

# Capítulo 8

## Ecuaciones diferenciales ordinarias

### 8.1. Introducción

Una ecuación diferencial ordinaria de orden  $n$  de una función  $y(x)$  es una ecuación de la forma

$$F(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n)}) = 0$$

donde  $F$  es una función de la que se requiere que sea continua y derivable. En general, se despeja la derivada de orden más alto y se expresa de la forma

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad (8.1)$$

El problema puede ser extremadamente complejo en el caso general. En lo que sigue, vamos a considerar esencialmente ecuaciones diferenciales de primer orden

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

y sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. Aunque parezca un problema excesivamente restringido, es suficientemente general para resolver la mayor parte de los problemas que se presentan en el ámbito científico y técnico. De hecho, cualquier ecuación diferencial de orden  $n$ , expresada en la forma de la Ec. 8.1, se puede reducir a un sistema de  $n$  ecuaciones diferenciales de primer orden. Para ello, hacemos el siguiente cambio de variables:

$$y_1 = y, \quad y_2 = y', \quad \dots, \quad y_n = y^{(n-1)}$$

con lo que obtenemos el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_1(x)}{dx} &= y_2(x) \\
 \frac{dy_2(x)}{dx} &= y_3(x) \\
 \frac{dy_3(x)}{dx} &= y_4(x) \\
 &\vdots \\
 \frac{dy_n(x)}{dx} &= f(x, y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x))
 \end{aligned}
 \tag{8.2}$$

Utilizaremos este procedimiento para resolver las ecuaciones diferenciales de segundo orden que aparecen usualmente en los problemas dinámicos de la Física.

En este capítulo vamos a considerar únicamente problemas en los que se especifican condiciones de contorno iniciales, es decir, damos un punto inicial  $x_0$  y los valores de la función  $y(x)$  y sus  $n - 1$  primeras derivadas en dicho punto, que denotamos por  $y_0, y'_0, \dots, y_0^{(n-1)}$ , y deseamos obtener  $y(x)$  a partir de  $x_0$ , sea en sentido positivo o negativo. Obtendremos la solución  $y$  y sus derivadas en una red de  $N$  puntos,  $y_k = y_0 + k * h$ ,  $k=0, 1, \dots, N$ , donde  $h$  es el paso de integración que se elige de acuerdo con la precisión requerida. Para un determinado método de integración, la precisión aumenta cuando  $h$  disminuye. En general, desearemos obtener la solución  $y(x)$  en un intervalo  $[x_0, x_f]$ , y la precisión requerida determinará el paso de integración  $h$ , con lo que el número de puntos de la red vendrá dado por  $N = \frac{x_f - x_0}{h}$ . Vamos a considerar en lo que sigue la solución de una ecuación diferencial de primer orden,

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

y discutiremos algunos ejemplos en los que se resuelven ecuaciones de orden superior reduciéndolas a sistemas de primer orden.

## 8.2. Métodos de un paso

Los denominados métodos de un paso proporcionan  $y_{n+1}$  a partir de  $y_n$  y  $x_n$ . En otras palabras, proporcionan una función  $G$  de forma que

$$y_{n+1} = G(x_n, y_n)$$

Existen diversas maneras de construir métodos de un paso. El más pedagógico, aunque no el más utilizado en la práctica, es el método de la serie de Taylor.

### 8.2.1. Método de la serie de Taylor

Si tenemos la ecuación diferencial

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

podemos expresar  $y(x_n + h)$  en función de  $y(x_n)$  mediante la serie de Taylor,

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \cdots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(x_n) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}y^{(n+1)}(\xi)$$

Los  $n$  primeros términos proporcionan un método de un paso con un error de truncado de orden  $h^{n+1}$ . Para poderlo utilizar de forma efectiva necesitamos evaluar las derivadas que aparecen en la expresión. Utilizando la regla de la cadena, obtenemos

$$y''(x) = f'(x, y(x)) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) \cdot y'(x) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) \cdot f(x, y(x))$$

Si denominamos  $f^{(1)}(x, y(x))$  a  $y''(x)$ , obtenemos análogamente

$$y'''(x) = f_x^{(1)}(x, y(x)) + f_y^{(1)}(x, y(x)) \cdot f(x)$$

Podemos de igual forma denominar  $f^{(2)}(x, y(x))$  a  $y'''(x)$  y calcular  $y^{(4)}(x)$  como

$$y^{(4)}(x) = f_x^{(2)}(x, y(x)) + f_y^{(2)}(x, y(x)) \cdot f(x)$$

con lo que obtendremos en general

$$f^{(k-1)}(x, y(x)) = f_x^{(k-2)}(x, y(x)) + f_y^{(k-2)}(x, y(x)) \cdot f(x)$$

$$y^{(k)}(x) = f^{(k-1)}(x, y(x))$$

Con estas definiciones obtenemos para la serie de Taylor la siguiente expresión:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}f^{(1)}(x_n, y_n) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n-1)}(x_n, y_n) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n)}(\xi, \eta)$$

Reteniendo los  $n+1$  primeros términos de la serie de Taylor obtenemos un método de un paso de orden  $n$ , es decir obtenemos  $y(x_n + h)$  a partir de  $y(x_n)$  con un error de truncado que depende de  $h^{n+1}$  y potencias superiores de  $h$ . El caso más sencillo es cuando nos quedamos con únicamente los dos primeros términos:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n)$$

Este método es el más sencillo imaginable y se le conoce como método de Euler. En general es un método muy impreciso, pero si se utiliza un paso de integración suficientemente pequeño da la solución de la ecuación diferencial con la precisión deseada. Si el paso de integración es demasiado grande, el método es inestable y la solución numérica diverge de la exacta. Lo

utilizaremos para comparar con métodos de orden superior en algunos de los ejemplos ofrecidos posteriormente. Si retenemos dos términos, obtenemos

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n) + \frac{h^2}{2!}(f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) \cdot f(x)) \quad (8.3)$$

que es un método de segundo orden, que proporciona resultados mucho mejores que el método de Euler. Su principal inconveniente es tener que calcular analíticamente las derivadas parciales  $f_x(x, y(x))$  y  $f_y(x, y(x))$ , lo cual es un inconveniente si  $f(x)$  es muy complicada y además produce errores significativos si  $f(x)$  se conoce sólo de forma empírica, es decir, es una aproximación numérica a datos experimentales o una aproximación a una función mucho más complicada. Estos inconvenientes resultan mucho más importantes cuando derivamos métodos de orden superior a partir de la serie de Taylor. En general, aunque el método de la serie de Taylor tiene un gran valor pedagógico y es útil en la derivación de otros métodos, es raramente una buena elección en la solución de un problema numérico. Sin embargo, cuando el cálculo de las derivadas es sencillo, como en el ejemplo dado a continuación, el método de serie de Taylor es un método estable y eficiente.

### Ejemplo 1

Resolver la ecuación diferencial  $y' = y$  en orden  $k$  mediante el método de serie de Taylor.

Solución:  $f(x, y) = y$ ,  $f^{(1)}(x, y) = y$ ,  $f^{(2)}(x, y) = y$ ,  $\dots$ ,  $f^{(k)}(x, y) = y$ . Si truncamos la serie de Taylor en orden  $k$  tenemos

$$y(x+h) = y \left( 1 + h + \frac{h^2}{2!} + \frac{h^3}{3!} + \dots + \frac{h^k}{k!} \right)$$

con lo que la integración en  $n$  pasos da

$$y_n = y_0 \left( 1 + h + \frac{h^2}{2!} + \frac{h^3}{3!} + \dots + \frac{h^k}{k!} \right)^n$$

que es una aproximación de orden  $k$  a  $y_n = y_0 e^{nh}$  que es la solución exacta.

### 8.2.2. Métodos de Runge-Kutta

Estos métodos evitan el cálculo de las derivadas haciendo la siguiente suposición:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^m \alpha_i k_i \quad (8.4)$$

con  $k_1 = f(x_n, y_n)$ ,  $k_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + \mu_i h k_{i-1})$  y los  $\alpha_i$ ,  $\mu_i$  son constantes que se determinan de forma que la anterior expresión coincida con la serie de Taylor hasta el orden  $p$ . Hasta  $p = 4$ , se puede tomar  $m = p$  pero para  $p > 4$  es necesario que  $m > p$ . En cierta manera se puede considerar

que los métodos de Runge-Kutta aproximan las derivadas de la serie de Taylor por combinaciones lineales de valores de la función  $f$  en puntos comprendidos entre  $(x_n, y_n)$  y  $(x_{n+1}, y_{n+1})$ . La principal desventaja de estos métodos es que se debe calcular la función  $f$  en puntos que no pertenecen a la red de integración  $(x_n, y_n)$ . Por otro lado son muchas sus ventajas, entre las que cabe mencionar la posibilidad de cambiar el paso de integración en un momento dado, la estabilidad, la facilidad de programación, y la posibilidad de estimar los errores de truncado en los métodos de Runge-Kutta más sofisticados.

Vamos a considerar en primer lugar los métodos de Runge-Kutta de orden 2, que aunque se utilizan con menos frecuencia que los métodos de orden 4, su exposición es muy pedagógica. Tomamos  $m = 2$ , que es el mínimo valor que hace falta para que las derivadas coincidan con la serie de Taylor hasta segundo orden. La forma del método de segundo orden es por lo tanto:

$$y_{n+1} = y_n + h\alpha_1 f(x_n, y_n) + h\alpha_2 f(x_n + \lambda_2 h, y_n + \mu_2 f(x_n, y_n)h)$$

Desarrollando en serie de Taylor la anterior expresión hasta orden  $h^2$  obtenemos,

$$y_{n+1} = y_n + h\alpha_1 f(x_n, y_n) + h\alpha_2 [f(x_n, y_n) + f_x(x_n, y_n)\lambda_2 h + f_y(x_n, y_n)f(x_n, y_n)\mu_2 h]$$

con lo que, para que la anterior ecuación coincida con la serie de Taylor hasta segundo orden

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}(f_x(x_n, y(x_n)) + f_y(x_n, y(x_n)) \cdot f(x_n))$$

deben de cumplirse las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}\alpha_1 + \alpha_2 &= 1 \\ \alpha_2 \lambda_2 &= \frac{1}{2} \\ \alpha_2 \mu_2 &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Estas ecuaciones tienen una infinidad de soluciones, que corresponden a todo el plano  $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ . Una vez fijados  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ ,  $\mu_1, \mu_2$  quedan determinados de forma única. Si tomamos  $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = 1$ , obtenemos  $\lambda_2 = \mu_2 = \frac{1}{2}$ , y la regla de integración resultante

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hf(x_n, y_n)) \quad (8.5)$$

se conoce como método del punto medio. Equivale a tomar la derivada numérica de  $y$  mediante la regla de tres puntos o a realizar la integral de  $y'(x)$  mediante la regla del punto medio, calculando el valor de  $y(x_n + h/2)$  por el método de Euler. Cuando el método del punto medio se utiliza de forma que las funciones se calculen sólo en la malla de integración, el método se convierte en un método de dos pasos, que satisface la relación de recurrencia

$$y_{n+1} = y_{n-1} + hf(x_n, y_n) \quad (8.6)$$

Como  $y_1$  no está definido mediante esta relación de recurrencia y el valor inicial  $y_0$ , se utiliza el método de Euler para determinarlo

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

Esta última versión del método del punto medio, conocida también como método de Euler modificado, es ligeramente más precisa para un valor de  $h$  que el método del punto medio con  $2h$  (que equivale al mismo esfuerzo de cálculo) ya que los valores intermedios se calculan mediante la relación de recurrencia de segundo orden en vez de por el método de Euler. Sin embargo es un método inestable para determinadas ecuaciones.

Si tomamos  $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}$ , obtenemos la siguiente regla de integración

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))) \quad (8.7)$$

que usualmente se denomina método de Runge-Kutta de orden 2. Equivale a utilizar la regla trapezoidal para integrar  $y'(x)$ .

Entre los métodos de Runge Kutta, el más popular es sin duda el método de Runge-Kutta de orden 4, en el que se toman  $m = p = 4$ . Es decir, suponemos una regla de integración de la forma

$$y_{n+1} = y_n + h(\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \alpha_3 k_3 + \alpha_4 k_4)$$

con  $k_1 = f(x_n, y_n)$ ,  $k_i = f(x_n + \lambda_i h, y_n + \mu_i k_{i-1} h)$ . Las constantes  $\alpha_i$ ,  $\lambda_i$ ,  $\mu_i$  se determinan de forma que la anterior expresión coincida con la serie de Taylor en orden  $h^4$ . Para ello, desarrollamos las funciones  $k_i$  en orden  $h^3$  y reagrupamos potencias de  $h$ .

En lo que sigue suprimimos los argumentos de las funciones, por claridad de notación. Tomamos una solución que satisfaga  $\lambda_i = \mu_i$ , lo cual veremos a posteriori que es posible. Dada la simetría en las derivadas con respecto a  $x$  y  $y$ , definimos los siguientes operadores diferenciales

$$\begin{aligned} Df &= f_x + f f_y \\ D^2 f &= f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f_{yy} \\ D^3 f &= f_{xxx} + 3f f_{xxy} + 3f^2 f_{xyy} + f^3 f_{yyy} \end{aligned}$$

que permiten una notación más compacta. Podemos simplificar los desarrollos de los  $k_i$ , poniendo los argumentos  $k_{i-1} = (k_{i-1} - f) + f$ , con lo cual cada  $k_i$  tiene un desarrollo similar a  $k_2$  más una parte adicional debida al desarrollo de  $k_{i-1} - f$  en hasta tercer orden de potencias de  $h$  (dependiendo de la potencia de  $h$  del término donde aparezcan)

$$\begin{aligned}
k_1 &= f \\
k_2 &= f + \lambda_2 h Df + \frac{h^2}{2} \lambda_2^2 D^2 f + \frac{h^3}{6} \lambda_2^3 D^3 f \\
k_3 &= f + \lambda_3 h Df + \lambda_3 h (k_2 - f) f_y + \frac{h^2}{2} \lambda_3^2 D^2 f + \frac{h^2}{2} [2\lambda_3^2 f_{xy} (k_2 - f) + \lambda_3^2 f_{yy} (k_2^2 - f^2)] + \frac{h^3}{6} \lambda_3^3 D^3 f \\
&= f + \lambda_3 h Df + \lambda_3 h f_y (h \lambda_2 Df + \frac{h^2}{2} \lambda_2^2 D^2 f) + \frac{h^2}{2} [\lambda_3^2 D^2 f + 2\lambda_3^2 f_{xy} \lambda_2 h Df + \lambda_3^2 f_{yy} 2\lambda_2 h f Df] + \frac{h^3}{6} \lambda_3^3 D^3 f \\
&= f + \lambda_3 h Df + h^2 \left[ \frac{1}{2} \lambda_3^2 D^2 f + \lambda_3 \lambda_2 f_y Df \right] + h^3 \left[ \frac{1}{6} \lambda_3^3 D^3 f + \lambda_3^2 \lambda_2 (f_{xy} Df + f_{yy} f Df) + \frac{1}{2} \lambda_2^2 \lambda_3 f_y D^2 f \right] \\
&= f + \lambda_3 h Df + h^2 \left[ \frac{1}{2} \lambda_3^2 D^2 f + \lambda_3 \lambda_2 f_y Df \right] + h^3 \left[ \frac{1}{6} \lambda_3^3 D^3 f + \lambda_3^2 \lambda_2 Df_y Df + \frac{1}{2} \lambda_2^2 \lambda_3 f_y D^2 f \right] \\
k_4 &= f + \lambda_4 h Df + \lambda_4 h (k_3 - f) f_y + \frac{h^2}{2} \lambda_4^2 D^2 f + \frac{h^2}{2} [2\lambda_4^2 f_{xy} (k_3 - f) + \lambda_4^2 f_{yy} (k_3^2 - f^2)] + \frac{h^3}{6} \lambda_4^3 D^3 f \\
&= f + \lambda_4 h Df + h^2 \left[ \lambda_4 \lambda_3 f_y Df + \frac{1}{2} \lambda_4^2 D^2 f \right] \\
&\quad + h^3 \left[ \frac{1}{6} \lambda_4^3 D^3 f + \lambda_4^2 \lambda_3 (f_{xy} Df + f_{yy} f Df) + \frac{1}{2} \lambda_4 \lambda_3^2 f_y D^2 f + \lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 f_y^2 Df \right] \\
&= f + h \lambda_4 Df + h^2 \left[ \lambda_4 \lambda_3 f_y Df + \frac{1}{2} \lambda_4^2 D^2 f \right] + h^3 \left[ \frac{1}{6} \lambda_4^3 D^3 f + \lambda_4^2 \lambda_3 Df_y Df + \frac{1}{2} \lambda_4 \lambda_3^2 f_y D^2 f + \lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 f_y^2 Df \right]
\end{aligned}$$

Los primeros términos de la serie de Taylor hasta orden  $h^4$  son

$$\begin{aligned}
y(x_n + h) &= y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} (f_x(x_n, y_n) + f_y(x_n, y_n) \cdot f(x_n, y_n)) \\
&\quad + \frac{h^3}{3!} (f_x^{(1)}(x_n, y_n) + f_y^{(1)}(x_n, y_n) f(x_n, y_n)) \\
&\quad + \frac{h^4}{4!} (f_x^{(2)}(x_n, y_n) + f f_y^{(2)}(x_n, y_n)) \\
&= y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2} Df + \frac{h^3}{6} (D^2 f + f_y Df) \\
&\quad + \frac{h^4}{24} (D^3 f + 3f f_y Df_y + 3f_x Df_y + f_y D^2 f + f_y^2 Df) \\
&= y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2} Df + \frac{h^3}{6} (D^2 f + f_y Df) + \frac{h^4}{24} (D^3 f + 3Df Df_y + f_y D^2 f + f_y^2 Df)
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado las relaciones

$$\begin{aligned}
 f^{(1)} &= f_x + f f_y = Df \\
 f^{(2)} &= f_{xx} + f_x f_y + 2f f_{xy} + f f_y^2 + f^2 f_{yy} = D^2 f + f_y Df \\
 f^{(3)} &= f_{xxx} + f_{xx} f_y + f_x f_{xy} + 2f_x f_{xy} + 2f f_{xxy} + f_x f_y^2 + 2f f_{xy} + 2f f_x f_{yy} \\
 &\quad + f^2 f_{xyy} + f f_{xxy} + f f_{xy} f_y + f f_x f_{yy} + 2f f_y f_{xy} + 2f^2 f_{xyy} \\
 &\quad + f f_y^3 + 2f^2 f_y f_{yy} + 2f^2 f_y f_{yy} + f^3 f_{yyy} = f_{xxx} + 3f f_{xxy} + 3f^2 f_{xyy} + f^3 f_{yyy} + \\
 &\quad f_y (f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f_{yy}) + 3f_x f_{xy} + 3f f_y f_{xy} + 3f f_x f_{yy} + 3f^2 f_y f_{yy} + f_x f_y^2 + f f_y^3 \\
 &= D^3 f + f_y D^2 f + 3D f_y Df + f_y^2 Df
 \end{aligned}$$

Igualando potencias de  $h$  hasta  $h^4$ , obtenemos que deben cumplirse las siguientes 8 ecuaciones con 7 incógnitas:

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 &= 1 \\
 \alpha_2 \lambda_2 + \alpha_3 \lambda_3 + \alpha_4 \lambda_4 &= \frac{1}{2} \\
 \alpha_2 \lambda_2^2 + \alpha_3 \lambda_3^2 + \alpha_4 \lambda_4^2 &= \frac{1}{3} \\
 \alpha_2 \lambda_2^3 + \alpha_3 \lambda_3^3 + \alpha_4 \lambda_4^3 &= \frac{1}{4} \\
 \alpha_3 \lambda_2 \lambda_3 + \alpha_4 \lambda_3 \lambda_4 &= \frac{1}{6} \\
 \alpha_3 \lambda_2 \lambda_3^2 + \alpha_4 \lambda_3 \lambda_4^2 &= \frac{1}{8} \\
 \alpha_3 \lambda_2^2 \lambda_3 + \alpha_4 \lambda_3^2 \lambda_4 &= \frac{1}{12} \\
 \alpha_4 \lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 &= \frac{1}{24}
 \end{aligned}$$

Estas ecuaciones tienen una infinidad de soluciones. Habitualmente se escoge como solución  $\alpha_1 = \alpha_4 = \frac{1}{6}$ ,  $\alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{3}$ ,  $\lambda_2 = \lambda_3 = \frac{1}{2}$ ,  $\lambda_4 = 1$ , que proporciona la regla de integración

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
 k_1 &= f(x_n, y_n) \\
 k_2 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right) \\
 k_3 &= f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2\right) \\
 k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3)
 \end{aligned} \tag{8.8}$$

que es el método de Runge-Kutta de 4 orden utilizado usualmente. Es equivalente a integrar  $f(x)$  por el método de Simpson cuando  $f(x, y)$  no depende de  $y(x)$ . Notemos que es necesario realizar

4 evaluaciones de la función  $f$  para cada paso de integración. El método es robusto y estable, y suele ser una primera elección a la hora de tratar un problema dado. Es razonablemente eficiente si las funciones  $f$  no son excesivamente complicadas. Su error de truncado es

$$\varepsilon = \frac{h^5}{120} f^{(4)}(\xi, y(\xi))$$

Cuando la evaluación de las funciones el menor número de veces posible es de importancia crítica, los métodos de orden superior conocidos como predictor-corrector son más eficientes. El mayor problema de estos métodos radica en la imposibilidad de conocer el error real cometido, lo cual es importante si las funciones  $f$  tienen un comportamiento abrupto, y en la imposibilidad de cambiar el paso de integración sobre la marcha, para cambiar el paso de integración en las zonas en las que el comportamiento de  $f$  varía. El cambiar el paso de integración en un momento dado es una de las ventajas que caracterizan los métodos de Runge-Kutta y todos los métodos de un paso en general. En lo concerniente a la estimación del error, una forma frecuentemente utilizada en el pasado es comparar los resultados obtenidos con  $h$  y  $h/2$ , aunque este método es costoso en tiempo de cálculo. En los últimos tiempos, la disponibilidad de programas de cálculo simbólico han permitido el descubrimiento de métodos de Runge-Kutta de orden mayor que 4 que contienen un método de 4 orden con funciones calculadas en los mismos puntos. Estos métodos permiten evaluar el error cometido como la diferencia entre los valores obtenidos con los dos órdenes diferentes. En Numerical Recipes se expone un método de Runge-Kutta de orden 6 que permite una estimación del error mediante un método de cuarto orden que utiliza los mismos  $k_i$  pero distintos coeficientes  $\alpha_i$ .

En Ralston y Rabinowitz se exponen en detalle distintas variantes de los métodos de Runge-Kutta.

En el caso de sistemas de ecuaciones, lo que tendremos es una relación de recurrencia entre vectores. Por ejemplo, para el método de Runge-Kutta de 4 orden

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

## 8.3. Métodos multipaso

### 8.3.1. Ecuaciones de segundo orden: método de Numerov

Para algunos tipos de ecuaciones de orden superior existen métodos más adecuados que el de Runge-Kutta. En particular, para ecuaciones del tipo

$$y''(x) = f(x)y(x) + w(x)$$

que aparece frecuentemente en Física, podemos aproximar la derivada segunda utilizando la fórmula de tres puntos de con su término de error

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} y^{(4)}(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} (f(x)y(x) + w(x))''$$

En el último paso hemos utilizado la ecuación diferencial para calcular el término de error. Utilizando la fórmula de tres puntos de nuevo para calcular la derivada segunda del último término,  $y''(x)$  queda en la forma

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}(f(x+h)y(x+h) + w(x+h) - 2f(x)y(x) - 2w(x) + f(x-h)y(x-h) + w(x-h))$$

con lo que la ecuación en diferencias finitas correspondiente a la ecuación diferencial queda como

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}[f(x+h)y(x+h) + w(x+h) - 2f(x)y(x) - 2w(x) + f(x-h)y(x-h) + w(x-h)] = f(x)y(x) + w(x)$$

Reordenando los términos obtenemos finalmente la relación de recurrencia

$$y(x+h) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x+h)\right) - 2y(x) \left(1 + \frac{5h^2}{12}f(x)\right) + y(x-h) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x-h)\right) = \frac{h^2[w(x+h) + 10w(x) + w(x-h)]}{12} \quad (8.9)$$

que se conoce como método de integración de Numerov. Notemos que no es un método de un paso, puesto que cada valor de  $y(x)$  se calcula a partir de los dos valores anteriores en la malla de integración. La función  $y(x)$  se determina con un error correspondiente al siguiente término de error de la fórmula de derivación de tres puntos

$$\Delta = -h^6 y^{(6)}(x)/240$$

por lo que el método de Numerov es más preciso que el de Runge-Kutta de cuarto orden y necesita menos evaluaciones de las funciones  $f(x)$ , pues se calculan sólo en la malla de integración.

**Ejercicio:** Demostrar que el error de truncado del método de Numerov viene dado por  $\Delta = -h^6 y^{(6)}(x)/240$ .

**Solución:** Tenemos el desarrollo de Taylor alrededor de  $y_n$

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y'' + 2\frac{h^2}{4!}y^{(4)} + 2\frac{h^4}{6!}y^{(6)} = y'' + \frac{h^2}{12}y^{(4)} + \frac{h^4}{360}y^{(6)} + \frac{h^6}{20160}y^{(8)}$$

$$y'' = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(4)} - \frac{h^4}{360}y^{(6)} - \frac{h^6}{20160}y^{(8)}$$

y utilizando de nuevo la fórmula de tres puntos para la derivada cuarta

$$y^{(4)} = (y'')'' = \frac{y''_{n+1} - 2y''_n + y''_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(6)} - \frac{h^4}{360}y^{(8)}$$

obtenemos hasta orden  $h^6$

$$y'' = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} \left[ \frac{y''_{n+1} - 2y''_n + y''_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(6)} - \frac{h^4}{360}y^{(8)} \right] - \frac{h^4}{360}y^{(6)} - \frac{h^6}{20160}y^{(8)}$$

Definiendo

$$u(x) = y(x) - \frac{h^2}{12}y''(x) = y(x) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x)\right)$$

donde en el último paso hemos utilizado la ecuación diferencial, tenemos en orden  $h^4$

$$y'' = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} + \frac{h^4}{144}y^{(6)} - \frac{h^4}{360}y^{(6)} = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} + \frac{h^4}{240}y^{(6)}$$

por lo que la relación de recurrencia da  $u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + h^2 f(x_n)y_n$  con un error de truncado de  $-\frac{h^6}{240}y^{(6)}$ .

La forma óptima desde el punto de vista de eficiencia numérica de utilizar el método de Numerov es definir la función

$$u(x) = y(x) \left(1 - \frac{h^2}{12}f(x)\right)$$

para la cual la relación 8.9 nos da la relación de recurrencia

$$u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + h^2 \left( \frac{w(x_{n+1}) + 10w(x_n) + w(x_{n-1}))}{12} + f(x_n)y_n \right)$$

En el segundo término aparece todavía  $y_n$ . Teniendo en cuenta que

$$y(x) = \frac{u(x)}{\left(1 - \frac{h^2}{12}f(x)\right)} \quad (8.11)$$

podemos poner  $y_n$  en función de  $u_n$  en el segundo miembro y tenemos finalmente la relación de recurrencia de  $u_n$  para la integración por el método de Numerov:

$$u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + h^2 \left( \frac{w_{n+1} + 10w_n + w_{n-1}}{12} + \frac{f(x_n)u_n}{\left(1 - \frac{h^2}{12}f(x_n)\right)} \right)$$

La solución buscada  $y(x)$ , se obtiene al final a partir de la relación 8.11 para los puntos deseados:

$$y_n = \frac{u_n}{\left(1 - \frac{h^2}{12}f(x_n)\right)}$$

En determinadas ocasiones, el llamado método de Numerov modificado, en el que se reemplaza el denominador de la expresión anterior por sus dos primeros términos del desarrollo en serie de Taylor,

$$\frac{f(x_n)}{\left(1 - \frac{h^2}{12}f(x_n)\right)} \approx f(x_n) \left(1 + \frac{h^2}{12}f(x_n)\right)$$

es más estable que el método de Numerov original. El error de truncado del método de Numerov modificado es el correspondiente al método de Numerov mas el cometido en la última aproximación

$$\Delta = h^6 f(x)^3 y(x)/144 - h^6 y^{(4)}(x)/240$$

La mayor estabilidad se debe a la cancelación de estos dos términos de error. El método de Numerov necesita dos valores iniciales. Las condiciones iniciales de las ecuaciones diferenciales de segundo orden suelen ser el valor inicial  $y_0$  y la derivada de la función  $y'_0$ . El primer valor de partida es el valor inicial  $y_0$ . El segundo valor  $y_1$  se determina a partir de  $y_0$  como  $y_1 = y_0 + y'_0 h$ . El método de Numerov se utiliza usualmente para resolver la ecuación de Schrödinger en un pozo de potencial  $V(x)$ :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E$$

o la de un oscilador armónico forzado

$$x''(t) + k^2 x(t) = f(t)$$

Cuando tenemos una ecuación de la forma

$$y'' = f(x, y)$$

aunque el método de Numerov no es aplicable, se puede utilizar la relación de recurrencia obtenida desarrollando  $y''$  en orden  $h^4$  mediante la fórmula de tres puntos con su término de error y utilizando la ecuación diferencial y la fórmula de tres puntos para estimar  $y^{(4)}(x)$ ,

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = \frac{h^2}{12} [f(x_{n+1}, y_{n+1}) + 10f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})]$$

que da  $y_n$  con un error  $O(h^6)$ . Como el cálculo del segundo término necesita  $y_{n+1}$  que es la solución que queremos determinar, se calcula  $y^{(n+1)}$  mediante el método de Euler en un primer paso,  $y_{n+1}^{(0)} = y_n + h(f(x_n, y_n))$  y se itera

$$y_{n+1}^{(k)} = 2y_n - y_{n-1} + \frac{h^2}{12} [f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k-1)}) + 10f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})]$$

hasta que se alcance la convergencia (usualmente 3 o 4 veces).

El hecho de que el método de Numerov tiene un error que es una serie de potencias pares de  $h$ , hace posible el utilizar el proceso de extrapolación al límite, utilizando pasos de integración  $h, h/2, h/4, \dots$  para mejorar la precisión de la solución  $y(x)$  en un punto dado.

## 8.4. Método de Stoer Burlisch y extrapolación de Richardson

La regla del punto medio tiene un error que es una serie de potencias pares de  $h$ . Esto nos permite utilizar el método de extrapolación al límite en la forma que exponemos a continuación.

Consideramos un paso de integración  $H$ , que es mucho mayor que la longitud usual de un paso de integración, y subdividimos  $H$  en  $n$  subintervalos. Si realizamos una subintegración dentro de  $H$ , con  $y_0$  como valor inicial, obtenemos:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ y_2 &= y_0 + 2hf(x_1, y_1) \\ &\vdots \\ y_n &= y_{n-2} + 2hf(x_{n-1}, y_{n-1}) \end{aligned}$$

Entonces sucede que la estima

$$y(x_0 + H, h) = \frac{1}{2} [y_n + y_{n-1} + hf(x_n, y_n)]$$

tiene un error que es una serie de potencias pares de  $h$ , con coeficientes independientes de  $h$ :

$$y(x_0 + H, h) = y(x_0 + H) + A_2 h^2 + A_4 h^4 + A_6 h^6 + \dots$$

Esto nos permite utilizar la extrapolación de Richardson para calcular  $y(x_0 + H)$ . Para ello tomamos  $h = H, H/2, H/4, H/8, \dots$  y construimos la tabla usual de extrapolación al límite

$$\begin{array}{cccc} \mathbb{R}(H) & & & \\ & \mathbb{R}^{(1)}(H) & & \\ \mathbb{R}(H/2) & & \mathbb{R}^{(2)}(H) & \\ & \mathbb{R}^{(1)}(H/2) & & \mathbb{R}^{(3)}(H) \\ \mathbb{R}(H/4) & & \mathbb{R}^{(2)}(H/2) & \\ & \mathbb{R}^{(1)}(H/4) & & \\ \mathbb{R}(H/8) & & & \\ & \vdots & & \end{array}$$

con  $\mathbb{R}(H) = y(x_0 + H, H)$ ,  $\mathbb{R}(H/2) = y(x_0 + H, H/2)$ ,  $\mathbb{R}(H/4) = y(x_0 + H, H/4)$ ,  $\dots$ , y

$$R^{(k)}(H/2^{m-1}) = \frac{4^k R^{(k-1)}(H/2^m) - R_m^{(k-1)}(H/2^{m-1})}{4^k - 1}$$

## 8.5. Métodos explícitos

Los métodos explícitos se basan en escribir la solución de la ecuación diferencial  $y' = f(x, y)$  como

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

y aproximar  $f(x, y)$  por el polinomio interpolador en  $m+1$  puntos  $(x_n, y_n)$ ,  $(x_{n-1}, y_{n-1})$ ,  $(x_{n-m}, y_{n-m})$ ,  $m \leq n$ :

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_m(x) dx$$

Utilizamos la fórmula de diferencias hacia atrás:

$$p_m(x) = \sum_{j=0}^m (-1)^j \binom{-s}{j} \nabla^j f_n$$

con  $s = \frac{x - x_n}{h}$  con lo que tenemos

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_m(x) dx = h \sum_{j=0}^m b_j \nabla^j f_n$$

donde

$$b_j = (-1)^j \int_0^1 \binom{-s}{j} ds$$

Los coeficientes  $b_j$  no dependen ni de  $m$  ni de  $n$ . Los primeros valores son  $b_0 = 1$ ,  $b_1 = 1/2$ ,  $b_2 = 5/12$ ,  $b_3 = 3/8$ ,  $b_4 = 251/720$ .

La regla de integración

$$y_{n+1} = y_n + h [b_0 f_n + b_1 \nabla f_n + \cdots + b_m \nabla^m f_{n-m}]$$

se denomina algoritmo de Adams-Bashfort. Escribiendo las diferencias en términos de valores de la función, obtenemos expresiones de la forma

$$y_{n+1} = y_n + h [\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n-1} + \cdots + \beta_m f_{n-m}]$$

donde los  $\beta_i$  dependen del orden  $m$  del polinomio. Los casos particulares para diversos valores de  $m$  son los siguientes: para  $m = 0$

$$y_{n+1} = y_n + h f_n$$

que es el método de Euler. Para  $m = 1$  tenemos:

$$y_{n+1} = y_n + h [b_0 f_n + b_1 (f_n - f_{n-1})] = y_n + \frac{h}{2} (3f_n - f_{n-1})$$

mientras que para  $m = 2$  obtenemos

$$y_{n+1} = y_n + h [b_0 f_0 + b_1 (f_1 - f_0) + b_2 (f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2})] = y_n + \frac{h}{12} [23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}]$$

Finalmente, para  $m = 3$  tenemos la relación de recurrencia:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h [b_0 f_0 + b_1 (f_1 - f_0) + b_2 (f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}) + b_3 ((f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}) - (f_{n-1} - 2f_{n-2} + f_{n-3}))] \\ &= y_n + \frac{h}{24} [55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] \end{aligned}$$

También se pueden derivar métodos explícitos con un paso de integración de varias unidades de  $h$ . Tomando  $2h$  tenemos

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-1}) + \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} p_m(x) dx$$

y procediendo como anteriormente obtenemos

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h [b_0^* f_n + b_1^* \nabla f_n + \cdots + b_m^* \nabla^m f_{n-m}]$$

con

$$b_j = (-1)^j \int_{-1}^1 \binom{-s}{j} ds$$

Este método se conoce como algoritmo de Nystrom. Podemos generalizar a un paso de integración de  $(k+1)h$

$$y(x_{n+1}) = y(x_{n-k}) + \int_{x_{n-k}}^{x_{n+1}} p_m(x) dx$$

Cuando  $k=3$  tenemos el denominado método de Milne

$$y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2f_{k-2} - f_{k-1} + 2f_k)$$

Todos los métodos explícitos realizan una extrapolación para calcular  $y(x)$  entre  $y_n$  y  $y_{n+1}$ , lo cual es un problema puesto que, como ya hemos visto, la extrapolación tiene un error difícil de determinar y en general es más imprecisa que la interpolación. Este problema se corrige mediante los métodos implícitos, que interpolan entre  $y_n$  y  $y_{n+1}$ .

## 8.6. Métodos implícitos

Los métodos implícitos son similares a los métodos explícitos, salvo que el polinomio interpolador pasa por el punto  $(x_{n+1}, y_{n+1})$ . Tenemos

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p_{m+1}(x) dx$$

donde utilizando la fórmula de diferencias hacia atrás tenemos

$$p_{m+1}(x) = \sum_{j=0}^{m+1} (-1)^j \binom{-s}{j} \nabla^j f_{n+1}$$

con

$$s = \frac{x - x_{n+1}}{h}$$

resulta

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p_{m+1}(x) dx = h \sum_{j=0}^{m+1} c_j \nabla^j f_{n+1}$$

donde

$$c_j = (-1)^j \int_{-1}^0 \binom{-s}{j} ds$$

Tenemos por lo tanto el algoritmo

$$y_{n+1} = y_n + h [c_0 f_{n+1} + c_1 \nabla f_{n+1} + \cdots + c_{m+1} \nabla^{m+1} f_{n-m}]$$

denominado método de Adams-Moulton. Los primeros valores de  $c_j$  son:  $c_0 = 1$ ,  $c_1 = -1/2$ ,  $c_2 = -1/12$ ,  $c_3 = -1/24$ ,  $c_4 = -19/720$ . Expresando las diferencias en término de los valores de las funciones la expresión anterior toma la forma

$$y_{n+1} = y_n + h [\gamma_0 f_{n+1} + \gamma_1 f_n + \cdots + \gamma_{m+1} f_{n-m}]$$

donde los  $\gamma_i$  dependen de  $m$ . Obtenemos los siguientes métodos implícitos para los diferentes valores de  $m$ :

Para  $m = -1$

$$y_{n+1} = y_n + h f_{n+1}$$

Para  $m = 0$  obtenemos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f_{n+1} + f_n)$$

Para  $m = 1$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} (5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$$

y finalmente, para  $m = 2$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$$

Los algoritmos implícitos necesitan una primera aproximación a  $y_{n+1}$ . Lo usual es utilizarlos en la forma conocida como predictor corrector, donde un método explícito se emplea para calcular una primera aproximación de  $y_{n+1}$ , que llamamos  $y_{n+1}^{(0)}$ , y el corrector se emplea para mejorar este valor. Tendremos por lo tanto,:

Predictor:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + h [b_0 f_n + b_1 \nabla f_n + \cdots + b_k \nabla^k f_{n-k}]$$

Corrector:

$$y_{n+1}^{(i+1)} = y_n + h [c_0 f_{n+1}^{(i)} + c_1 \nabla f_n^{(i)} + \cdots + c_{m+1} \nabla^{m+1} f_{n-m}^{(i)}]$$

donde  $k$  y  $m$  son los órdenes del predictor y corrector, respectivamente. Es recomendable que  $k = m$  pero frecuentemente se emplean  $k$  y  $m$  distintos. El método más sencillo es  $k = 0$  y  $m = 0$

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + h f_n \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_n + \frac{h}{2} [f_{n+1}^{(i)} + f_n] \end{aligned}$$

conocido como método de Euler modificado. Cuando  $m = k = 2$ , tenemos el método de Adams-Moulton de tercer orden:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + \frac{h}{12} [23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}] + O(h^3) \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_n + \frac{h}{24} [9f_{n+1}^{(i)} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] + O(h^4) \end{aligned}$$

mientras que con  $k = 3$  y  $m = 2$  se obtiene el denominado método de Adams, frecuentemente empleado:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n + \frac{h}{24} [55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}] + O(h^4) \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_n + \frac{h}{24} [9f_{n+1}^{(i)} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}] + O(h^4) \end{aligned}$$

Los métodos de predictor-corrector tienen como principal ventaja sobre los métodos explícitos el que permiten estimar el error cometido. Por ejemplo, en el método de Adams

$$y_{n+1}^{(i+1)} - y_{n+1}^{(i)} = \frac{9h}{24} (f_{n+1}^{(i)} - f_{n+1}^{(i-1)})$$

En general, son suficientes dos o tres iteraciones del corrector. En caso de que sean necesarias más iteraciones, es preferible disminuir el paso de integración.

También se pueden derivar correctores con varios pasos de integración. El método de Milne de predictor-corrector emplea el método explícito de Milne como predictor y utiliza el corrector de segundo orden de dos pasos de integración conocido como método implícito de Simpson:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2f_{k-2} - f_{k-1} + 2f_k) \\ y_{n+1}^{(i+1)} &= y_{n-1} + \frac{h}{3} (f_{n+1}^{(i)} + 4f_n + f_{n-1}) \end{aligned}$$

## 8.7. Elección del método de integración

Hay diversos puntos a considerar a la hora de elegir un método de integración: volumen de cálculo para una precisión dada, control de errores y estimación del error, estabilidad, posibilidad de cambiar el paso de integración, y error de truncado. El volumen de cálculo necesario es esencialmente debido al cálculo de las diversas funciones que aparecen en el método, por lo que minimizar el número de funciones calculadas es esencial.

Los métodos de un paso (Taylor y Runge-Kutta) pueden cambiar fácilmente de paso de integración y son estables. Por otro lado, la estimación del error es difícil salvo en los métodos de Runge-Kutta de orden superior que contienen otro inferior. El método de Taylor es difícil de programar y requiere el cálculo de muchas derivadas. Ambos métodos tienen excelentes errores

de truncado. Además no necesitan utilizar otro método para determinar valores de comienzo, pues utilizan tantos puntos de partida como condiciones iniciales.

Los métodos explícitos e implícitos de orden  $m$  requieren valores de comienzo en  $m$  puntos. Estos valores de comienzo deben de ser calculados por otro método, en general un método de Runge-Kutta del mismo orden. No permiten el cambio del paso de integración. Se puede realizar mediante fórmulas especiales. Los métodos explícitos no permiten estimar el error cometido y tienen un error de truncado incierto debido a la extrapolación, mientras que los métodos implícitos tienen un excelente error de truncado. Tanto métodos explícitos e implícitos requieren pocas evaluaciones, una sólo en el caso de los métodos explícitos, y unas tres en los métodos predictor-corrector, que es menor que el esfuerzo numérico necesario en el método RK4 y la mitad que en el método RK6. Los métodos predictor-corrector permiten adicionalmente estimar el error cometido. Si el volumen de cálculo es un problema, los métodos explícitos o los métodos implícitos del tipo predictor corrector son una posibilidad a considerar. Si las condiciones no cambian mucho de un problema a otro, de forma que conocemos el error cometido y no hace falta cambiar el paso de integración, los métodos explícitos son aconsejables, pues requieren mucho menor volumen de cálculo. Esto ocurre, por ejemplo, cuando calculamos con muchos potenciales similares, que varían sólo en los valores de algunos parámetros.

## 8.8. Ecuaciones en diferencias y estabilidad de ecuaciones diferenciales

Uno de los problemas importantes es determinar si un método para resolver una ecuación diferencial es estable. Cuando resolvemos la ecuación numéricamente, reemplazamos la ecuación diferencial por una ecuación en diferencias. La solución exacta de esta ecuación en diferencias es distinta de la de la ecuación diferencial. La diferencia entre ambas viene dada en principio por las cotas de error del método, que dependen de una potencia del paso de integración. Sin embargo, estas cotas de error no tienen en cuenta los errores de redondeo y los errores en los valores iniciales. En un método de integración dado, la ecuación de diferencias asociada será

$$y_{n+1} = G(y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, y_{n-m}, x_n)$$

Si cambio el valor inicial en  $y_0^* = y_0 + \varepsilon$ , puede suceder que el cambio en la nueva sucesión  $y_n^*$  sea siempre pequeño si  $\varepsilon$  es pequeño, o que por el contrario  $|y_n^* - y_n|/y_n$  crezca indefinidamente. En este último caso, decimos que el método de integración es inestable. Un método puede ser inestable en determinadas zonas de las variables y estable en otras. La estabilidad se puede estudiar mediante la resolución exacta de la ecuación en diferencias. Para ilustrar el origen de las inestabilidades, vamos a considerar el caso del método del punto medio y el caso sencillo en que  $f(x_n, y_n) = -Ay_n$ , donde  $A$  es una constante. La solución exacta de la ecuación diferencial es  $y = ce^{-Ax}$ . La ecuación en diferencias dada por el método del punto medio es

$$y_{n+1} + 2hAy_n - y_{n-1} = 0$$

## 8.8. ECUACIONES EN DIFERENCIAS Y ESTABILIDAD DE ECUACIONES DIFERENCIALES 155

Para resolver esta ecuación en diferencias suponemos una solución de la forma  $y_n = z^n$ , con lo que obtenemos la ecuación característica

$$z^n(z^2 + 2Ahz - 1) = 0$$

que tiene como soluciones no nulas  $z_1 = -Ah + \sqrt{A^2h^2 + 1}$  y  $z_2 = -Ah - \sqrt{A^2h^2 + 1}$ . Tendremos por lo tanto las soluciones

$$\begin{aligned} y_n^{(1)} &= z_1^n = \left[-Ah - \sqrt{A^2h^2 + 1}\right]^n \simeq \left[-1 - Ah - \frac{1}{2}A^2h^2 + \mathcal{O}(h^3)\right]^n \simeq (-1)^n e^{Anh} + \mathcal{O}(nh^3) \\ &= (-1)^n e^{Ax_n} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} y_n^{(2)} &= z_2^n = \left[-Ah + \sqrt{A^2h^2 + 1}\right]^n \simeq \left[1 - Ah + \frac{1}{2}A^2h^2 + \mathcal{O}(h^3)\right]^n \simeq e^{-Anh} + \mathcal{O}(nh^3) \\ &= e^{-Ax_n} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta  $x_n = nh$ . La solución general es una combinación lineal de ambas soluciones

$$y_n = c_1(-1)^n e^{Ax_n} + c_2 e^{-Ax_n}$$

Tenemos que la ecuación en diferencias tiene, además de la solución de la ecuación diferencial, la solución parásita  $y_n = c_1(-1)^n e^{Ax_n}$ . La solución que corresponde a la ecuación diferencial y que debería ser seleccionada por las condiciones iniciales es

$$y_n = c_2 e^{-Ax_n}$$

es decir,  $c_1 = 0$ . Sin embargo, en la práctica los errores de redondeo y de truncado introducen una componente de la solución parásita

$$y_n^* = \delta(-1)^n e^{Ax_n} + c_2 e^{-Ax_n}$$

que crece exponencialmente hasta enmascarar completamente la solución verdadera.

$$\frac{y_n^* - y_n}{y_n} \longrightarrow \frac{\delta}{c_2} (-1)^n e^{2Ax_n} \longrightarrow \infty$$

El origen de esta solución parásita es que hemos aproximado una ecuación diferencial de primer orden por una ecuación en diferencias de segundo orden. En general cuando resolvemos una ecuación diferencial de primer orden mediante un método de  $m$  pasos, la convertimos en una ecuación en diferencias de orden  $m$ , que tiene  $m$  soluciones. Si algunas de estas soluciones son exponenciales crecientes, el método será inestable.

## 8.9. Ejercicios

1. Considérese la ecuación de movimiento

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^2$$

con las condiciones iniciales  $x(t=0) = 0$  y  $v(t=0) = 10$ . Determínese la posición y la velocidad para  $t = 1$  mediante el método de Euler y con paso  $h = 0,2$ .

2. Considérese la ecuación diferencial

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{\sqrt{1-t^4}}$$

con la condición de contorno  $y(0)=0$ . Intégrese esta ecuación diferencial hasta  $t = 0,5$  con pasos de integración  $\Delta t = 0,1$ , usando el método de Euler. Compárese el resultado con la evaluación numérica de la integral

$$y(0,5) = \int_0^{0,5} \frac{dt}{\sqrt{1-t^4}}$$

con la regla trapezoidal con paso  $h = 0,1$ .

3. La trayectoria de un móvil a lo largo de una línea recta viene descrita por la ecuación

$$\frac{d^2x}{dt^2} = x^2$$

partiendo del punto  $x = 1$  con velocidad inicial  $v = 1$  ¿Cuánto tiempo transcurrirá hasta que el móvil llegue al punto  $x = 2$ ? Utilícese el método de Euler con pasos  $\Delta x = 0,2$ .

4. Una partícula de 1 Kg de masa se mueve partiendo del origen con una velocidad inicial de 10 m/s y está sometida a una fuerza dada por la expresión

$$F = \alpha x^2 - \beta v^2$$

con  $\alpha = 1N/m^2$  y  $\beta = 0,002 \text{ Kg/m}$ .

- Escribese la ecuación diferencial que describe el movimiento.
- Transfórmese en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer grado.
- Escribáanse las fórmulas de integración para el método de Euler.
- Determínese la posición, velocidad y aceleración en  $t = 0,5$  con paso  $h = 0,1$ , sabiendo que las condiciones iniciales son  $x(0) = 0$  y  $v(0) = 10$ .

5. Considérese la ecuación diferencial  $y' = y$  con la condición de contorno  $y(0) = -9$ . Calcular el valor de  $y(1)$  usando el método del punto medio, con dos y cuatro subdivisiones del intervalo. Realizar a continuación la extrapolación de Richardson para obtener el mejor valor. Comparar con la solución analítica de la ecuación diferencial.
6. Dada la ecuación diferencial

$$\frac{d^2x}{dt^2} = t^2$$

con las condiciones de contorno para  $t = 1$

$$\begin{aligned}x(1) &= \frac{4}{3} \\ \frac{dx(1)}{dt} &= \frac{8}{3}\end{aligned}$$

llevar a cabo un paso de integración de valor  $h = 0,1$  usando el método de Euler y el método predictor corrector.