lo cual deriva en la ecuación de Runge-Kutta:

$$Y(t+k) = Y(t) + \frac{1}{2} [F(t, Y) + F(t+h, hF(t, Y))] \tag{40}$$

Lo cual es solo el método de Heun encontrado fácilmente.

La elección de $A = 0$, hace que $B = 1$, y $P = Q = 1/2$, entonces la formula de Runge-Kutta toma la forma de:

$$Y(t+k) = Y(t) + hF\left(t + \frac{h}{2}, Y + \frac{h}{2}F(t, Y)\right) \tag{41}$$

El cual es un nuevo método relacionado al método de Euler, algunas veces llamada *Método de Punto Medio* por razones obvias.

2.4 Método de Runge Kutta de Cuarto Orden

El esquema de Runge-Kutta de segundo orden ha ilustrado la derivación de un simple, y lo ha relacionado con los esquemas de integración. Los esquemas de más alto orden de Runge-Kutta son más prácticos para usarse debido a su más alta precisión, y la derivación de sus constantes son similar, pero más complicado. Si se considera el esquema de Runge-Kutta de cuarto orden, que puede ser escrito de la siguiente forma:

Solo para ser empleado con objetivo de evaluación, o académicos. Prohibido la reproducción total o parcial de este documento.

$$Y_{j+1} = Y_j + w_1 K_1 + w_2 K_2 + w_3 K_3 + w_4 K_4 \quad (42)$$

donde las $w_1, w_2, w_3,$ y $w_4,$ son los *pesos*, y $K_1, K_2, K_3,$ y $K_4,$ son h veces las aproximaciones de la pendientes a los puntos del intervalo y vienen dados por:

$$\begin{aligned} K_1 &= hF(t_j, Y_j) \\ K_2 &= hF\left(t_j + a_1 h, Y_j + b_1 K_1\right) \\ K_3 &= hF\left(t_j + a_2 h, Y_j + b_2 K_1 + b_3 K_2\right) \\ K_4 &= hF\left(t_j + a_3 h, Y_j + b_4 K_1 + b_5 K_2 + b_6 K_3\right) \end{aligned} \quad (43)$$

Donde las a_1, \dots y las b_1, \dots son constantes que hay que ser determinadas. Usando técnicas similares a las usadas en el método de Runge-Kutta de Segundo Orden, pero trabajando en cuarto orden $h,$ se puede mostrar que hay 11 ecuaciones h a ser satisfechas por 13 constantes.

La elección mas frecuentemente usada de las constantes para obtener el esquema es:

$$Y_{j+1} = Y_j + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (44)$$

donde:

$$\begin{aligned} K_1 &= hF(t_j, Y_j) \\ K_2 &= hF\left(t_j + \frac{h}{2}, Y_j + \frac{h}{2} K_1\right) \\ K_3 &= hF\left(t_j + \frac{h}{2}, Y_j + \frac{h}{2} K_2\right) \\ K_4 &= hF(t_j + h, Y_j + K_3) \end{aligned} \quad (45)$$

La pendiente efectiva usada es la media de los pesos de la pendiente de cuatro diferentes puntos en el intervalo, con el valor de Y usado a puntos sucesivamente de dos aproximaciones de medio punto. Los pesos son $\left\{\frac{1}{6}, \frac{2}{6}, \frac{2}{6}, \frac{1}{6}\right\}$ tales que los valores de los dos puntos intermedios contribuyen dominantemente al valor de la pendiente efectiva.

Formalmente la solución de la ecuación diferencial $y' = F(t, y),$ puede ser escrita en términos de la integral como:

$$y(t_1) = y(t_0) + \int_{t_0}^{t_1} F(t, y(t)) dt \quad (46)$$

La integral puede ser aproximada por la Regla de 1/3 de Simpson, usando dos intervalos, cada uno de longitud $h/2,$ entonces:

$$\int_{t_0}^{t_1} F(t, y(t)) dt \approx \frac{h}{6}(F(t_0, y(t_0)) + 4F(t_{mid}, y_{mid}) + F(t_1, y(t_1))) \quad (47)$$

Se puede elegir $F(t_0, y(t_0))$ para ser K_1 , y $F(t_1, y(t_1))$ para ser K_4 , mientras que $F(t_{mid}, y(t_{mid}))$ puede ser el promedio de K_2 y K_3 . Con esas identificaciones, se puede entender que la formula de Runge-Kutta puede ser obtenido aproximadamente como resultado de la integración por la *regla de Simpson*.

Una versión del meto de Runge-Kutta de cuarto orden puede ser derivada, empleando la regla de 3/8 de Simpson, y se expresa como:

$$\begin{aligned} K_1 &= hF(t_j, Y_j) \\ K_2 &= hF\left(t_j + \frac{h}{3}, Y_j + \frac{1}{3}K_1\right) \end{aligned} \tag{40}$$

$$K_3 = hF\left(t_j + \frac{2h}{3}, Y_j + \frac{1}{3}K_1 + \frac{2}{3}K_2\right)$$

$$K_4 = hF(t_j + h, Y_j + K_1 + K_2 + K_3)$$

$$Y_{j+1} = Y_j + \frac{1}{8}(K_1 + 3K_2 + 3K_3 + 4K_4) \tag{41}$$

Un aspecto importante que se ha de considerar es la *estabilidad del procedimiento numérico*. La inestabilidad surge cuando cualquier error que se haya producido (por ejemplo debido a redondeo), produce una solución no deseada de la ecuación diferencial; la cual entonces crece más rápidamente que la solución requerida, rebasándola eventualmente.

Los método de Runge-Kutta están sujetos a dos tipos de errores: el error de truncamiento y el de estabilidad. El error de truncamiento se debe a la discrepancia entre el desarrollo de Taylor del método numérico y la solución exacta. El tamaño del error decrece al aumentar el orden del método. Por otro lado, la inestabilidad es un efecto acumulado del error local, de forma que el error de la solución crece sin limite al avanzar los intervalos de tiempo.

2.5 RESUMEN DE MÉTODOS NUMÉRICOS PARA EDO 1^{ER} ORDEN

Para emprender la solución del problema de Cauchy:

$$\varphi \equiv \begin{cases} y'(t) = \frac{dy(t)}{dt} = F(t, y) & \text{con } t \in [a, b] \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

Tómese:

$$h = \frac{t_n - t_0}{n}$$

$$t_j = t_0 + hj$$

donde: $t_0 = a, t_n = b$ y $j = 1, 2, 3, \dots, n$

Método de Euler Simple, hacia Adelante:

$$\begin{cases} Y_{j+1} = Y_j + hF \\ Y_0 = y_0 \end{cases} \tag{22}$$

$$\tag{23}$$

Método de Euler Modificado o de Heun:

$$\begin{cases} \tilde{Y}_{j+1} = Y_j + hF(t_j, Y_j) \\ Y_{j+1} = Y_j + \frac{h}{2} [F(t_j, Y_j) + F(t_{j+1}, \tilde{Y}_{j+1})] \\ Y_0 = y_0 \end{cases} \tag{30}$$

Método de Runge-Kutta 2^{do} Orden:

$$\begin{cases} K_1 = hF(t_j, Y_j) \\ K_2 = hF(t_j, Y_j + K_1) \\ Y_{j+1} = Y_j + \frac{1}{2}[K_1 + K_2] \end{cases} \quad (41)$$

Método de Runge-Kutta de 3^{er} Orden:

$$\begin{cases} K_1 = hF(t_j, Y_j) \\ K_2 = hF\left(t_j + \frac{h}{2}, Y_j + \frac{K_1}{2}\right) \\ K_3 = hF(t_j + h, Y_j - K_1 + 2K_2) \\ Y_{j+1} = Y_j + \frac{1}{6}[K_1 + 4K_2 + K_3] \end{cases}$$

Método de Runge-Kutta de 4^{er} Orden:

Regla 1/3 Simpson:

$$\begin{cases} K_1 = hF(t_j, Y_j) \\ K_2 = hF\left(t_j + \frac{h}{2}, Y_j + \frac{h}{2}K_1\right) \\ K_3 = hF\left(t_j + \frac{h}{2}, Y_j + \frac{h}{2}K_2\right) \\ K_4 = hF(t_j + h, Y_j + K_3) \end{cases} \quad (45)$$

$$Y_{j+1} = Y_j + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (44)$$

Regla 3/8 Simpson:

$$\begin{cases} K_1 = hF(t_j, Y_j) \\ K_2 = hF\left(t_j + \frac{h}{3}, Y_j + \frac{1}{3}K_1\right) \\ K_3 = hF\left(t_j + \frac{2h}{3}, Y_j + \frac{1}{3}K_1 + \frac{1}{3}K_2\right) \\ K_4 = hF(t_j + h, Y_j + K_1 + K_2 + K_3) \end{cases} \quad (40)$$

$$Y_{j+1} = Y_j + \frac{1}{8}(K_1 + 3K_2 + 3K_3 + 4K_4) \quad (41)$$

2.6 Ecuaciones Diferenciales Ordinarias de Orden Superior

Los métodos numéricos estudiados hasta los momentos: Euler, Heun, Runge-Kutta, etc. Son propicios para emprender la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden. Pero estos métodos pueden ser elevados para trabajar con ecuaciones diferenciales de más alto grado; esto es posible escribiendo la expresión explícita de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden con un conjunto completo de condiciones iniciales.

Considere la siguiente ecuación:

$$\frac{d^n y}{dt^n} = F\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2 y}{dt^2}, \dots, \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}}\right) \quad (42)$$

Donde en $t = t_0$, donde son conocidos los valores de $y, dy/dt, d^2 y/dt^2, \dots, dy^n/dt^n$.

Ahora bien, si se procede a realizar un cambio de variable haciendo:

$$\begin{cases} x_0 = y \\ x_1 = \frac{dy}{dt} \\ x_2 = \frac{d^2 y}{dt^2} \\ \vdots \\ x_{n-1} = \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} \end{cases} \quad (43)$$

Entonces se puede expresar el siguiente esto como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales de primer orden.

$$\begin{cases} \dot{x}_0 = x_1 \\ \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = x_3 \\ \vdots \\ \dot{x}_{n-2} = x_{n-1} \\ \dot{x}_{n-1} = F(t, x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-2}) \end{cases} \quad (44)$$

Este cambio de variables permite partir de una ecuación diferencial ordinaria de orden n , en un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden.

En notación vectorial se puede describir este problema en una forma más sencilla. Sea:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \frac{dy}{dt} \\ \frac{d^2 y}{dt^2} \\ \vdots \\ \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} \end{bmatrix} \quad (43)$$

entonces:

$$\mathbf{Y}' = \begin{bmatrix} Y_0' \\ Y_1' \\ Y_2' \\ \vdots \\ Y_{n-2}' \\ Y_{n-1}' \end{bmatrix} = \mathbf{F}(t, \mathbf{Y}) \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \vdots \\ Y_{n-1} \\ F(t, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n-1}) \end{bmatrix} \quad (44)$$

Solo para ser empleado con objetivo de evaluación, o académicos. Prohibido la reproducción total o parcial de este documento.

Bajo el esquema anterior, el problema de una ecuación diferencial de orden superior puede ser reducido a un problema de Cauchy en forma vectorial:

$$\underline{Q} \equiv \begin{cases} \mathbf{Y}'(t) = \mathbf{F}(t, \mathbf{Y}) \\ \mathbf{Y}(t = t_0) = \mathbf{Y}_0 \end{cases} \text{ con } t \in [a, b]$$

donde:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_{n-1} \end{bmatrix} \quad (43)$$

El problema \underline{Q} , puede ser atacada con cualquiera de los métodos numéricos ya antes mencionados.

2.7 Referencias de Consulta

Charles C. Dyer and Peter S. S (2000). An Elementary Introduction to Scientific Computing¹. University of Toronto at Scarborough. Division of Physical Sciences.

http://pathfinder.scar.utoronto.ca/~dyer/csca57/book_P/book.html