

Métodos numéricos para las ecuaciones diferenciales

Aplicaciones a la Química

Jose S. Cánovas Peña

5 de febrero de 2010

Advertencia: Esta es la primera versión de los apuntes de métodos numéricos del cuarto curso de Ingeniería Industrial. **No** han sido corregidos y probablemente contengan numerosos errores, pero he decidido colgarlos en la web para que sirva de guia de estudio. Para corregir errores, podeis escribir a mi dirección de correo Jose.Canovas@upct.es.

ÍNDICE GENERAL

Índice General

I Bloque de teoría	1
1 Introducción a las ecuaciones diferenciales: modelos de la Química	3
1.1 Ecuaciones diferenciales	3
1.2 Soluciones de ecuaciones diferenciales	4
1.3 Sistemas de ecuaciones diferenciales	6
1.4 Modelos de la química descritos por una ecuación	8
1.4.1 Descomposición radioactiva	8
1.4.2 Ley de enfriamiento de Newton.	9
1.4.3 Problemas de mezclas químicas.	12
1.4.4 Cinética de las reacciones químicas	13
1.5 Modelos de la química descritos por un sistema de ecuaciones	14
1.5.1 Problemas de mezclas con varios recipientes	14
1.5.2 Climatización de edificios con varias estancias	16
1.5.3 Cinética de las reacciones químicas	17
1.6 Ejercicios	18
2 Métodos de un paso	23
2.1 Introducción	23
2.2 Métodos de Taylor	23
2.2.1 Método de Euler	25
2.2.2 Método de Taylor de orden 2	27
2.3 Métodos de Runge–Kutta de orden dos	29
2.4 Análisis del error en los métodos de orden uno	33
2.4.1 Error local de truncamiento en el método de Taylor	35
2.4.2 Error local de truncamiento en los métodos de Runge–Kutta	35
2.4.3 Relación entre el error local de truncamiento y el error global	36
2.4.4 Relación entre el error local y el error local de truncamiento	37
2.5 Extrapolación de Richardson	38
2.6 Más sobre los métodos Runge–Kutta	39
2.6.1 El método de 3 etapas	40
2.6.2 El método de cuatro etapas	43
2.6.3 Métodos de más etapas	45

3 Métodos multipaso	47
3.1 Introducción	47
3.2 Métodos multipaso lineales	47
3.3 Primeros ejemplos	49
3.4 Métodos de multipaso deducidos a partir de la integración numérica	51
3.4.1 Métodos de Adams–Bashforth	52
3.4.2 Métodos de Adams–Moulton	53
3.5 Estabilidad de los métodos multipaso lineales	55
3.6 Fórmulas BDF	57
3.7 Metodos predictor–corrector	58
3.8 Multipaso o Runge–Kutta	59
II Bloque de práctica	61
4 Introducción a Mathematica	63
4.1 Preliminares	63
4.2 Paréntesis, corchetes y llaves	65
4.2.1 Errores	66
4.3 Funciones matemáticas de interés	66
4.4 Aprovechando cálculos anteriores	67
4.5 Definición de variables y funciones	68
4.6 Derivadas de funciones	70
4.7 Representación gráfica de funciones	71
5 Ecuaciones diferenciales con Mathematica	73
5.1 Ecuaciones diferenciales de primer orden	73
5.2 Ecuaciones diferenciales lineales.	75
5.3 Aplicaciones de las ecuaciones lineales con coeficientes constantes.	76
5.3.1 Movimiento armónico simple.	76
5.3.2 Movimiento amortiguado.	77
5.3.3 Movimiento forzado.	78
5.4 Aplicación a los circuitos eléctricos	78
6 Programación en Mathematica	81
6.1 Operaciones y definición de variables.	81
6.1.1 Definición de variables y funciones	81
6.1.2 Operaciones	83
6.2 Construcción de programas con Mathematica.	84
6.2.1 If	84
6.2.2 Which	85
6.2.3 Switch	85
6.2.4 Do	86
6.2.5 While	86
6.2.6 For	87
6.2.7 Break	87

6.2.8	Goto, Label	87
6.2.9	Print	88
6.2.10	Input	88
6.3	Un programa	89
6.4	Presentaciones gráficas	90
A	Ecuaciones en diferencias	95
A.1	Introducción	95
A.2	Transformada Z	98
A.2.1	Definición y propiedades básicas	98
A.2.2	Transformada Z inversa	100
A.2.3	Aplicación a la resolución de la ecuación en diferencias lineales con coeficientes constantes	101
A.2.4	Fórmula de inversión compleja	103
A.2.5	Funciones de transferencia.	105
A.3	Ecuaciones no lineales	106

Parte I

Bloque de teoría

Capítulo 1

Introducción a las ecuaciones diferenciales: modelos de la Química

Sumario. Ecuación y sistemas de ecuaciones diferenciales. Concepto de solución. Descomposición radioactiva. Problemas de mezclas. Ley del calor de Newton. Cinética de las reacciones químicas.

1.1 Ecuaciones diferenciales

Una *ecuación diferencial* una expresión de la forma

$$F(x, y, y', \dots, y^n) = 0, \quad (1.1)$$

donde F es una función real definida en un cierto abierto $A \subseteq \mathbb{R}^{n+2}$, e $y(x)$ es una función real de variable real. Como vemos, una ecuación diferencial es una expresión en la que aparecen ligadas una variable x , que llamaremos *variable independiente* y las n primeras derivadas respecto de x de una variable y , que se llama *variable dependiente* por ser una función dependiente de la variable x . Se llama *orden* de la ecuación (1.1) al valor de la derivada más alta en dicha expresión. Ejemplos de ecuaciones diferenciales son los siguientes:

$$\begin{aligned} &y'' + \log(xy) - x = y, \\ &y^3 + xy' + e^x \sinh y = 0, \\ &y \cdot y' \cdot y'' = x, \end{aligned}$$

que tienen órdenes 2, 3 y 2, respectivamente.

Diremos que una función $y : (a, b) \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es *solución* de la ecuación (1.1) si existe la derivada n -ésima de y en todo punto del intervalo (a, b) , $(x, y(x), y'(x), \dots, y^n(x)) \in A$ para todo $x \in (a, b)$ y

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

para todo $x \in (a, b)$. Por ejemplo tomemos la ecuación diferencial de orden uno

$$y' - y \tan x = 0. \quad (1.2)$$

Esta ecuación viene definida por la función $F : A \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $F(x, y, y') = y' - y \tan x$. El dominio de definición de F es en este caso $A = \{(-\pi/2 + 2k\pi, \pi/2 + 2k\pi) : k \in \mathbb{Z}\} \times \mathbb{R}^2$. Entonces la función $y : (-\pi/2, \pi/2) \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $y(x) = \frac{c}{\cos x}$, donde c es una constante arbitraria es una solución de dicha ecuación diferencial. En efecto, esta función es una vez derivable con derivada $y'(x) = \frac{c \sin x}{\cos^2 x}$, se verifica que $(x, y(x), y'(x)) \in A$ para todo $x \in (-\pi/2, \pi/2)$, y además satisface que

$$y'(x) - y(x) \tan x = \frac{c \sin x}{\cos^2 x} - \frac{c}{\cos x} \tan x = 0,$$

para todo punto $x \in (-\pi/2, \pi/2)$.

Con frecuencia las soluciones de la ecuación (1.1) no podrán obtenerse de forma explícita y vendrán dadas de forma implícita por una ecuación de la forma $g(x, y) = 0$. Así las curvas $x^2 + y^2 = c > 0$ definen implícitamente las soluciones de la ecuación $yy' + x = 0$ definidas en $(-\sqrt{c}, \sqrt{c})$, como puede verse fácilmente derivando de forma implícita la expresión $x^2 + y^2 = c$ respecto a la variable independiente x .

A lo largo del curso estudiaremos fundamentalmente *ecuaciones resueltas respecto de la derivada de mayor orden* de la ecuación, es decir, ecuaciones de la forma

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

donde $f : A \subseteq \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$. Estas ecuaciones son obtenidas cuando sea posible despejar $y^{(n)}$ en (1.1). Serán también de especial interés para nosotros las ecuaciones *autónomas*, de la forma

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

donde F no depende de la variable independiente explícitamente aunque ésta se encuentre impícita en la función y , y las ecuaciones *lineales*

$$a_0(x)y^{(n)} + a_1(x)y^{n-1} + \dots + a_{n-1}(x)y' + a_n(x)y = b(x)$$

con $a_n, a_{n-1}, \dots, a_1, a_0$ y b funciones reales de variable real.

1.2 Soluciones de ecuaciones diferenciales

Como vimos en el ejemplo (1.2) las soluciones de una ecuación diferencial en caso de existir no son únicas, sino que dependen de ciertas constantes arbitrarias provenientes de la integración. En general, dada una ecuación diferencial de la forma

$$F(x, y, y', \dots, y^{(n)}) = 0, \tag{1.3}$$

las soluciones de la misma pueden escribirse como

$$g(x, y, c_1, \dots, c_n) = 0 \tag{1.4}$$

con $c_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Así las soluciones de una ecuación diferencial de orden n generan una *familia n -paramétrica de curvas* en el plano. En el ejemplo anterior, la solución $y(x) = c/\cos x$ define

una familia de curvas en el plano dependiente del valor o parámetro de c . Recíprocamente, a partir de una familia n -paramétrica de curvas definida por (1.4) puede construirse una ecuación diferencial de la manera siguiente. Derivando n veces (1.4) respecto de x obtenemos $n+1$ ecuaciones de las que, eliminando los parámetros c_1, c_2, \dots, c_n , obtendremos una ecuación diferencial de orden n dada por (1.3). Las soluciones obtenidas como familia n -paramétrica de curvas se llaman *soluciones generales* de la ecuación diferencial. Por ejemplo, si consideramos la familia de las curvas del plano dependiente de dos parámetros dada por la ecuación $y = c_1 e^x + c_2 e^{-x}$, $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$, derivando implícitamente respecto de x tenemos que

$$\begin{aligned} y' &= c_1 e^x - c_2 e^{-x}, \\ y'' &= c_1 e^x + c_2 e^{-x}. \end{aligned}$$

Despejando c_1 y c_2 y sustituyendo en la primera ecuación tenemos que $y'' = y$ es la ecuación diferencial que define a la familia de curva anteriores. Nótese que es una ecuación de orden dos dado que la familia depende de dos parámetros.

Sin embargo, no siempre las ecuaciones diferenciales de orden n presentan una solución general que se expresa mediante familias n -paramétricas. Por ejemplo, la ecuación $y^2 + (y')^2 = -1$ no posee ninguna solución, mientras que $y^2 + (y')^2 = 0$ tiene como única solución $y(x) = 0$, que no depende de parámetro alguno. Además la ecuación de orden uno $(y' - y)(y' - 2y) = 0$ tiene por soluciones a las funciones dadas por la expresión $(y - c_1 e^t)(y - c_2 e^{2t}) = 0$. Mención aparte merecen aquellas que no aparecen comprendidas en la familia n -paramétrica, las llamadas *soluciones singulares*. Por ejemplo $y' = -2y^{3/2}$ tiene como solución general $y(x) = 1/(t+c)^2$ y como solución singular $y(x) = 0$. Nótese que esta definición es ambigua y depende de la familia de curvas al ser $y(x) = C^2/(Cx+1)^2$ una familia uniparamétrica de soluciones de $y' = -2y^{3/2}$ conteniendo la solución nula.

De acuerdo con lo visto anteriormente, las soluciones de las ecuaciones diferenciales vienen dadas por una familia n -paramétrica de curvas y por lo tanto la solución no es en general única. Para evitar este hecho, suele acompañarse a una ecuación diferencial

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

de n condiciones iniciales de la forma $y(x_0) = y_0$, $y'(x_0) = y'_0, \dots, y^{n-1}(x_0) = y_0^{n-1}$ donde las constantes $x_0, y_0, y'_0, \dots, y_0^{n-1}$ son números reales, de manera que encontraremos la solución de la ecuación diferencial satisfaga adicionalmente estas condiciones. Se define un *problema de condiciones iniciales o de Cauchy* al problema de la forma

$$\left\{ \begin{array}{l} F(x, y, y', \dots, y^n) = 0; \\ y(x_0) = y_0; \\ y'(x_0) = y'_0; \\ \vdots \\ y^{n-1}(x_0) = y_0^{n-1}. \end{array} \right.$$

Lo que se espera añadiendo estas condiciones es eliminar los parámetros de la familia n -paramétrica de soluciones, obteniendo entonces una solución que sea única. Nótese que se añaden tantas condiciones iniciales como orden tiene la ecuación. Por ejemplo, tomemos la ecuación de orden uno (1.2), que recordemos, tenía por solución $y : (-\pi/2, \pi/2) \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $y(x) = \frac{c}{\cos x}$, donde c es una constante arbitraria. Si consideramos el problema de condiciones iniciales

$$\left\{ \begin{array}{l} y' - y \tan x = 0 \\ y(0) = 1, \end{array} \right.$$

tendríamos que necesariamente $1 = y(0) = c/\cos(0) = c$, por lo que $c = 1$ y la única solución del problema de condiciones iniciales es $y(x) = 1/\cos x$.

Sin embargo esta estrategia no siempre produce los frutos deseados. Sin ir más lejos, el problema

$$\begin{cases} y^2 + (y')^2 = 0 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

no tiene solución y

$$\begin{cases} y' = 3y^{2/3} \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

tiene al menos dos soluciones dadas por $y(x) = 0$ e $y(x) = x^3$.

1.3 Sistemas de ecuaciones diferenciales

Un sistema de ecuaciones diferenciales es una expresión de la forma

$$\begin{cases} F_1(x, y_1, y'_1, y_2, y'_2, \dots, y_m, y'_m) = 0; \\ F_2(x, y_1, y'_1, y_2, y'_2, \dots, y_m, y'_m) = 0; \\ \vdots \\ F_m(x, y_1, y'_1, y_2, y'_2, \dots, y_m, y'_m) = 0; \end{cases}$$

donde y_1, y_2, \dots, y_m son funciones reales a determinar que dependen de x y $F_i : A \subseteq \mathbb{R}^{1+2m} \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq i \leq m$, son funciones reales de varias variables. Se suele suponer que hay igual número de ecuaciones que de incógnitas de manera que todas las ecuaciones son independientes, es decir, ninguna puede deducirse de las demás. Estamos interesados en aquellos sistemas de ecuaciones diferenciales en los que podemos despejar la primera derivada de cada una de las funciones incógnita, es decir, sistemas de la forma

$$\begin{cases} y'_1 = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ y'_2 = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ \vdots \\ y'_m = f_m(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \end{cases}$$

donde $f_i : A \subseteq \mathbb{R}^{1+m} \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq i \leq m$, son funciones reales. Ejemplos de estos sistemas son

$$\begin{cases} y'_1 = xy_1 + y_2^2; \\ y'_2 = x + y_1 + y_2; \end{cases}$$

$$\begin{cases} y'_1 = xy_1 + y_2^2 - y_3; \\ y'_2 = x + y_1 + y_2y_3; \\ y'_3 = y_1y_2y_3; \end{cases}$$

En general la resolución de estos sistemas no es posible, salvo en casos excepcionales. Sólo para el caso de los sistemas de ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes constantes, que veremos un poco más tarde existen algoritmos que permiten el cálculo explícito de las soluciones. Sin embargo, es relativamente sencillo saber cuándo un sistema tiene solución, o más precisamente cuándo un problema de condiciones iniciales asociado tiene solución. Primero claro está, debemos definir qué

entendemos por un problema de condiciones iniciales para sistemas de ecuaciones diferenciales. Dicho problema es un sistema de ecuaciones diferenciales

$$\begin{cases} y'_1 = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ y'_2 = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ \vdots \\ y'_m = f_m(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ y_1(x_0) = y_1, y_2(x_0) = y_2, \dots, y_m(x_0) = y_m \end{cases}$$

junto con las condiciones $y_i(x_0) = y_i$, donde $x_0, y_1, y_2, \dots, y_m$ son números reales. Por ejemplo

$$\begin{cases} y'_1 = xy_1 + y_2^2 - y_3; \\ y'_2 = x + y_1 + y_2y_3; \\ y'_3 = y_1y_2y_3; \\ y_1(0) = 2, y_2(0) = 0, y_3(0) = 1, \end{cases}$$

es un problema de condiciones iniciales. Nótese que todas las condiciones iniciales implican el conocimiento de la función en 0, es decir, lo siguiente

$$\begin{cases} y'_1 = xy_1 + y_2^2 - y_3; \\ y'_2 = x + y_1 + y_2y_3; \\ y'_3 = y_1y_2y_3; \\ y_1(0) = 2, y_2(1) = 0, y_3(0) = 1, \end{cases}$$

no sería un problema de condiciones iniciales, ya que conocemos y_2 en 1 e y_1 e y_3 en 0.

Para el caso de los problemas de condiciones iniciales para sistemas de ecuaciones diferenciales tenemos el siguiente resultado análogo al de ecuaciones diferenciales de orden uno, cuya prueba puede verse en [Jim], aunque pensamos que ésta es de un nivel excesivo para alumnos de primer curso.

Theorem 1 *Sea el problema de condiciones iniciales*

$$\begin{cases} y'_1 = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ y'_2 = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ \vdots \\ y'_m = f_m(x, y_1, y_2, \dots, y_m); \\ y_1(x_0) = y_1, y_2(x_0) = y_2, \dots, y_m(x_0) = y_m \end{cases}$$

donde $(x_0, y_1, \dots, y_m) \in A$, $f_i : A \subseteq \mathbb{R}^{1+m} \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq i \leq m$, son funciones reales continuas en el abierto A . Supongamos además que las funciones $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$ existen y son continuas en A . Entonces existe una solución del problema de condiciones iniciales anterior $y_i : I \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq i \leq m$, definido en un intervalo abierto I de la recta real.

Este resultado es fácil de aplicar. Por ejemplo el problema que consideramos anteriormente

$$\begin{cases} y'_1 = xy_1 + y_2^2 - y_3; \\ y'_2 = x + y_1 + y_2y_3; \\ y'_3 = y_1y_2y_3; \\ y_1(0) = 2, y_2(0) = 0, y_3(0) = 1, \end{cases}$$

es tal que $f_1(x, y_1, y_2, y_3) = xy_1 + y_2^2 - y_3$, $f_2(x, y_1, y_2, y_3) = x + y_1 + y_2y_3$ y $f_3(x, y_1, y_2, y_3) = y_1y_2y_3$ son funciones definidas en \mathbb{R}^4 , continuas y las derivadas parciales de cada función respecto de y_1 , y_2 e y_3 son continuas. Entonces este problema de condiciones iniciales tiene solución única, aunque no tengamos ni idea de cómo calcularla.

El Teorema 1 tiene una aplicación inmediata a los problemas de condiciones iniciales de orden n . Por ejemplo, consideremos el problema

$$\begin{cases} y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{n-1}); \\ y(x_0) = y_0; \\ y'(x_0) = y'_0; \\ \vdots \\ y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{n-1}, \end{cases}$$

y introduzcamos las variables $y_1 = y$, $y_2 = y'$, $y_3 = y''$, ..., $y_n = y^{n-1}$, con las que el sistema anterior queda como

$$\begin{cases} y'_1 = y_2; \\ y'_2 = y_3; \\ \vdots \\ y'_{n-1} = y_n; \\ y'_n = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n); \\ y_1(x_0) = y_0, y_2(x_0) = y'_0, \dots, y_n(x_0) = y_0^{n-1}, \end{cases}$$

y entonces el Teorema 1 nos garantiza la existencia y unicidad de soluciones siempre que la función f sea continua y de clase C^1 respecto de las variables y_1, \dots, y_n , es decir, la función y y sus $n-1$ primeras derivadas.

1.4 Modelos de la química descritos por una ecuación

1.4.1 Descomposición radioactiva

Consideremos un isótopo radioactivo del cual tenemos una cantidad $y(t)$ que varía con el tiempo t . Una sustancia radioactiva tiende a descomponerse con el tiempo formando nuevas sustancias y liberando a su vez una gran cantidad de energía. Se ha comprobado experimentalmente que la velocidad con que una sustancia radioactiva se descompone es directamente proporcional a la cantidad de sustancia existente en dicho instante, es decir, satisface la ecuación diferencial

$$y' = Ky$$

donde K es una constante que depende de la sustancia considerada. Esta ecuación es de variables separadas, y proporciona las soluciones

$$y(t) = Ce^{Kt},$$

con C la constante proveniente de la integración.

Se define la vida media de una sustancia radioactiva t_m , como el tiempo necesario para que una cantidad de dicha sustancia se reduzca a la mitad. Si tenemos una cantidad inicial de una sustancia N_0 , su vida media puede calcularse resolviendo primero el problema de condiciones iniciales

$$\left. \begin{array}{l} y' = Ky \\ y(0) = N_0 \end{array} \right\}$$

que proporciona la solución

$$y(t) = N_0 e^{Kt},$$

y posteriormente la ecuación

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{Kt_m},$$

con lo que la vida media es

$$t_m = -\frac{\log 2}{K}.$$

Como podemos observar, la vida media de la sustancia depende de la constante K , que es intrínseca de cada sustancia.

1.4.2 Ley de enfriamiento de Newton.

Los contenidos de esta sección pueden verse en [NaSa]. Supongamos que tenemos un cuerpo inerte que no produce calor de manera autosuficiente, cómo por ejemplo el agua, una piedra o un reloj. De observaciones experimentales se sabe que la temperatura superficial de dicho cuerpo varía con una rapidez proporcional a la diferencia de temperatura entre el objeto y su entorno. Es decir, si denotamos por $y(t)$ la temperatura del cuerpo con el tiempo, ésta verifica la ecuación diferencial

$$y' = K(T - y),$$

donde K es una constante de proporcionalidad y T es la temperatura ambiente en ese momento. Dicho comportamiento es conocido cómo la ley de enfriamiento de Newton. Por ejemplo, si servimos una taza de café a una temperatura de 95^0C y al minuto está a 85^0C , y suponiendo que la habitación está a 20^0C , ¿cuándo podremos tomar el café si la temperatura idónea para tomarlo es de 65^0C ? Para responder a esta pregunta, basta con resolver el problema de condiciones iniciales

$$\left. \begin{array}{l} y' = K(20 - y) \\ y(0) = 95. \end{array} \right\}$$

Obtenemos la solución de la ecuación diferencial, que es de variables separadas calculando

$$\int \frac{y'(t)}{20 - y(t)} dt = \int K dt,$$

que nos proporciona la solución

$$y(t) = C e^{-Kt} + 20,$$

donde K es una constante proveniente de la integración. Imponiendo ahora que $y(0) = 95$, calculamos dicha constante resolviendo la ecuación

$$95 = y(0) = C + 20,$$

con lo que $C = 75$. Por otra parte, como al minuto de haber servido el café la temperatura de éste había descendido hasta los $85^{\circ}C$ tenemos que

$$85 = y(1) = 75e^{-K} + 20,$$

que permite obtener el valor de la constante $K = \log(13/15)$. La función

$$y(t) = 75e^{t\log(13/15)} + 20$$

define entonces la evolución de la temperatura de la taza de café con el tiempo. Para averiguar el momento en el cual la temperatura de dicha taza es de $65^{\circ}C$ basta resolver la ecuación

$$65 = 75e^{t\log(13/15)} + 20,$$

que da la solución

$$t = \frac{\log(9/15)}{\log(13/15)} = 3.57 \text{ minutos.}$$

Es decir, aproximadamente unos tres minutos y medio después de haber servido el café.

Aplicación a la climatización de edificios

Supongamos que tenemos un edificio que en un principio vamos a considerar como una unidad, es decir, no vamos a tener en cuenta el número de habitaciones que tiene (ya veremos posteriormente este caso). Si $T(t)$ es la temperatura del edificio vacío en un instante de tiempo t y $E(t)$ es la temperatura en el exterior (que puede ser variable), la ley de Newton afirma que

$$T'(t) = K(E(t) - T(t)).$$

Si suponemos constante $E(t) = E_0$, entonces la ecuación puede escribirse como

$$T'(t) = \frac{dT}{dt}(t) = \frac{d}{dt}(T(t) - E_0) = -K(T(t) - E_0),$$

que nos proporciona la solución

$$T(t) - E_0 = ce^{-Kt}; \quad c \in \mathbb{R}.$$

Si $T(0)$ es la temperatura inicial del edificio $c = T(0) - E_0$ y la solución es

$$T(t) - E_0 = (T(0) - E_0)e^{-Kt}.$$

El tiempo que transcurre desde el valor $T(0) - E_0$ hasta el valor $(T(0) - E_0)/e$ es $t_0 = 1/K$, que recibe el nombre de constante de tiempo del edificio, y que suele medirse en horas. Un valor normal para un edificio cerrado oscila entre la 2 y las 4 horas para la constante $1/K$.

Si el edificio no está vacío se produce un calentamiento adicional debido al calor corporal, luces, máquinas en funcionamiento, etcétera, cuya razón denotaremos por $H(t)$. Si adicionalmente el edificio dispone de un sistema de calefacción o de aire acondicionado, se produce un aumento o disminución de la temperatura que denotaremos por $U(t)$. Entonces, la ecuación anterior queda como

$$T'(t) = K(E(t) - T(t)) + H(t) + U(t),$$

que escribiéndola como

$$T'(t) = -KT(t) + (KE(t) + H(t) + U(t))$$

vemos claramente que es lineal.

Example 1 Supongamos una mañana de sábado caluroso que en una tienda, mientras las personas están trabajando el aire acondicionado mantiene la temperatura de la tienda a 20°C . A mediodía se apaga el aparato de aire acondicionado y la gente se va a sus casas. La temperatura exterior permanece constante a 35°C . Si la constante de tiempo del edificio es de 4 horas, ¿cuál será la temperatura del edificio a las 2 de la tarde? ¿En qué momento la temperatura en el interior será de 27°C ?

Para responder a esta pregunta planteamos la ecuación diferencial

$$T'(t) = \frac{1}{4}(35 - T(t)),$$

dado que $H(t) = U(t) = 0$, junto con la condición inicial $T(0) = 20$, que se corresponde con la temperatura al mediodía. La solución de la ecuación diferencial será

$$T(t) = ce^{-t/4} + 35,$$

y con la condición inicial obtenemos c que nos proporciona la solución

$$T(t) = -15e^{-t/4} + 35.$$

Así a las dos de la tarde la temperatura será de

$$T(2) = -15/\sqrt{e} + 35 \simeq 25.9^{\circ}\text{C}.$$

El momento t_0 en que la temperatura será de 27°C se obtendrá al resolver la ecuación

$$27 = -15e^{-t_0/4} + 35,$$

que nos da

$$t_0 = -4 \log \frac{8}{15} \simeq 2.51 \text{ horas}$$

es decir, aproximadamente a la 2 horas y media.

Example 2 Un calentador solar de agua consta de un tanque de agua y un panel solar. El tanque se encuentra bien aislado y tiene una constante de tiempo de 64 horas. El panel solar genera 2000 kilocalorías por hora durante el día y el tanque tiene una capacidad calorífica de 2°C por cada 1000 kilocalorías. Si el agua se encuentra inicialmente a 30°C y la temperatura ambiente es de 20°C , ¿cuál será la temperatura del tanque al cabo de 12 horas de luz solar?

En este caso

$$U(t) = 2^{\circ}\text{C}/1000 \text{ Kcal} \times 2000 \text{ Kcal/h} = 4^{\circ}\text{C}/\text{h},$$

con lo que la ecuación diferencial que modeliza el fenómeno es

$$T'(t) = \frac{1}{64}(20 - T(t)) + 4,$$

junto con la condición inicial $T(0) = 30^{\circ}\text{C}$. La solución de dicha ecuación diferencial es

$$T(t) = ce^{-t/64} + 276,$$

de donde la solución del problema de condiciones iniciales es

$$T(t) = -246e^{-t/64} + 276.$$

Al cabo de 12 horas la temperatura del agua del tanque es

$$T(12) = 72.06^{\circ}\text{C}.$$

1.4.3 Problemas de mezclas químicas.

Las ecuaciones diferenciales también tienen aplicación dentro de los problemas de mezclas. En estos problemas aparecen involucradas sustancias, las cuales se mezclan dentro de un recipiente de volumen dado V_0 . Supongamos que inicialmente teníamos una cantidad de X_0 kilogramos de una sustancia diluida en una concentración de $X_0/V_0 \text{ Kg/m}^3$, y que introducimos otra solución que contiene una concentración $b \text{ Kg/m}^3$ de dicha sustancia la cual es introducida en el recipiente a una velocidad de $e \text{ m}^3/\text{sg}$. Además sacamos parte de la solución que se produce dentro del recipiente a una velocidad de $f \text{ m}^3/\text{sg}$. Si denotamos por $y(t)$ la cantidad de sustancia en cuestión dentro del recipiente por unidad de tiempo, tenemos que la variación de dicha cantidad viene dada por

$$y' = v_e - v_s,$$

donde v_e y v_s son las velocidades de entrada y salida de dicha sustancia respectivamente. Como $v_e = be \text{ Kg/sg}$ y $v_s = f \cdot y(t)/V(t) \text{ Kg/sg}$ donde $V(t) = V_0 + et - ft$ es el volumen de disolución en el recipiente por unidad de tiempo, el problema de condiciones iniciales

$$\left. \begin{array}{l} y' = be - \frac{y}{V_0+et-ft} f \\ y(0) = X_0 \end{array} \right\}$$

modeliza la cantidad de sustancia que hay en el recipiente por unidad de tiempo.

Por ejemplo, supongamos una tanque que contiene originalmente 400 litros de agua limpia. Vertemos en el tanque agua que contiene 0.05 kilogramos de sal por litro a una velocidad de 8 litros por minuto, y se deja que la mezcla salga del recipiente a la misma rapidez. Vamos a determinar la cantidad de sal que habrá en el recipiente al cabo de 20 minutos. Para ello, teniendo en cuenta que el volumen se mantiene constante, planteamos el problema de condiciones iniciales

$$\left. \begin{array}{l} y' = 0.4 - \frac{y}{400} \\ y(0) = 0 \end{array} \right\}$$

La ecuación diferencial implicada es lineal. La ecuación homogénea $y' = \frac{y}{400}$ tiene por solución $y(t) = Ke^{t/400}$, donde K es la constante procedente de la integración. Por el método de variación de constantes calculamos la solución de la ecuación no homogénea imponiendo que $y(t) = K(t)e^{t/400}$ sea solución de la misma. Entonces

$$K'(t)e^{t/400} + K(t)\frac{e^{t/400}}{400} = 0,4 + K(t)\frac{e^{t/400}}{400},$$

con lo que

$$K(t) = 0.4 \int e^{-t/400} dt = -160e^{-t/400} + C.$$

Así la solución de la ecuación diferencial será

$$y(t) = -160 + Ce^{t/400}.$$

Además, como $y(0) = 0$, tenemos que

$$0 = -160 + C,$$

con lo que $C = 160$, y la solución del problema de condiciones iniciales es

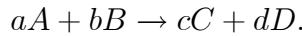
$$y(t) = 160(e^{t/400} - 1).$$

A los 20 minutos, la cantidad de sal que hay dentro del tanque es

$$y(20) = 160(e^{1/20} - 1) \simeq 8.20338 \text{ kilogramos.}$$

1.4.4 Cinética de las reacciones químicas

Esta sección esta obtenida de [MaMy]. Suponemos una reacción química de forma que dos reactivos A y B dan lugar a unos productos C y D , esquematizado como



Si denotamos por $[A]$ la concentración en moles por litro del reactivo A , se verifica que las velocidades de descomposición o formación de cada uno de los elementos de la reacción satisfacen la relación

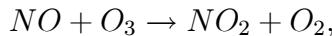
$$-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}.$$

Nótese que $\frac{d[A]}{dt}$ será negativo al estar desapareciendo el reactivo mientras que por ejemplo $\frac{d[C]}{dt}$ será positivo. La ley de velocidad diferencial establece que

$$-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = k[A]^n[B]^m,$$

donde n y m son enteros positivos o la mitad de números enteros positivos. En general no puede establecerse una relación directa entre dichos números y los coeficientes estequiométricos a y b . La constante k recibe el nombre de constante de reacción.

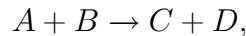
No obstante, hay reacciones que se llaman elementales, como



en las cuales dos moléculas chocan para dar lugar a los productos, y en las que los número n y m son iguales a uno, es decir, podemos escribir que

$$-\frac{d[NO]}{dt} = \frac{d[NO_2]}{dt} = k[NO_2][O_2].$$

A modo de ejemplo, consideremos la reacción elemental



supongamos que inicialmente hay cuatro y dos moles/litro de cada reactivo, y que al cabo de una hora tenemos un mol/litro de C . Vamos a determinar la cantidad de producto C que tendremos a las 2 horas. Denotemos por $x(t)$ la concentración de C en cada instante. Dado que

$$-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt},$$

las concentraciones de los reactivos son $4 - x(t)$ y $2 - x(t)$, respectivamente. Por otra parte, la ecuación

$$\frac{d[C]}{dt} = k[A][B],$$

se reduce a

$$x' = k(4 - x)(2 - x),$$

siendo $x(0) = 0$. Resolvemos la ecuación diferencial

$$\frac{1}{2} \log \frac{x(t) - 4}{x(t) - 2} = \int \frac{x'(t) dt}{(4 - x(t))(2 - x(t))} = \int k dt = kt + c,$$

y de la condición inicial $x(0) = 0$, tenemos que

$$c = \frac{1}{2} \log 2.$$

Por otra parte, como $x(1) = 1$, tenemos que

$$\frac{1}{2} \log 3 = k + \frac{1}{2} \log 2,$$

por lo que la constante de la reacción es

$$k = \frac{1}{2} \log \frac{3}{2}.$$

Entonces

$$\log \frac{x(t) - 4}{x(t) - 2} = t \log \frac{3}{2} + \log 2 = \log \left(2 \left(\frac{3}{2} \right)^t \right),$$

de donde

$$x(t) = 4 \frac{1 - \left(\frac{3}{2} \right)^t}{1 - 2 \left(\frac{3}{2} \right)^t},$$

y por lo tanto

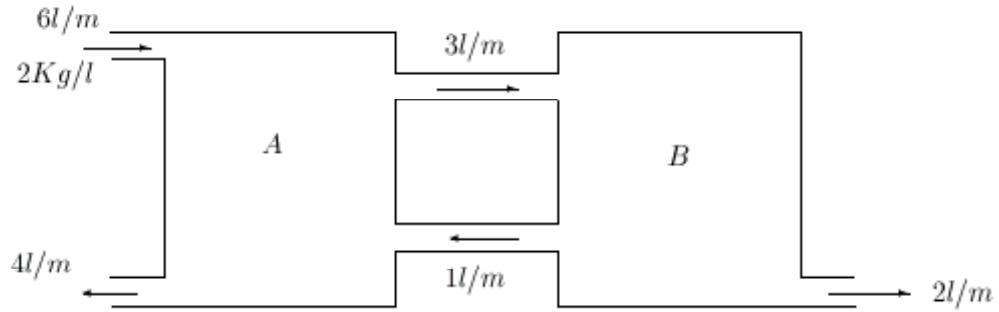
$$x(2) = 4 \frac{1 - \left(\frac{3}{2} \right)^2}{1 - 2 \left(\frac{3}{2} \right)^2} = \frac{10}{7} \text{ moles/litro.}$$

1.5 Modelos de la química descritos por un sistema de ecuaciones

1.5.1 Problemas de mezclas con varios recipientes

Supongamos que tenemos dos recipientes conteniendo ambos una cierta sustancia en disolución. Podemos pensar por ejemplo en agua salada. Los recipientes están conectados entre sí, de manera que puede pasar cierta cantidad de sustancia de un recipiente al otro y viceversa. Además, cada recipiente puede estar en contacto con el exterior, permitiendo que entren sustancias del exterior y dejando salir también sustancias de los recipientes al exterior. En este tipo de problemas se trata de determinar la concentración de sustancia disuelta en cada recipiente. Consideremos el siguiente ejemplo.

Example 3 Dos grandes tanques, cada uno con 100 litros de líquido se encuentran interconectados por medio de tubos. El líquido fluye del tanque A (ver dibujo posterior) hacia el tanque B a razón de $3 l/m$ y de B hacia A a razón de $1 l/m$. El líquido contenido en el interior de cada tanque se mantiene bien agitado. Una solución de salmuera con una concentración de $2 Kg/l$ fluye del exterior hacia el tanque A a razón de $6 l/m$. La solución (diluida) fluye hacia el exterior del tanque A a razón de $4 l/m$ y del tanque B a $2 l/m$. Si inicialmente el tanque A contenía agua pura y el B 200 kg de sal, determinar la cantidad de sal en cada instante.



Para resolver el problema, llamemos $x(t)$ e $y(t)$ las cantidades de sal en cada instante en los tanques A y B, respectivamente. Recordemos los problemas de mezclas con un único recipiente vistos anteriormente. De estos problemas, vemos que la variación de la cantidad de sal en A es

$$x'(t) = v_e - v_s$$

donde v_e es la velocidad de entrada de sal y v_s es la velocidad de salida. Para el caso del tanque A se tiene que

$$v_e = 6 l/m \cdot 2 Kg/l + 1 l/m \cdot \frac{y(t)}{100} Kg/l$$

y

$$v_s = 4 l/m \cdot \frac{x(t)}{100} Kg/l + 3 l/m \cdot \frac{x(t)}{100} Kg/l = 7 l/m \cdot \frac{x(t)}{100} Kg/l$$

de donde obtenemos la ecuación diferencial

$$x'(t) = -\frac{7}{100}x(t) + \frac{1}{100}y(t) + 12.$$

Procediendo de igual manera con el tanque B se tiene que

$$y'(t) = v_e - v_s$$

donde ahora

$$v_e = 3 l/m \cdot \frac{x(t)}{100} Kg/l$$

y

$$v_s = 1 l/m \cdot \frac{y(t)}{100} Kg/l + 2 l/m \cdot \frac{y(t)}{100} Kg/l = 3 l/m \cdot \frac{y(t)}{100} Kg/l,$$

de donde obtenemos la ecuación

$$y'(t) = \frac{3}{100}x(t) - \frac{3}{100}y(t),$$

y por consiguiente el problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} x'(t) = -\frac{7}{100}x(t) + \frac{1}{100}y(t) + 12, \\ y'(t) = \frac{3}{100}x(t) - \frac{3}{100}y(t), \\ x(0) = 0; y(0) = 200. \end{cases}$$

El sistema es no autónomo, y puede escribirse de forma matricial como

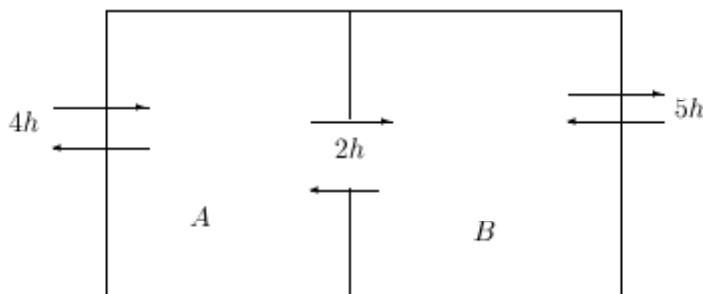
$$\begin{pmatrix} x'(t) \\ y'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{7}{100} & \frac{1}{100} \\ \frac{3}{100} & -\frac{3}{100} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 12 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dejamos la resolución del sistema al alumno. Otros problemas de este tipo se propondrán al final del tema.

1.5.2 Climatización de edificios con varias estancias

Anteriormente vimos una aplicación de las ecuaciones diferenciales a la climatización de edificios con una sola estancia. Esta aplicación se basaba en la ley de enfriamiento de los cuerpos de Newton. Vamos a ver qué pasa si el edificio tiene más de una estancia, como el del siguiente ejemplo.

Example 4 Un edificio consta de dos zonas A y B (veáse la siguiente figura). La zona A es calentada por un calefactor que genera 80000 Kcal/h . La capacidad calorífica de la zona A es de $1/4^\circ\text{C}$ por cada 1000 Kcal . Las constantes de tiempo de transferencia de calor son entre la zona A y el exterior 4 horas, 2 horas entre las zonas A y B y 5 horas entre la zona B y el exterior. Si la temperatura exterior es de 0°C , determinar la temperatura de cada zona.



Para resolver el problema, llamemos $x(t)$ e $y(t)$ a las temperaturas de las zonas A y B, respectivamente. Entonces

$$x'(t) = \frac{1}{4}(0 - x(t)) + \frac{1}{2}(y(t) - x(t)) + U(t),$$

donde

$$U(t) = \frac{1}{4}^\circ\text{C}/1000 \text{ Kcal} \cdot 80.000 \text{ Kcal/h} = 20^\circ\text{C}/h,$$

de donde conseguimos la ecuación

$$x'(t) = -\frac{3}{4}x(t) + \frac{1}{2}y(t) + 20.$$

Por otra parte, para la zona B tenemos

$$y'(t) = \frac{1}{5}(0 - y(t)) + \frac{1}{2}(x(t) - y(t)),$$

con lo que tenemos el sistema

$$\begin{cases} x'(t) = -\frac{3}{4}x(t) + \frac{1}{2}y(t) + 20, \\ y'(t) = \frac{1}{2}x(t) - \frac{7}{10}y(t). \end{cases}$$

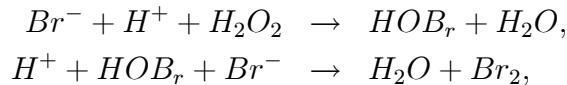
Dejamos la resolución del sistema al alumno. Otros ejemplos de este tipo serán estudiados en los ejercicios.

1.5.3 Cinética de las reacciones químicas

No todas las reacciones químicas son elementales, aunque la mayoría de éstas pueden describirse mediante varias de ellas. Por ejemplo, la reacción en solución acuosa

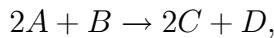


no es el resultado del choque simultáneo de dos iones hidrógeno, dos iones bromuro y una molécula de peróxido de hidrógeno (la probabilidad de que cinco especies estén en el mismo lugar al mismo tiempo es muy pequeña), por lo que el proceso sigue las dos etapas siguientes:

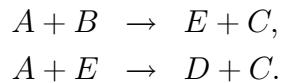


en ninguna de las cuales se produce la interacción de más de tres partículas. Otras reacciones pueden implicar muchos más pasos.

Consideremos ahora la reacción hipotética



de la que suponemos el siguiente mecanismo



Como sabemos de la primera reacción

$$-\frac{d[A_1]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C_1]}{dt} = \frac{d[E_1]}{dt} = k_1[A][B],$$

donde los subíndices indican la variación de cada substancia como consecuencia de la primera reacción. Por otra parte, de la segunda reacción

$$-\frac{d[A_2]}{dt} = -\frac{d[E_2]}{dt} = \frac{d[C_2]}{dt} = \frac{d[D]}{dt} = k_2[A][E].$$

Es obvio que

$$\begin{aligned}\frac{d[A]}{dt} &= \frac{d[A_1]}{dt} + \frac{d[A_2]}{dt}, \\ \frac{d[C]}{dt} &= \frac{d[C_1]}{dt} + \frac{d[C_2]}{dt}, \\ \frac{d[E]}{dt} &= \frac{d[E_1]}{dt} - \frac{d[E_2]}{dt}.\end{aligned}$$

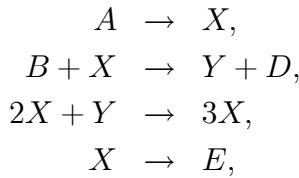
Entonces

$$\begin{aligned}-\frac{d[A]}{dt} &= k_1[A][B] + k_2[A][E] = [A](k_1[B] + k_2[E]), \\ \frac{d[E]}{dt} &= k_1[A][B] - k_2[A][E] = [A](k_1[B] - k_2[E]).\end{aligned}$$

Si suponemos que la concentración del elemento B permanece constante, tenemos un sistema de dos ecuaciones diferenciales. Se trataría de un sistema que no podríamos resolver analíticamente, aunque tendría solución.

La reacción del Brusselator

La reacción del Brusselator sigue el siguiente esquema



donde las concentraciones $[A]$, $[B]$, $[D]$ y $[E]$ son constantes y las concentraciones $[X]$ e $[Y]$ siguen la ley

$$\begin{aligned}\frac{d[X]}{dt} &= k_1[A] - k_2[B][X] + k_3[X]^2[Y] - k_4[X], \\ \frac{d[Y]}{dt} &= k_2[B][X] - k_3[X]^2[Y],\end{aligned}$$

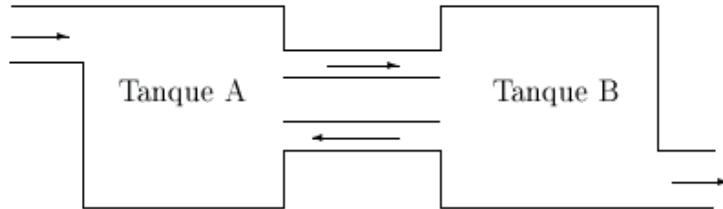
siendo k_i las constantes de reacción de las cuatro reacciones que definen la reacción global, y siendo las concentraciones iniciales de X e Y nulas (ver [McPo]). Este modelo da lugar a reacciones en las que no es predecible el comportamiento a largo plazo y que podríamos denominar “caóticos”.

1.6 Ejercicios

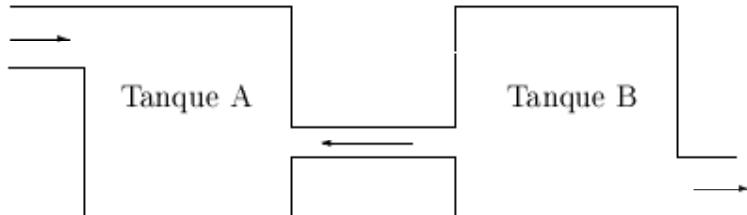
1. El isótopo radioactivo del Torio 234 se desintegra a una rapidez proporcional a la cantidad existente en ese instante de tiempo. Si 100 miligramos de este material se reducen a 82.04 miligramos en un semana, ¿cuánto Torio tendremos al cabo de tres semanas? ¿Cuánto tiempo tiene que transcurrir para que la cantidad de Torio se reduzca a la mitad?

2. De observaciones experimentales se sabe que la temperatura superficial de un objeto cambia con una rapidez proporcional a la diferencia de temperatura del objeto y su entorno. Este hecho es conocido como la ley de enfriamiento de Newton. Si la temperatura de una taza de café es de 95°C recién servida, y al minuto se enfrió a 88°C en un cuarto que está a 20°C , ¿cuánto tiempo debe de transcurrir para que se enfrie hasta los 65°C ?
3. Supongamos que decidís matar al profesor de ecuaciones diferenciales. Una vez perpetrado el hecho, se encuentra el cuerpo en el despacho del mismo que está a una temperatura de 20°C a las 6 de la tarde. La temperatura corporal de cadáver era de 35°C en dicho momento. Una hora más tarde la temperatura era de 33°C . ¿A qué hora se produjo el horripilante y brutal suceso?
4. Un tanque contiene originalmente 400 litros de agua limpia. Entonces se vierte en el tanque agua que contiene 0.05 kilogramos de sal por litro a una velocidad de 8 litros por minuto, y se deja que la mezcla salga del tanque con la misma rapidez. Determinar la sal que habrá en el tanque después de 20 minutos.
5. Un tanque contiene inicialmente 1000 litros de solución salina que contiene 10 Kg. de sal. Otra solución salina que contiene 25 Kg. de sal por litro se vierte en el tanque a la razón de $10 \text{ l}/\text{min}$ mientras que simultáneamente, la solución bien mezclada sale del tanque a razón de $15 \text{ l}/\text{min}$. Encontrar la cantidad de sal que hay en el tanque en un momento t .
6. En una galería subterránea de $15 \times 15 \times 1.2\text{m}$ hay un 0.2% de CO_2 , mientras que el aire del exterior tiene un 0.055% de CO_2 . Se instalan ventiladores que introducen en la galería 9 metros cúbicos de aire del exterior por minuto, de forma que por el otro extremo de la galería sale la misma cantidad de aire. ¿Qué concentración de CO_2 habrá al cabo de 20 minutos en la galería?
7. En una mañana de sábado, mientras las personas trabajan, un calefactor mantiene la temperatura interior de un edificio a 21°C . A mediodía se apaga el calentador y la gente regresa a casa. La temperatura exterior permanece constante a 12°C durante el resto de la tarde. Si la constante de tiempo del edificio es de 3 horas, ¿en qué momento la temperatura interior del edificio será de 16°C ?
8. Un taller mecánico sin calefacción ni aire acondicionado tiene una constante de tiempo de 2 horas. Si la temperatura exterior varía según la función $E(t) = 30 - 15 \cos(2\pi t/24)$, determinar la temperatura del taller a lo largo del día.
9. En un día caluroso con una temperatura exterior de 40°C , se enciende dentro de un edificio un aparato aire acondicionado que disipa 24000 kilocalorías por hora. El aprovechamiento es de medio grado por cada 1000 kilocalorías y la constante de tiempo del edificio es de 3 horas. Si inicialmente la temperatura del edificio era de 35°C , determinar la temperatura al cabo de 3 horas. ¿Cuál es el valor máximo de temperatura que puede tener el edificio en estas condiciones?
10. Dos tanques que contienen cada uno 50 litros de líquido se encuentran interconectados por medio de dos tubos. El líquido fluye del tanque A hacia el tanque B a razón de 4 litros por minuto y del tanque B al tanque A a 1 litro por minuto. El líquido contenido en cada tanque se mantiene perfectamente agitado. Hacia el tanque A entra del exterior agua a razón de 3 litros por minuto

y la solución fluye hacia el exterior por el tanque B a la misma velocidad. Si inicialmente el tanque A contiene 25 kilos de sal y el tanque B no contiene nada de sal, determinar la cantidad de sal en cada instante de tiempo.

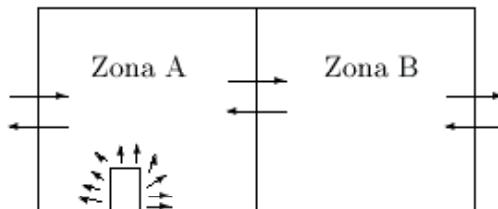


11. Dos grandes tanques, cada uno de 50 litros se encuentran interconectados por un tubo. El líquido fluye del tanque A hacia el B a razón de 5 litros por minuto. El líquido contenido en el interior de cada tanque se mantiene bien agitado. Una salmuera con concentración de 3 kilos por litro fluye del exterior hacia el tanque A a razón de 5 litros por minuto, saliendo hacia el exterior a la misma velocidad por un tubo situado en el tanque B. Si el tanque A contiene inicialmente 50 kilos de sal y el tanque B contiene 100 kilos, determinar la cantidad de sal en cada instante.

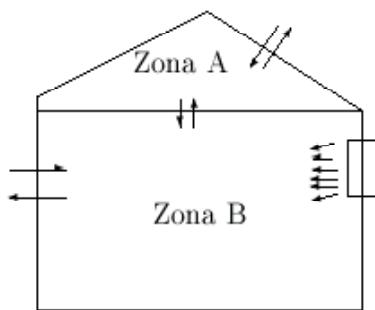


12. Un edificio consta de dos zonas A y B. Solamente la zona A es calentada por un calefactor, que genera 80.000 kilocalorías por hora. La capacidad calorífica de la zona A es de $1/4$ de grado Celsius por cada 1000 kilocalorías. Las constantes de transferencia de calor son 4 horas entre la zona A y el exterior, 5 horas entre la zona B y el exterior y 3 horas entre las dos zonas. Si la temperatura exterior es de 0 grados Centígrados, ¿a qué temperatura puede llegar a enfriarse la zona B?

Nota: las constantes de transferencia de calor son las inversas de las constantes que aparecen en la ley de enfriamiento de Newton.



13. Para fines de refrigeración una casa consta de dos zonas: la zona de ático A y la zona B o habitacional. El área habitacional es refrigerada por medio de una unidad de aire acondicionado de 2 toneladas que disipa 24000 kilocalorías por hora. La capacidad calorífica de la zona B es de $1/2$ grado centígrado por cada 1000 kilocalorías. La constantes de transferencia de calor son 2 horas entre la zona A y el exterior, 4 horas entre la zona B y el exterior y 4 horas entre ambas zonas. Si la temperatura exterior permanece a 40 grado centígrados, ¿a qué temperatura puede llegar a calentarse la zona del ático?



Capítulo 2

Métodos de un paso

Sumario. Métodos de Taylor. Métodos de Runge–Kutta: tablas de Butcher. Análisis del error global. Extrapolación de Richardson.

2.1 Introducción

Consideramos un problema de condiciones iniciales de la forma

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde la función $\mathbf{f} : \Omega \subseteq \mathbb{R}^{m+1} \rightarrow \mathbb{R}^m$ es suficiente regular para que dicho problema tenga solución única. Por ejemplo, \mathbf{f} y $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial y_i}$, $i = 1, \dots, m$ continuas. Sin embargo, dada un problema de condiciones iniciales arbitrario, es muy posible que no sepamos cómo hallar dicha solución. Basta considerar el problema

$$\begin{cases} y' = e^{y^2}, \\ y(0) = 4. \end{cases}$$

Es por ello importante determinar métodos que permitan obtener aproximaciones de dichas soluciones, que existen, pero son desconocidas.

En esencia, dado el problema (2.1), denotemos su solución por $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ y buscamos cómo aproximar el valor de $\mathbf{y}(t_f; t_0, \mathbf{y}_0)$, para un cierto $t_f > t_0$ (análogamente se haría para $t_f < t_0$). Los métodos que vamos a estudiar consisten en generar una sucesión $\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n$ de manera que \mathbf{y}_n sea un valor aproximado de $\mathbf{y}(t_f; t_0, \mathbf{y}_0)$. Vamos a ver en este tema varias maneras de construir dicha sucesión.

2.2 Métodos de Taylor

Este método se basa en suponer que la solución $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ es suficientemente diferenciable en un entorno de t_0 . Si t_1 está en dicho entorno y denotando $h = t_1 - t_0$, entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0) &= \mathbf{y}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{1}{1!} \mathbf{y}'(t_0; t_0, \mathbf{y}_0)h + \frac{1}{2!} \mathbf{y}''(t_0; t_0, \mathbf{y}_0)h^2 + \dots + \\ &\quad + \frac{1}{n!} \mathbf{y}^{(n)}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0)h^n + \mathcal{O}(h^n), \end{aligned}$$

donde $\mathcal{O}(h^n)$ es denota una función $g(h)$ para la cual existe una constante positiva k tal que $|g(h)| \leq k|h^n|$. Entonces

$$\begin{aligned}\mathbf{y}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) &= \mathbf{y}_0, \\ \mathbf{y}'(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) &= \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{y}''(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) &= \frac{d}{dt} \mathbf{y}'(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) = \frac{d}{dt} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) \mathbf{y}'(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0),\end{aligned}$$

donde por $\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0)$ denotamos el gradiente de $\mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0)$.

$$\begin{aligned}\mathbf{y}^{3)}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) &= \frac{d}{dt} \mathbf{y}''(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) = \frac{d}{dt} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) \mathbf{y}'(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \mathbf{f}_3(t_0, \mathbf{y}_0).\end{aligned}$$

Inductivamente, si $\mathbf{y}^{n-1)}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{f}_{n-1}(t_0, \mathbf{y}_0)$, entonces

$$\begin{aligned}\mathbf{y}^n(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) &= \frac{d}{dt} \mathbf{y}^{n-1)}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) = \frac{d}{dt} \mathbf{f}_{n-1}(t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_{n-1}(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_{n-1}(t_0, \mathbf{y}_0) \mathbf{y}'(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_{n-1}(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}_{n-1}(t_0, \mathbf{y}_0) \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \mathbf{f}_n(t_0, \mathbf{y}_0).\end{aligned}$$

Así, sustituyendo en la fórmula original

$$\begin{aligned}\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0) &= \mathbf{y}_0 + \frac{1}{1!} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) h + \frac{1}{2!} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) h^2 + \dots + \\ &\quad + \frac{1}{n!} \mathbf{f}_n(t_0, \mathbf{y}_0) h^n + \mathcal{O}(h^n),\end{aligned}$$

con lo que

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{1}{1!} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) h + \frac{1}{2!} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) h^2 + \dots + \frac{1}{n!} \mathbf{f}_n(t_0, \mathbf{y}_0) h^n$$

es una aproximación de $\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0)$, esto es

$$\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0) \approx \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{1}{1!} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) h + \frac{1}{2!} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) h^2 + \dots + \frac{1}{n!} \mathbf{f}_n(t_0, \mathbf{y}_0) h^n. \quad (2.2)$$

Veamos qué forma particular tiene esta aproximación para diferentes valores de n .

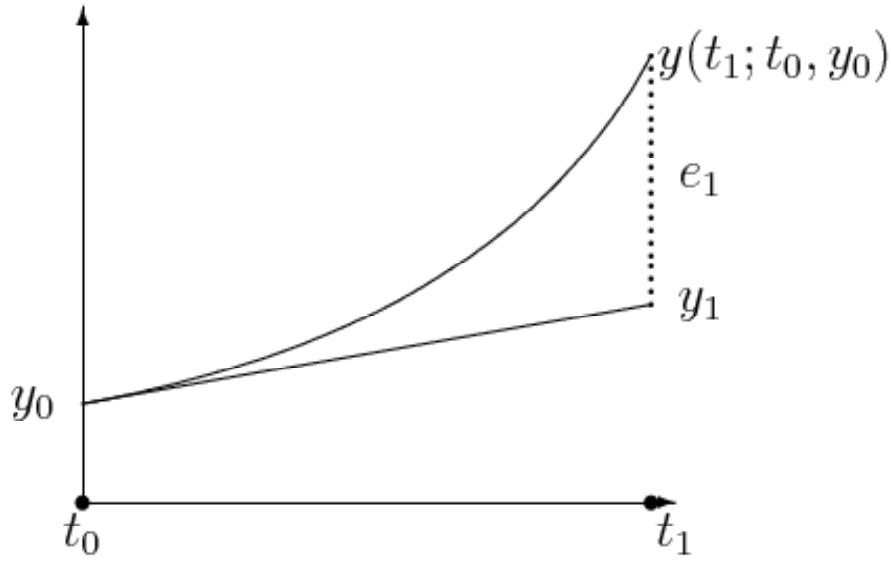


Figura 2.1: El método de Euler. El error e_1 es $|y_1 - y(t_1; t_0, y_0)|$.

2.2.1 Método de Euler

El método de Taylor con $n = 1$, recibe el nombre de método de Euler y fue quizás el primer método numérico generado mucho antes de la existencia de ordenadores. Como vemos, la expresión (2.2) queda de la forma

$$\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0) \approx \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{1}{1!} \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) h, \quad (2.3)$$

y tiene un claro significado geométrico. Imaginemos que $m = 1$, es decir, se trata de una ecuación diferencial. Entonces la recta tangente de la solución $y(t; t_0, y_0)$ para $t = t_0$ tiene la forma

$$y - y(t_0; t_0, y_0) = y'(t_0; t_0, y_0)(t - t_0),$$

y sustituyendo cada elemento de la expresión anterior por su valor obtenemos

$$y - y_0 = f(t_0, y_0)(t - t_0).$$

Si sustituimos t por t_1 en la recta anterior obtenemos

$$y(t_1; t_0, y_0) \approx y_1 = y_0 + f(t_0, y_0)h,$$

que es la expresión (2.3) para ecuaciones de dimensión uno. La figura 2.1 nos muestra gráficamente el método.

Veamos cómo funciona el método de Euler con un ejemplo. Consideremos el problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

que como sabemos, tiene por solución $y(t; 0, 1) = e^t$. Tomemos $t_1 = 0.1$, y estimemos por el método de Euler $y(0.1; 0, 1)$. Como $h = 0.1$, entonces

$$y_1 = y_0 + y_0 h = 1 + 0.1 = 1.1.$$

Como vemos, el error cometido

$$e_1 = |y(0.1; 0, 1) - y_1| = |e^{0.1} - 1.1| \approx 0.00517092.$$

Si ahora, tomamos $t_1 = 1$, entonces $h = 1$ e

$$y_1 = y_0 + y_0 h = 1 + 1 = 2,$$

y el error

$$e_1 = |y(1; 0, 1) - y_1| = |e - 2| \approx 0.718282,$$

esto es, el error aumenta considerablemente.

Esto se debe a que estamos tomando aproximaciones locales. Para reducir el error se procede de la siguiente manera. Tomamos una partición \mathcal{P} del intervalo $[t_0, t_f]$, esto es $\mathcal{P} = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n = t_f$. Definimos $h_i = t_{i+1} - t_i$, $i = 0, 1, \dots, n-1$. Construimos la sucesión \mathbf{y}_n de la siguiente manera

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)h_0.$$

Ahora bien, \mathbf{y}_1 es una aproximación de $\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0)$. Para construir \mathbf{y}_2 , tomamos la aproximación mediante el método de Euler del problema

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_1) = \mathbf{y}_1, \end{cases}$$

dado por

$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 + \mathbf{f}(t_1, \mathbf{y}_1)h_1,$$

y de forma recurrente para $i = 1, \dots, n$,

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h_{i-1}.$$

En general, suele tomarse $h_i = h$, $i = 0, 1, \dots, n-1$, cantidad que suele llamarse tamaño de paso y n el número de pasos. En este caso el método de Euler queda como

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h = \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{f}(t_0 + (i-1)h, \mathbf{y}_{i-1})h,$$

para $i = 1, \dots, n$.

En el ejemplo anterior, tomamos $h = 0.1$ y calculamos

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + f(0, y_0)h = 1 + 1 \cdot 0.1 = 1.1, \\ y_2 &= y_1 + f(h, y_1)h = 1.1 + 1.1 \cdot 0.1 = 1.21, \\ y_3 &= y_2 + f(2h, y_2)h = 1.21 + 1.21 \cdot 0.1 = 1.331, \\ y_4 &= y_3 + f(3h, y_3)h = 1.331 + 1.331 \cdot 0.1 = 1.4641, \\ y_5 &= y_4 + f(4h, y_4)h = 1.4641 + 1.4641 \cdot 0.1 = 1.61051, \\ y_6 &= y_5 + f(5h, y_5)h = 1.61051 + 1.61051 \cdot 0.1 = 1.77156, \\ y_7 &= y_6 + f(6h, y_6)h = 1.77156 + 1.77156 \cdot 0.1 = 1.94872, \\ y_8 &= y_7 + f(7h, y_7)h = 1.94872 + 1.94872 \cdot 0.1 = 2.14359, \\ y_9 &= y_8 + f(8h, y_8)h = 2.14359 + 2.14359 \cdot 0.1 = 2.35795, \\ y_{10} &= y_9 + f(9h, y_9)h = 2.35795 + 2.35795 \cdot 0.1 = 2.59374, \end{aligned}$$

y ahora los errores son

$$e_i = |e^{i*0.1} - y_i|,$$

para $i = 1, \dots, 10$, que nos da la siguiente tabla aproximada

e_1	e_2	e_3	e_4	e_5	e_6	e_7	e_8	e_9	e_{10}
0.005	0.011	0.019	0.028	0.038	0.051	0.065	0.082	0.102	0.125

Como vemos, el error ha disminuido notablemente, a pesar de que en los pasos intermedios la aproximación del método de Euler no coincide en su condición inicial con la solución del problema de condiciones original. Vemos no obstante que los errores se van acumulando desde e_1 hasta e_{10} , de manera que estos van creciendo. Sin embargo, si disminuimos el tamaño de paso, vemos en la siguiente tabla como los errores al final dismuyen

$h = 1$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$	$h = 0.0001$	$h = 0.00001$
0.718	0.125	0.013	0.001	0.00014	0.000014

Como vemos, al dividir el tamaño de paso h por diez, el error final aproximadamente también hace esta operación. Veremos posteriormente una explicación a este hecho.

2.2.2 Método de Taylor de orden 2

Si hacemos $n = 2$, observamos que el método de Taylor queda de la siguiente forma:

$$\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0) \approx \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{1}{1!} \mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0)h + \frac{1}{2!} \mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0)h^2,$$

y dado que

$$\mathbf{f}_1(t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$$

y

$$\mathbf{f}_2(t_0, \mathbf{y}_0) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) + \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0),$$

se puede reescribir como

$$\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0) \approx \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) + \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \right) h^2.$$

Si dividimos el intervalo $[t_0, t_f]$ en n intervalos igualmente espaciados siendo el tamaño de paso $h = (t_f - t_0)/n$, el valor $\mathbf{y}(t_f; t_0, \mathbf{y}_0)$ con \mathbf{y}_n , que puede estimarse con la recurrencia

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_i &= \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{f}(t_0 + (i-1)h, \mathbf{y}_{i-1})h \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_0 + (i-1)h, \mathbf{y}_{i-1}) + \mathbf{f}(t_0 + (i-1)h, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_0 + (i-1)h, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h^2, \end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, n$.

Si consideramos el problema de condiciones iniciales anterior

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

tenemos que $f(t, y) = y$, por lo que $\frac{\partial f}{\partial t}(t, y) = 0$ y $\frac{\partial f}{\partial y}(t, y) = 1$, y así la recurrencia anterior se expresa de la forma

$$y_i = y_{i-1} + y_{i-1}h + \frac{1}{2}y_{i-1}h^2 = \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_{i-1},$$

para $i = 1, \dots, n$. Tomando $h = 0.1$ ($n = 10$) y calculando obtenemos

$$\begin{aligned} y_1 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_0 = 1.105, \\ y_2 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_1 = 1.22103, \\ y_3 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_2 = 1.34923, \\ y_4 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_3 = 1.4909, \\ y_5 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_4 = 1.64745, \\ y_6 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_5 = 1.82043, \\ y_7 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_6 = 2.01157, \\ y_8 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_7 = 2.22279, \\ y_9 &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_8 = 2.45618, \\ y_{10} &= \left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right)y_9 = 2.71408, \end{aligned}$$

y ahora los errores son

$$e_i = |e^{i*0.1} - y_i|,$$

para $i = 1, \dots, 10$, que nos da la siguiente tabla aproximada

e_1	e_2	e_3	e_4	e_5	e_6	e_7	e_8	e_9	e_{10}
0.00017	0.0004	0.0006	0.0009	0.0013	0.0017	0.0022	0.0028	0.0034	0.0042

Como vemos, el error decrece notablemente en comparación al obtenido al aplicar el método de Euler. Además, los errores para diferentes tamaños de paso son

$h = 1$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$	$h = 0.0001$	$h = 0.00001$
0.2183	0.0042	0.000045	$4.5 \cdot 10^{-7}$	$4.5 \cdot 10^{-9}$	$4.5 \cdot 10^{-11}$

Como vemos, se mejora notablemente el error con respecto al método de Taylor, siendo éste además de orden dos, es decir, al dividir por 10 el tamaño de paso, el error es aproximadamente el del paso anterior al cuadrado.

Aumentando el orden del método de Taylor, seguimos disminuyendo el error producido. Sin embargo, el método de Taylor presenta el problema de que hay que derivar sucesivamente las funciones que determinan la ecuación o sistema de ecuaciones diferenciales, y esto frecuentemente no es tarea fácil. Además, en el caso del ejemplo anterior para la ecuación $y' = y$, el incremento del orden no mejora el algoritmo dado que $f_m(t, y) = 0$ para $m \geq 3$. Veamos a continuación una familia de métodos que presentan un avance en este sentido, y que se conocen como métodos de Runge–Kutta.

2.3 Métodos de Runge–Kutta de orden dos

Este método se basa en la ecuación integral asociada al problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

que se construye de la siguiente manera. Como $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ es solución

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}(t_0; t_0, \mathbf{y}_0) &= \mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}_0 \\ &= \int_{t_0}^t \mathbf{y}(s; t_0, \mathbf{y}_0) ds = \int_{t_0}^t \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s; t_0, \mathbf{y}_0)) ds. \end{aligned}$$

Entonces, dicha función puede calcularse a partir de la ecuación integral

$$\mathbf{y}(t) - \mathbf{y}_0 = \int_{t_0}^t \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s)) ds.$$

Los métodos de Runge–Kutta se basan en obtener aproximaciones de la integral

$$\int_{t_0}^t \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s)) ds$$

mediante algún método de integración numérica apropiado.

A modo de primer ejemplo, supongamos que dicha integral se aproxima mediante el método del trapecio, esto es

$$\int_{t_0}^{t_f} \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s)) ds \approx \frac{h}{2} [\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}(t_0)) + \mathbf{f}(t_f, \mathbf{y}(t_f))],$$

siendo $h = t_f - t_0$. El valor $\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}(t_0)) = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$ es conocido. Sin embargo $\mathbf{f}(t_f, \mathbf{y}(t_f))$ es desconocido dado que $\mathbf{y}(t_f) = \mathbf{y}(t_f; t_0, \mathbf{y}_0)$ es precisamente el valor que tenemos que aproximar mediante el método. Para obtener un valor aproximado de dicho valor para poder aplicar el método, obtenemos éste por un algoritmo de los estudiados anteriormente para tamaño de paso h , por ejemplo

$$\mathbf{y}_1^* = \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0),$$

que es el método de Euler. Entonces

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{h}{2} [\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) + \mathbf{f}(t_f, \mathbf{y}_1^*)],$$

será la aproximación de $\mathbf{y}(t_f; t_0, \mathbf{y}_0)$ que buscábamos. Si tomamos un tamaño de paso $h = (t_f - t_0)/n$, se tiene que de forma compacta

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{i+1}^* &= \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0 + ih, \mathbf{y}_i), \\ \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_0 + \frac{h}{2} [\mathbf{f}(t_0 + ih, \mathbf{y}_i) + \mathbf{f}(t_0 + (i+1)h, \mathbf{y}_{i+1}^*)]\end{aligned}$$

que se conoce como método de Heun. Como vemos, hay dos etapas, una inicial donde se calcula \mathbf{y}_i^* y otra posterior donde ya se obtiene la aproximación propiamente dicha. Por ello, se dice que es un método de Runge–Kutta de dos etapas, y como veremos posteriormente de orden dos. Suele escribirse de forma más compacta como

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + h, \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{g}_1), \\ \mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{2}(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2). \end{cases}$$

Veamos cómo se implementa este método en nuestro ejemplo de costumbre

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Los valores que obtenemos para tamaño de paso $h = 0.1$ son

$$\begin{aligned}&\begin{cases} y_1^* = (1+h)y_0 = 1.1, \\ y_1 = y_0 + \frac{h}{2}(y_0 + y_1^*) = 1.105, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_2^* = (1+h)y_1 = 1.2155, \\ y_2 = y_1 + \frac{h}{2}(y_1 + y_2^*) = 1.22103, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_3^* = (1+h)y_2 = 1.34313, \\ y_3 = y_2 + \frac{h}{2}(y_2 + y_3^*) = 1.34923, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_4^* = (1+h)y_3 = 1.48416, \\ y_4 = y_3 + \frac{h}{2}(y_3 + y_4^*) = 1.4909, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_5^* = (1+h)y_4 = 1.63999, \\ y_5 = y_4 + \frac{h}{2}(y_4 + y_5^*) = 1.64745, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_6^* = (1+h)y_5 = 1.81219, \\ y_6 = y_5 + \frac{h}{2}(y_5 + y_6^*) = 1.82043, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_7^* = (1+h)y_6 = 2.00247, \\ y_7 = y_6 + \frac{h}{2}(y_6 + y_7^*) = 2.01157, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_8^* = (1+h)y_7 = 2.21273, \\ y_8 = y_7 + \frac{h}{2}(y_7 + y_8^*) = 2.22279, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_9^* = (1+h)y_8 = 2.44507, \\ y_9 = y_8 + \frac{h}{2}(y_8 + y_9^*) = 2.45618, \end{cases} \\ &\begin{cases} y_{10}^* = (1+h)y_9 = 2.7018, \\ y_{10} = y_9 + \frac{h}{2}(y_9 + y_{10}^*) = 2.71408, \end{cases}\end{aligned}$$

cuyos errores son

e_1	e_2	e_3	e_4	e_5	e_6	e_7	e_8	e_9	e_{10}
0.00017	0.0004	0.0006	0.0009	0.0013	0.0017	0.0022	0.0028	0.0034	0.0042

Obsérvese que son similares a los obtenidos en el método de Taylor de segundo orden. Si variamos el tamaño de paso, obtenemos los siguientes errores para los siguientes valores

$h = 1$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$	$h = 0.0001$	$h = 0.00001$
0.2183	0.0042	0.000045	$4.5 \cdot 10^{-7}$	$4.5 \cdot 10^{-9}$	$4.5 \cdot 10^{-11}$

que reproducen los obtenidos en el método de Taylor anteriormente mencionado.

La forma más general posible para un método de Runge–Kutta de orden dos es

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1), \\ \mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + b_1\mathbf{g}_1 + b_2\mathbf{g}_2, \end{cases}$$

donde los tiempos t_{i-1} no tienen porqué ser uniformemente distribuidos, y $b_2 \neq 0$. Si tomamos $\mathbf{g}_2(h)/h$ y desarrollamos mediante la serie de Taylor de primer orden obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_2(h) &= \mathbf{g}_2(0) + h\mathbf{g}'_2(0) + \mathcal{O}(h) \\ &= \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + h \left(c_2 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{21} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) + \mathcal{O}(h), \end{aligned}$$

por lo que

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_i &= \mathbf{y}_{i-1} + b_1\mathbf{g}_1 + b_2\mathbf{g}_2 \\ &= \mathbf{y}_{i-1} + (b_1 + b_2)h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + b_2h^2 \left(c_2 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{21} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right). \end{aligned}$$

Por otra parte, la aproximación mediante la serie de Taylor de orden dos de $\mathbf{y}(t; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})$ era

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h^2,$$

e igualando coeficientes obtenemos que

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1, \\ b_2 c_2 = 1/2, \\ b_2 a_{21} = 1/2. \end{cases}$$

Como $b_2 \neq 0$, tenemos que $a_{21} = c_2 = \frac{1}{2b_2}$ y $b_1 = 1 - b_2$, lo cual nos proporciona una familia de métodos de Runge–Kutta de orden dos según los valores de b_2 . Así, cuando $b_2 = 1/2$, obtenemos el método de Heun anteriormente descrito. Cuando $b_2 = 1$, tenemos

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{2}\mathbf{g}_1), \end{cases}$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_i &= \mathbf{y}_{i-1} + h\mathbf{g}_2 = \mathbf{y}_{i-1} + h\mathbf{f}(t_{i-1} + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{2}\mathbf{g}_1) \\ &= \mathbf{y}_{i-1} + h\mathbf{f}(t_{i-1} + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_{i-1} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})), \end{aligned}$$

que es el algoritmo de Runge de 1895.

En general, un método de Runge–Kutta explícito de m etapas es de la forma

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \sum_{j=1}^m b_j \mathbf{g}_j,$$

donde

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1), \\ \mathbf{g}_3 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31}\mathbf{g}_1 + a_{32}\mathbf{g}_2), \\ \dots \\ \mathbf{g}_m = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_m h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{m1}\mathbf{g}_1 + a_{m2}\mathbf{g}_2 + \dots + a_{mm-1}\mathbf{g}_{m-1}), \end{cases}$$

siendo c_j , $j = 2, \dots, m$, b_j , $j = 1, \dots, m$ y a_{jk} , $j = 1, \dots, m$, $k = 1, \dots, j - 1$, los coeficientes del método. Normalmente, estos coeficientes se agrupan según la tabla

	0				
c_2		a_{21}			
c_3		a_{31}	a_{32}		
\dots		\dots	\dots	\dots	
c_m		a_{m1}	a_{m2}	\dots	a_{mm-1}
		b_1	b_2	\dots	b_{m-1}
					b_m

y en forma matricial

$$\frac{\mathbf{c}^t}{\mathbf{b}} \mid \mathbf{A}$$

donde $\mathbf{c} = (0, c_2, \dots, c_m)$, $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_m)$ y $\mathbf{A} = (a_{jk}) \in \mathcal{M}_{m \times m}(\mathbb{R})$ con $a_{jk} = 0$ si $k > j$.

Así, el método dado por la tabla

	0				
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$		0	$\frac{1}{2}$		
$\frac{1}{2}$		0	$\frac{1}{2}$		
1		0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$	

y concretado en

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{2}\mathbf{g}_1), \\ \mathbf{g}_3 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{2}\mathbf{g}_2), \\ \mathbf{g}_4 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + h, \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{g}_3), \end{cases}$$

que da

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{6}\mathbf{g}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{g}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{g}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{g}_4$$

es el método de Kutta de 1905, que es el método clásico de Runge–Kutta de cuatro etapas, y como veremos posteriormente, cuarto orden. Si aplicamos este método a nuestro ejemplo

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

tenemos que los valores que obtenemos para tamaño de paso $h = 0.1$ son

$$\begin{aligned} y_1 &= 1.10517, & y_2 &= 1.2214, \\ y_3 &= 1.34986, & y_4 &= 1.49182, \\ y_5 &= 1.64872, & y_6 &= 1.82212, \\ y_7 &= 2.01375, & y_8 &= 2.22554, \\ y_9 &= 2.4596, & y_{10} &= 2.71828, \end{aligned}$$

cuyos errores son

$e_1 = 8.4 \cdot 10^{-8}$	$e_2 = 1.8 \cdot 10^{-7}$
$e_3 = 3.1 \cdot 10^{-7}$	$e_4 = 4.6 \cdot 10^{-7}$
$e_5 = 6.3 \cdot 10^{-7}$	$e_6 = 8.3 \cdot 10^{-7}$
$e_7 = 1.1 \cdot 10^{-6}$	$e_8 = 1.4 \cdot 10^{-6}$
$e_9 = 1.7 \cdot 10^{-6}$	$e_{10} = 2.1 \cdot 10^{-6}$

Obsérvese que son similares a los obtenidos en el método de Taylor de segundo orden. Si variamos el tamaño de paso, obtenemos los siguientes errores para los siguientes valores

$h = 1$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$	$h = 0.0001$	$h = 0.00001$
0.00995	$2.1 \cdot 10^{-6}$	$2.25 \cdot 10^{-10}$	$1.38 \cdot 10^{-14}$	$6.22 \cdot 10^{-15}$	$6.26 \cdot 10^{-14}$

Como vemos, los errores de redondeo hacen que no se aprecie que el error del paso $h/10$ es aproximadamente el del paso h elevado a la cuarta potencia. Este hecho sí se aprecia en los tamaño de paso hasta 0.001.

2.4 Análisis del error en los métodos de orden uno

Consideramos un problema de condiciones iniciales de la forma

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

donde la función $\mathbf{f} : \Omega \subseteq \mathbb{R}^{m+1} \rightarrow \mathbb{R}^m$ es suficiente regular para que dicho problema tenga solución única. Como hemos visto hasta ahora, los métodos numéricos de Taylor y Runge–Kutta se basan en, fijado $t_1 > t_0$ y un tamaño de paso $h = \frac{t_1 - t_0}{n}$, construir una sucesión $\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n$ de manera que sean una aproximación de la solución $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ en los tiempos $t_i = t_0 + hi$. Como hemos puesto de manifiesto con algunos ejemplos, estos métodos tienen inherentemente asociados unos errores que se deben a dos causas bien diferenciadas:

- Errores matemáticos debidos al método numérico empleado.
- Errores de redondeo al trabajar los computadores con precesión finita.

En general, los métodos que conocemos son de la forma

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h), \quad i = 1, \dots, n, \tag{2.4}$$

que dan lugar a los valores $\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n$ anteriormente mencionados. En general, dentro de los errores matemáticos podemos distinguir los siguientes tipos.

Definimos el *error global* de la solución aproximada como

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{y}_i - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0), \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

y el método numérico en cuestión se dirá *convergente* si

$$\lim_{h \rightarrow 0} \max_{0 \leq i \leq n} \|\mathbf{e}_i\| = 0.$$

Básicamente, la convergencia implica que el error global tiende a cero cuando lo hace el tamaño de paso.

Otro concepto importante es el de *consistencia*. Un método numérico dado por (2.4) se dice *consistente* si

$$\Phi(t, \mathbf{y}, 0) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}). \quad (2.5)$$

Por ejemplo, en el caso de los métodos de Taylor de orden n , la función dada por (2.5) es

$$\Phi(t, \mathbf{y}, 0) = \sum_{j=1}^n \frac{h^{j-1}}{j!} \mathbf{y}^{(j)} = \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}).$$

En el caso de los métodos de Runge–Kutta, dicho método es consistente si

$$\sum_{j=1}^n b_j = 1.$$

En el estudio del error global de un método, tienen gran importancia dos errores locales que a continuación describimos. Se llama *error local* del paso i como

$$\mathbf{l}_i = \mathbf{y}_i - \mathbf{y}(t_i; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}),$$

es decir, la diferencia entre el valor proporcionado por el método \mathbf{y}_i y el valor exacto proporcionado por la solución exacta del problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_{i-1}) = \mathbf{y}_i. \end{cases}$$

El último tipo de error local que vamos a introducir es lo que llamaremos el *error local de truncamiento*, que definimos como

$$\mathbf{t}_i = \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0),$$

es decir, aquel error que se obtendría al sustituir la solución real del problema de condiciones iniciales $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ en el método numérico implementado

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h).$$

Si el método numérico es consistente, entonces el error de local de truncamiento converge a cero cuando se divide por h . En efecto

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{t}_i}{h} &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}(t_{i-1} + h; t_0, \mathbf{y}_0)}{h} \\ &\quad + \lim_{h \rightarrow 0} \Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) \\ &= -\mathbf{y}'(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0)) = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

por ser $\mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0)$ solución de la ecuación diferencial. Básicamente, la consistencia indica que $\|\mathbf{t}_i\|$ es al menos $\mathcal{O}(h^2)$. Diremos que un método es consistente de orden n si es consistente y el error local de truncamiento es de orden $\mathcal{O}(h^{n+1})$.

Vamos a analizar este último tipo de error para los métodos numéricos que conocemos.

2.4.1 Error local de truncamiento en el método de Taylor

Recordemos que el método de Taylor es de la forma

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_i &= \mathbf{y}_{i-1} + \frac{1}{1!}\mathbf{f}_1(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h + \frac{1}{2!}\mathbf{f}_2(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h^2 + \dots + \frac{1}{n!}\mathbf{f}_n(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h^n \\ &= \mathbf{y}_{i-1} + \sum_{j=1}^n \frac{h^j}{j!}\mathbf{f}_j(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}).\end{aligned}$$

Entonces, el error local de truncamiento es

$$\begin{aligned}\mathbf{t}_i &= \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{h^j}{j!}\mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^j}{j!}\mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= - \sum_{j=n+1}^{\infty} \frac{h^j}{j!}\mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}\mathbf{y}^{(n+1)}(t_{i-1} + \eta h; t_0, \mathbf{y}_0),\end{aligned}$$

con $\eta \in (0, 1)$. Entonces, existe $A > 0$ de manera que

$$\|\mathbf{t}_i\| \leq Ah^{n+1},$$

o equivalentemente

$$\|\mathbf{t}_i\| = \mathcal{O}(h^{n+1}),$$

con lo que el método de Taylor truncado en el paso n es de orden $n+1$.

2.4.2 Error local de truncamiento en los métodos de Runge–Kutta

Por simplicidad, vamos a considerar sólamente los métodos de dos etapas dados por

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_2h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1), \\ \mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + b_1\mathbf{g}_1 + b_2\mathbf{g}_2, \end{cases}$$

donde $a_{21} = c_2 = \frac{1}{2b_2}$ y $b_1 = 1 - b_2$. Entonces

$$\Phi(t, \mathbf{y}, h) = b_1\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) + b_2\mathbf{f}(t + c_2h, \mathbf{y} + a_{21}h\mathbf{f}(t, \mathbf{y})).$$

Ahora bien

$$\begin{aligned}
\mathbf{t}_i &= \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \\
&= \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{h^j}{j!} \mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) \\
&= h \left(\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^{j-1}}{j!} \mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) \right) \\
&= \frac{h^3}{3!} \mathbf{y}^{(3)}(t_{i-1} + \eta h; t_0, \mathbf{y}_0),
\end{aligned}$$

debido a los valores de los coeficientes del método de Runge–Kutta, siendo $\eta \in (0, 1)$. De esta manera, vemos que

$$\|\mathbf{t}_i\| = \mathcal{O}(h^3).$$

En general, el error local de truncamiento en un método de Runge–Kutta de n pasos es $\mathcal{O}(h^{n+1})$.

2.4.3 Relación entre el error local de truncamiento y el error global

Vamos a ver cómo podemos controlar el error global a partir del error local de truncamiento. Como sabemos

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{y}_i - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0).$$

Entonces

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_i &= \mathbf{y}_{i-1} + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) + \mathbf{t}_i - \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) - h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) \\
&= \mathbf{t}_i + \mathbf{e}_{i-1} + h(\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h)).
\end{aligned}$$

Sea $M > 0$ tal que $\|\mathbf{t}_i\| < M$ y teniendo en cuenta que $h > 0$, obtenemos la acotación

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq M + \|\mathbf{e}_{i-1}\| + h\|\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h)\|. \quad (2.6)$$

Supongamos ahora que Φ satisface una condición de Lipschitz con constante $L > 0$ en la variable \mathbf{y} , esto es

$$\|\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h)\| \leq L\|\mathbf{y}_{i-1} - \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0)\|,$$

con lo que la expresión (2.6) se reduce a

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{e}_i\| &\leq M + \|\mathbf{e}_{i-1}\| + h\|\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h)\| \\
&\leq M + \|\mathbf{e}_{i-1}\| + hL\|\mathbf{y}_{i-1} - \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0)\| \\
&= M + \|\mathbf{e}_{i-1}\|(1 + hL).
\end{aligned}$$

Aplicando la anterior desigualdad para $i \geq 1$ tenemos

$$\|\mathbf{e}_1\| \leq \|\mathbf{e}_0\|(1 + hL) + M,$$

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{e}_2\| &\leq \|\mathbf{e}_1\|(1 + hL) + M \\
&\leq \|\mathbf{e}_0\|(1 + hL)^2 + M(1 + (1 + hL)),
\end{aligned}$$

y en general

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq \|\mathbf{e}_0\|(1+hL)^i + M \sum_{j=0}^{i-1} (1+hL)^j.$$

Como

$$\sum_{j=0}^{i-1} (1+hL)^j = \frac{(1+hL)^i - 1}{hL},$$

sustituyendo en la expresión anterior,

$$\begin{aligned}\|\mathbf{e}_i\| &\leq \|\mathbf{e}_0\|(1+hL)^i + M \frac{(1+hL)^i - 1}{hL} \\ &= (1+hL)^i \left(\|\mathbf{e}_0\| + \frac{M}{hL} \right) - \frac{M}{hL}.\end{aligned}$$

De la noción de exponencial real tenemos que

$$0 \leq (1+hL)^i \leq e^{hLi},$$

y teniendo en cuenta que $\mathbf{e}_0 = \mathbf{0}$, concluimos que

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq \frac{M}{hL} (e^{hLi} - 1).$$

Ahora bien $ih = t_f - t_0$, donde t_f es el tiempo final donde deseamos conocer la solución de la ecuación diferencial, por lo que

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq \frac{M}{hL} (e^{L(t_f - t_0)} - 1).$$

Como por otra parte, $M = Ah^{n+1}$ donde $A > 0$ [$M \approx \mathcal{O}(h^{n+1})$], tenemos que

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq Bh^p,$$

por lo que acabamos de probar el siguiente resultado:

Theorem 2 Si $\|\mathbf{t}_i\| \approx \mathcal{O}(h^{n+1})$ entonces $\|\mathbf{e}_i\| \approx \mathcal{O}(h^n)$.

2.4.4 Relación entre el error local y el error local de truncamiento

Ambos errores son muy parecidos en magnitud. Como se puede comprobar

$$\begin{aligned}\mathbf{l}_i &= \mathbf{y}_i - \mathbf{y}(t_i; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \\ &= \mathbf{y}_{i-1} + h\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \sum_{j \geq 0} \frac{h^j}{j!} \mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \\ &= h \left(\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \sum_{j \geq 1} \frac{h^{j-1}}{j!} \mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right).\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned}\mathbf{l}_i - \mathbf{t}_i &= h \left(\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}, h) - \sum_{j \geq 1} \frac{h^{j-1}}{j!} \mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) \\ &\quad - h \left(\Phi(t_{i-1}, \mathbf{y}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0), h) - \sum_{j \geq 1} \frac{h^{j-1}}{j!} \mathbf{y}^{(j)}(t_{i-1}; t_0, \mathbf{y}_0) \right)\end{aligned}$$

2.5 Extrapolación de Richardson

Supongamos que $\mathbf{y}(t_i) = \mathbf{y}(t_i, h)$ es la solución aproximada del problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

con tamaño de paso h , esto es, $t = t_i = t_0 + ih$. Supongamos que el error global

$$\mathbf{e}_i(h) = \mathbf{y}(t_i, h) - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{d}(t_i)h^p + \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad (2.7)$$

donde la función $\mathbf{d}(t)$ no depende de h . Puede comprobarse, aunque queda lejos de los objetivos de este curso, que el error global tanto en los métodos de Taylor como en los de Runge–Kutta tiene esta estructura. Si calculamos ahora la aproximación con paso $h/2$, tendremos

$$\mathbf{e}_i(h/2) = \mathbf{y}(t_i, h/2) - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{d}(t_i) \left(\frac{h}{2}\right)^p + \mathcal{O}(h^{p+1}). \quad (2.8)$$

Restando

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_i(h/2) - \mathbf{e}_i(h) &= \mathbf{y}(t_i, h/2) - \mathbf{y}(t_i, h) \\ &= \mathbf{d}(t_i)h^p \left(\frac{1}{2^p} - 1\right) + \mathcal{O}(h^{p+1}) \\ &= \mathbf{d}(t_i) \left(\frac{h}{2}\right)^p (1 - 2^p) + \mathcal{O}(h^{p+1}),\end{aligned}$$

con lo que

$$\frac{\mathbf{y}(t_i, h/2) - \mathbf{y}(t_i, h)}{1 - 2^p} = \mathbf{d}(t_i) \left(\frac{h}{2}\right)^p + \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Por otra parte, si multiplicamos

$$2^p \mathbf{e}_i(h/2) = 2^p \mathbf{y}(t_i, h/2) - 2^p \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{d}(t_i)h^p + \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

y calculando

$$2^p \mathbf{e}_i(h/2) - \mathbf{e}_i(h) = 2^p \mathbf{y}(t_i, h/2) - 2^p \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}(t_i, h) + \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) = \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

de donde

$$\mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) - \frac{\mathbf{y}(t_i, h) - 2^p \mathbf{y}(t_i, h/2)}{1 - 2^p} = \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

por lo que

$$\frac{\mathbf{y}(t_i, h) - 2^p \mathbf{y}(t_i, h/2)}{1 - 2^p}$$

es una aproximación de $\mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0)$ que tiene al menos orden $\mathcal{O}(h^{p+1})$. De este modo, aumentamos en uno el orden de convergencia, sin por ellos aumentar la cantidad de operaciones de una forma drástica. Esto es lo que se conoce como el método de extrapolación de Richardson.

A modo de ejemplo, tomemos el problema

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

y calculemos $y(1; 0, 1)$ por el método de Euler con tamaño de paso $h = 10000$ y $h/2 = 5000$. Obtenemos los errores $e(h) = 0.000135902$ y $e(h/2) = 0.0000679539$. Teniendo en cuenta que el método de Euler es de orden uno, calculamos

$$\frac{\mathbf{y}(t_i, h) - 2\mathbf{y}(t_i, h/2)}{1 - 2} = 2 \cdot 2.71821 - 2.71815 = 2.71828,$$

que nos da un error de $6.22853 \cdot 10^{-9}$, con lo que el error ha disminuido notablemente con una serie de operaciones sencillas.

2.6 Más sobre los métodos Runge–Kutta

Partimos de la ecuación diferencial con condiciones iniciales

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \end{cases}$$

En general, un método de Runge–Kutta explícito de m etapas es de la forma

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \sum_{j=1}^m b_j \mathbf{g}_j,$$

donde

$$\begin{cases} \mathbf{g}_1 = h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1), \\ \mathbf{g}_3 = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31}\mathbf{g}_1 + a_{32}\mathbf{g}_2), \\ \dots \\ \mathbf{g}_m = h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_m h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{m1}\mathbf{g}_1 + a_{m2}\mathbf{g}_2 + \dots + a_{mm-1}\mathbf{g}_{m-1}), \end{cases}$$

siendo c_j , $j = 2, \dots, m$, b_j , $j = 1, \dots, m$ y a_{jk} , $j = 1, \dots, m$, $k = 1, \dots, j-1$, los coeficientes del método. Normalmente, estos coeficientes se agrupan según la tabla

	0				
c_2		a_{21}			
c_3		a_{31}	a_{32}		
\dots		\dots	\dots	\dots	
c_m		a_{m1}	a_{m2}	\dots	a_{mm-1}
		b_1	b_2	\dots	b_{m-1}
					b_m

y en forma matricial

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c}^t & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b} \end{array}$$

donde $\mathbf{c} = (0, c_2, \dots, c_m)$, $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_m)$ y $\mathbf{A} = (a_{jk}) \in \mathcal{M}_{m \times m}(\mathbb{R})$ con $a_{jk} = 0$ si $k > j$. Se satisfacen en general las condiciones de simplificación

$$c_j = \sum_{k=1}^{j-1} c_{jk}, \quad j = 2, \dots, m.$$

2.6.1 El método de 3 etapas

Veamos cómo se genera el método de Runge–Kutta de tres etapas que tendrá error local de truncamiento $t_i \approx \mathcal{O}(h^4)$. Como sabemos, su tabla de Butcher será

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ c_2 & a_{21} & \\ \hline c_3 & a_{31} & a_{32} \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 \end{array}$$

y el método será de la forma

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), \\ \mathbf{g}_2 &= h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1), \\ \mathbf{g}_3 &= h\mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31}\mathbf{g}_1 + a_{32}\mathbf{g}_2), \end{aligned}$$

y

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + b_1\mathbf{g}_1 + b_2\mathbf{g}_2 + b_3\mathbf{g}_3. \quad (2.9)$$

Por otra parte, la aproximación mediante la serie de Taylor de orden tres de $\mathbf{y}(t; t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})$ era

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h^2 \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + 2\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y} \partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right. \\ &\left. + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})^2 + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h^3 + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Tomamos la función

$$\mathbf{G}_2(h) = \mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1),$$

derivamos dos veces respecto de h

$$\mathbf{G}'_2(h) = c_2 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1) a_{21} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}),$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}''_2(h) &= c_2^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1) + 2c_2 \frac{\partial^2}{\partial t \partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1) a_{21} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_2 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{21}\mathbf{g}_1) a_{21}^2 \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})^2, \end{aligned}$$

de donde el desarrollo de Taylor de orden dos es

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_2(h) &= \mathbf{G}_2(0) + \mathbf{G}'_2(0)h + \frac{1}{2}\mathbf{G}''_2(0)h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ &= \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + \left(c_2 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{21} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(c_2^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + 2c_2 a_{21} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial^2}{\partial t \partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right. \\ &\quad \left. + a_{21}^2 \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h^2 + \mathcal{O}(h^3)\end{aligned}$$

y por otra parte

$$\mathbf{G}_3(h) = \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)),$$

que derivando dos veces nos da

$$\begin{aligned}\mathbf{G}'_3(h) &= c_3 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)) \cdot (a_{31} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{32} (\mathbf{G}_2(h) + h \mathbf{G}'_2(h))), \\ \mathbf{G}''_3(h) &= c_3^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)) + \\ &\quad + 2c_3 \frac{\partial^2}{\partial t \partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)) \cdot (a_{31} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{32} (\mathbf{G}_2(h) + h \mathbf{G}'_2(h))) \\ &\quad + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)) \cdot (a_{31} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{32} (\mathbf{G}_2(h) + h \mathbf{G}'_2(h)))^2 \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1} + c_3 h, \mathbf{y}_{i-1} + a_{31} \mathbf{g}_1 + a_{32} h \mathbf{G}_2(h)) (a_{32} (2 \mathbf{G}'_2(h) + h \mathbf{G}''_2(h))),\end{aligned}$$

de donde

$$\mathbf{G}'_3(0) = c_3 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + (a_{31} + a_{32}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}),$$

$$\begin{aligned}\mathbf{G}''_3(0) &= c_3^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + 2c_3 (a_{31} + a_{32}) \frac{\partial^2}{\partial t \partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \\ &\quad + (a_{31} + a_{32})^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})^2 \\ &\quad + 2a_{32} \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \left(c_2 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{21} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right),\end{aligned}$$

por lo que el desarrollo de Taylor en cero es

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_3(h) &= \mathbf{G}_3(0) + \mathbf{G}'_3(0)h + \frac{1}{2}\mathbf{G}''_3(0)h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ &= \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + \left(c_3 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + (a_{31} + a_{32}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) h\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \left(c_3^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + 2c_3 (a_{31} + a_{32}) \frac{\partial^2}{\partial t \partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right. \\
& + (a_{31} + a_{32})^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})^2 \\
& + \left. \left(2a_{32} \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \left(c_2 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + a_{21} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) \right) \right) h^2 \right. \\
& \left. + \mathcal{O}(h^2) \right)
\end{aligned}$$

Introduciendo los desarrollos de Taylor de \mathbf{G}_2 y \mathbf{G}_3 en la igualdad (2.9), y comparando con el desarrollo de Taylor de orden 2 (2.10), obtenemos las ecuaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} b_1 + b_2 + b_3 = 1, \\ b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2}, \\ b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32}) = \frac{1}{2}, \\ b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}, \\ b_2 c_2 a_{21} + b_3 c_3 (a_{31} + a_{32}) = \frac{1}{3}, \\ b_2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2 = \frac{1}{3}, \\ b_3 a_{32} c_2 = \frac{1}{6}, \\ b_3 a_{32} a_{21} = \frac{1}{6}. \end{array} \right.$$

De las dos últimas obtenemos que $c_2 = a_{21}$ con lo que usando la segunda y tercera, llegamos a $c_3 = a_{31} + a_{32}$. Entonces la quinta y sexta ecuaciones se simplifican a

$$b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}$$

que es la cuarta, y la última ecuación es la antepenúltima, con lo que el sistema reducido de ecuaciones nos queda

$$\left\{ \begin{array}{l} b_1 + b_2 + b_3 = 1, \\ c_2 = a_{21}, \\ c_3 = a_{31} + a_{32}, \\ b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2}, \\ b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}, \\ b_3 a_{32} c_2 = \frac{1}{6}, \end{array} \right.$$

que nos dan los métodos de Runge–Kutta de orden 3, que es una familia biparamétrica de métodos numéricos. Si tomamos c_2 y c_3 como parámetros, tenemos de las ecuaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2}, \\ b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}, \end{array} \right.$$

que

$$b_2 = \frac{\begin{vmatrix} \frac{1}{2} & c_3 \\ \frac{1}{3} & c_3^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_2 & c_3 \\ c_2^2 & c_3^2 \end{vmatrix}} = \frac{c_3 \left(\frac{c_3}{2} - \frac{1}{3} \right)}{c_2 c_3 (c_3 - c_2)}$$

$$b_3 = \frac{\begin{vmatrix} c_2 & \frac{1}{2} \\ c_2^2 & \frac{1}{3} \\ \hline c_2 & c_3 \\ c_2^2 & c_3^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_2 & \frac{1}{2} \\ c_2^2 & \frac{1}{3} \\ \hline c_2 & c_3 \\ c_2^2 & c_3^2 \end{vmatrix}} = \frac{c_2 \left(\frac{1}{3} - \frac{c_2}{2} \right)}{c_2 c_3 (c_3 - c_2)},$$

y de la última

$$a_{32} = \frac{1}{6b_3 c_2} = \frac{c_2 c_3 (c_3 - c_2)}{6 \left(\frac{1}{3} - \frac{c_2}{2} \right)}.$$

De $c_3 = a_{31} + a_{32}$ tenemos que

$$a_{31} = c_3 - a_{32} = c_3 - \frac{c_2 c_3 (c_3 - c_2)}{6 \left(\frac{1}{3} - \frac{c_2}{2} \right)},$$

y de $b_1 + b_2 + b_3 = 1$ concluimos

$$\begin{aligned} b_1 &= 1 - b_2 - b_3 = 1 - \frac{c_3 \left(\frac{c_3}{2} - \frac{1}{3} \right)}{c_2 c_3 (c_3 - c_2)} - \frac{c_2 \left(\frac{1}{3} - \frac{c_2}{2} \right)}{c_2 c_3 (c_3 - c_2)} \\ &= \frac{c_2 c_3 (c_3 - c_2) - c_3 \left(\frac{c_3}{2} - \frac{1}{3} \right) - c_2 \left(\frac{1}{3} - \frac{c_2}{2} \right)}{c_2 c_3 (c_3 - c_2)} \\ &= \frac{\left(c_2 c_3 + \frac{1}{3} \right) (c_3 - c_2) - \frac{1}{2} (c_3^2 - c_2^2)}{c_2 c_3 (c_3 - c_2)} \end{aligned}$$

Así, obtenemos los métodos de Runge–Kutta de orden tres

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \\ \hline \frac{4}{3} & 0 & \frac{4}{3} \\ \hline & \frac{2}{9} & \frac{1}{3} & \frac{4}{9} \end{array}$$

y

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ 1 & -1 & 2 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Estas soluciones son válidas siempre que c_2 y c_3 sean no nulos y distintos. Existen métodos que se obtienen cuándo alguna de estas cantidades son nulas, y que se obtienen de igual manera.

Como vemos, dado que el error local de los métodos de Runge–Kutta de tres etapas es de orden 4 [$\mathcal{O}(h^4)$], tenemos que el error global de los métodos de tres etapas es de orden 3.

2.6.2 El método de cuatro etapas

Procediendo como en los casos de dos y tres etapas, aumentando en un orden los desarrollos de Taylor de las funciones implicadas, tenemos que si la tabla de Butcher de un método de cuatro etapas es

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ c_2 & a_{21} & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & \\ c_4 & a_{41} & a_{42} & a_{43} \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \end{array}$$

entonces han de satisfacerse la simplificación

$$c_j = \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}, \quad j = 2, 3, 4,$$

y las condiciones

$$\left\{ \begin{array}{l} b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1, \\ b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4 = \frac{1}{2}, \\ b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 + b_4 c_4^2 = \frac{1}{3}, \\ b_3 a_{32} c_2 + b_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = \frac{1}{6}, \\ b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + b_4 c_4^3 = \frac{1}{4}, \\ b_3 c_3 a_{32} c_2 + b_4 c_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = \frac{1}{8}, \\ b_3 a_{32} c_2^2 + b_4 (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) = \frac{1}{12}, \\ b_4 a_{43} a_{32} c_2 = \frac{1}{24}, \end{array} \right.$$

la primera de las cuales, como sabemos, viene de la condición de consistencia de los métodos de Runge–Kutta en general. Butcher en 1963 dio la simplificación

$$\sum_{i=1}^4 b_i a_{ij} = b_j (1 - c_j), \quad j = 2, 3, 4, \quad (2.12)$$

donde $a_{ij} = 0$ si $i \geq j$, de la cual se tiene para $j = 4$ que

$$b_4 (1 - c_4) = 0,$$

de donde $c_4 = 1$ ya que $b_4 \neq 0$. Como las ecuaciones 2, 3 y 5 son lineales en b_2 , b_3 y b_4 , tenemos que

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{1 - 2c_3}{12c_2(1 - c_2)(c_2 - c_3)}, \\ b_3 &= \frac{1 - 2c_2}{12c_3(1 - c_3)(c_3 - c_2)}, \end{aligned}$$

y

$$b_4 = \frac{6c_2 c_3 - 4(c_3 + c_2) + 3}{12c_2(1 - c_2)(1 - c_3)}.$$

Tomando ahora $j = 3$ en (2.12) obtenemos

$$a_{43} = \frac{(1 - c_2)(2c_2 - 1)(1 - c_3)}{c_3(c_2 - c_3)(6c_2 c_3 - 4(c_2 + c_3) + 3)}.$$

Finalmente, de la última ecuación y (2.12) con $j = 2$ obtenemos

$$a_{32} = \frac{c_3(c_2 - c_3)}{2c_2(2c_2 - 1)},$$

y

$$a_{42} = \frac{(1 - c_2)[2(1 - c_3)(1 - 2c_3) - (c_2 - c_3)]}{2c_2(c_2 - c_3)[6c_2 c_3 - 4(c_2 + c_3) + 3]}.$$

Como vemos, estas soluciones dependientes de dos parámetros son válidas siempre que $c_2 \notin \{0, 1/2, 1\}$, $c_3 \notin \{0, 1\}$ y $c_2 \neq c_3$. Cuando alguna de estas condiciones no se satisfacen, existen no obstante métodos de Runge–Kutta con estos coeficientes.

Estos métodos son de orden 4 (orden 5 tiene el error local de truncamiento) y representan una familia de cinco parámetros de métodos cuyos ejemplos son

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{3} & & \frac{1}{3} & \\ \frac{2}{3} & & -\frac{1}{3} & 1 \\ \hline 1 & 1 & -1 & 1 \\ \hline & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} \end{array}$$

y sobre todo, que cumple $c_2 = c_3$,

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & & \frac{1}{2} & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

que es el método debido a Kutta de 1905 y que usualmente se conoce como el método de Runge–Kutta.

2.6.3 Métodos de más etapas

En general, se conoce que un método de Runge–Kutta de m etapas tiene a lo sumo orden m . De hecho, se tiene la siguiente tabla para los órdenes en función de las etapas

Etapas	1	2	3	4	5	6	7	8
Orden	1	2	3	4	4	5	6	6

es decir, a partir de 5 etapas no aumenta el orden global del método. ¿Por qué entonces se construyen métodos de más de 5 etapas? La razón es meramente computacional, ya que los errores debidos al redondeo aumentan con el número de pasos. Para fijar ideas, supongamos que el error global de un método es

$$e = Ch^p,$$

donde p es el orden. Tomando logaritmos tenemos que

$$\log e = \log C + p \log h,$$

y suponiendo que el tamaño del paso $h = (t_f - t_0)/n$ se tiene

$$\begin{aligned} \log e &= \log C + p \log \frac{t_f - t_0}{n} \\ &= \log C + p \log(t_f - t_0) - p \log n \\ &= B - p \log n, \end{aligned}$$

siendo

$$B = \log C + p \log(t_f - t_0).$$

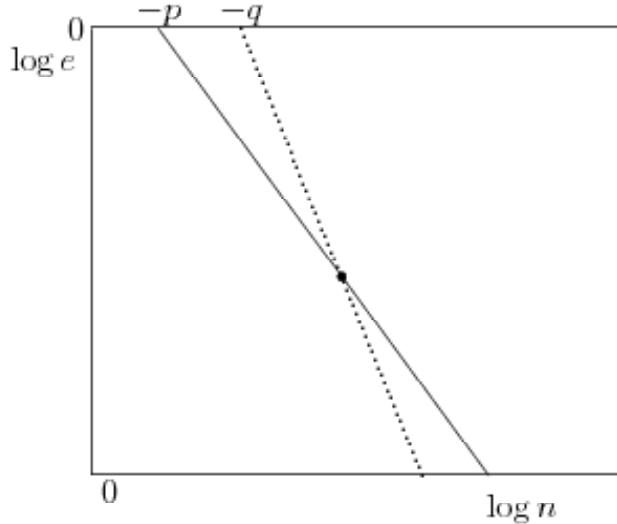
Si asumimos cierta la identidad

$$\log e = B - p \log n$$

y escribimos otra análoga para un método de orden q

$$\log e = B' - q \log n,$$

tenemos dos rectas que se cortarán en un punto, que marcarán la eficiencia de cada método y determinarán cuándo debe usarse cada uno.



Capítulo 3

Métodos multipaso

Sumario. Métodos multipaso generales. Convergencia y estabilidad de los métodos multipaso. Métodos de Adams–Bashforth. Métodos de Adams–Moulton. Métodos predictor–corrector.

3.1 Introducción

Partimos de la ecuación diferencial con condiciones iniciales

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

que verifica tener unicidad de solución. Hasta ahora hemos visto métodos numéricos de un paso, es decir, la sucesión que aproxima la solución \mathbf{y}_i se genera de forma recursiva a partir de los términos inmediatamente anteriores, esto es \mathbf{y}_{i-1} . Como veremos, en los métodos multipaso esta sucesión se construye a partir de una ecuación en diferencias con orden mayor que uno. Veamos a continuación cómo construir tales aproximaciones.

3.2 Métodos multipaso lineales

Sea $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ la solución del problema de condiciones iniciales anterior, y sean $t_f = t_1 > t_0$, y $h = t_1 - t_0$. Sea \mathbf{y}_1 la aproximación de $\mathbf{y}(t_1; t_0, \mathbf{y}_0)$ dada por la expresión

$$\mathbf{y}_1 = \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}_{-j} + h \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{f}(t_0 - jh, \mathbf{y}_{-j}), \quad (3.1)$$

donde a_j , b_j y p son parámetros elegidos de acuerdo con unas condiciones de convergencia y estabilidad determinadas, e

$$\mathbf{y}_{-j} \approx \mathbf{y}(t_0 - jh; t_0, \mathbf{y}_0), \quad j = 0, 1, \dots, p.$$

Si $p \geq 1$, entonces para $j = 1, \dots, p$ los valores \mathbf{y}_{-j} han de ser previamente estimados con un método de orden uno, probablemente algún método de Runge–Kutta. Si $b_{-1} = 0$, el método se dirá

explícito ya que \mathbf{y}_1 se obtiene directamente como

$$\mathbf{y}_1 = \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}_{-j} + h \sum_{j=0}^p b_j \mathbf{f}(t_0 - jh, \mathbf{y}_{-j}).$$

Sin embargo, si $b_{-1} \neq 0$ entonces el método se dice implícito porque hay que calcular \mathbf{y}_1 resolviendo la ecuación (3.1), presumiblemente haciendo uso de algún método numérico para ello.

En general, si tenemos n pasos, $h = (t_f - t_0)/n$ y $t_i = t_0 + ih$, para cada $i \in \{1, \dots, n\}$ construimos

$$\mathbf{y}_{i+1} = \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}_{i-j} + h \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{y}_{i-j}), \quad (3.2)$$

junto con las condiciones \mathbf{y}_j , $j = 0, 1, \dots, p$. Como vemos se trata de una ecuación en diferencias de orden p que da lugar a la aproximación de la solución. Veamos a continuación cómo obtener los parámetros del método.

Para ello, consideramos el error local de truncamiento

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{i+1} &= \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}(t_i - jh; t_0, \mathbf{y}_0) + h \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{y}(t_i - ih; t_0, \mathbf{y}_0)) - \mathbf{y}(t_i + h; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}(t_i - jh; t_0, \mathbf{y}_0) + h \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{y}'(t_i - jh; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}(t_i + h; t_0, \mathbf{y}_0), \end{aligned}$$

y tomando el desarrollo en serie de Taylor en $h = 0$, tenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{i+1} &= \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}(t_i - jh; t_0, \mathbf{y}_0) + h \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{y}'(t_i - jh; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}(t_i + h; t_0, \mathbf{y}_0) \\ &= \sum_{j=0}^p a_j \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{y}^{(k)}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) (-1)^k (-ih)^k \\ &\quad + h \sum_{j=-1}^p b_j \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{y}^{(k+1)}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) (-1)^k (-ih)^k \\ &\quad - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{y}^{(k)}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) h^k, \end{aligned}$$

y reagrupando en distintas potencias de h concluimos que

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{i+1} &= \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left(\sum_{j=0}^p a_j - 1 \right) + h \mathbf{y}'(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left(\sum_{j=-1}^p b_j - \sum_{j=0}^p i a_j - 1 \right) \\ &\quad + h^2 \mathbf{y}''(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left(- \sum_{j=-1}^p j b_j + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^p j^2 a_j - \frac{1}{2} \right) \\ &\quad + h^3 \mathbf{y}'''(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left(\frac{1}{2} \sum_{j=-1}^p j^2 b_j - \frac{1}{6} \sum_{j=0}^p j^3 a_j - \frac{1}{6} \right) \\ &\quad + \dots + h^k \mathbf{y}^{(k)}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left(\frac{(-1)^{k-1}}{(k-1)!} \sum_{j=-1}^p j^{k-1} b_j + \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{j=0}^p j^k a_j - \frac{1}{k!} \right) + \dots \end{aligned}$$

y si fijamos $a_{-1} = 0$, podemos escribir de forma más compacta

$$\mathbf{t}_{i+1} = \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left(\sum_{j=0}^p a_j - 1 \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} h^k \mathbf{y}^k(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) \left((-1)^k \sum_{j=-1}^p j^{k-1} (ja_j - kb_j) - 1 \right),$$

con lo que el error local de truncamiento será de orden $\mathcal{O}(h^{q+1})$ si se satisfacen las ecuaciones

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^p a_j &= 1, \\ (-1)^k \sum_{j=-1}^p j^{k-1} (ja_j - kb_j) &= 1, \quad k = 1, 2, \dots, q. \end{aligned}$$

Veamos algunos ejemplos concretos de métodos multipaso.

3.3 Primeros ejemplos

Vamos a construir un método multipaso de 2 pasos y de orden 3. Supongamos en primer lugar que el método es explícito, esto es $b_{-1} = 0$. Será entonces un método de la forma

$$\mathbf{y}_{i+1} = a_0 \mathbf{y}_i + a_1 \mathbf{y}_{i-1} + hb_0 \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + hb_1 \mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}),$$

satisfaciendo el sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} a_0 + a_1 = 1, \\ -a_1 + b_0 + b_1 = 1, \\ a_1 - 2b_1 = 1, \\ -a_1 + 3b_1 = 1, \end{cases}$$

de donde $b_1 = 2$, $a_1 = 5$, $b_0 = 4$ y $a_0 = -4$, de donde

$$\mathbf{y}_{i+1} = -4\mathbf{y}_i + 5\mathbf{y}_{i-1} + 4h\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + 2h\mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}).$$

Si elegimos un método implícito, esto es,

$$\mathbf{y}_{i+1} = a_0 \mathbf{y}_i + a_1 \mathbf{y}_{i-1} + hb_{-1} \mathbf{f}(t_i + h, \mathbf{y}_{i+1}) + hb_0 \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + hb_1 \mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}),$$

el sistema de ecuaciones anterior es de la forma

$$\begin{cases} a_0 + a_1 = 1, \\ -a_1 + b_{-1} + b_0 + b_1 = 1, \\ a_1 + 2b_{-1} - 2b_1 = 1, \\ -a_1 + 3b_{-1} + 3b_1 = 1, \end{cases}$$

que es un sistema compatible indeterminado cuya solución es

$$\begin{cases} a_0 = 1 - \lambda, \\ a_1 = \lambda, \\ b_{-1} = \frac{5}{12} - \lambda, \quad \lambda \in \mathbb{R}, \\ b_0 = \frac{2}{3} - 3\lambda, \\ b_1 = -\frac{1}{12} + 5\lambda, \end{cases}$$

por lo que si $\lambda = 0$, tenemos el método

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \frac{5}{12} \mathbf{f}(t_i + h, \mathbf{y}_{i+1}) + h \frac{2}{3} \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) - h \frac{1}{12} \mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}).$$

El método implícito tiene la desventaja de que el valor de \mathbf{y}_{i+1} ha de obtenerse a partir de la solución aproximada de una ecuación algebraica, cosa que no ocurre con el método explícito. Este último no permite obtener aproximaciones de tanto orden como el implícito. Por ejemplo, el método de dos pasos explícito no puede tener orden 4, ya que debería cumplir, además de las ecuaciones anteriores, la ecuación adicional

$$a_1 - 4b_1 = 1,$$

y dado que el determinante

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -1 & 3 & 1 \\ 1 & -4 & 1 \end{vmatrix} = 4,$$

el sistema dado por

$$\begin{cases} a_1 - 2b_1 = 1, \\ -a_1 + 3b_1 = 1, \\ a_1 - 4b_1 = 1, \end{cases}$$

no tiene solución. Sin embargo, si planteamos el mismo sistema para el método implícito, hemos de añadir la ecuación

$$a_1 + 4b_{-1} - 4b_1 = 1,$$

y ahora el determinante

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & -1 & 3 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 4 & 0 & -4 \end{vmatrix} = -12,$$

por lo que el sistema lineal anterior es compatible determinado y tiene un solución única que será el único método de orden 4 y paso 2. Si intentáramos conseguir orden 5, tendríramos que añadir la ecuación

$$-a_1 + 5b_{-1} + 5b_1 = 1,$$

y tomando las últimas 4 ecuaciones, el determinante de la matriz ampliada sería

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & -2 & 1 \\ -1 & 3 & 3 & 1 \\ 1 & 4 & -4 & 1 \\ -1 & 5 & 5 & 1 \end{vmatrix} = -8,$$

por lo que el sistema será incompatible y no habrá solución del mismo. Así pues, los métodos de dos pasos pueden tener a lo sumo orden 3 si es explícito y orden 4 si es implícito.

Ahora bien, si consideramos el problema

$$\begin{cases} y' = y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

y queremos aproximar $y(1; 0, 1)$, esto es $t_f = 1$, y aplicamos el método

$$\begin{cases} y_{i+1} = -4y_i + 5y_{i-1} + 4hy_i + 2hy_{i-1}, \\ y_0 = 1, \quad y_1, \end{cases}$$

donde y_1 lo hemos elegido a partir de un método de Runge–Kutta de orden 3 para un tamaño de paso prefijado h , vemos que la aproximación empieza a oscilar, con lo cual, a pesar de tener una aproximación local de orden 3, el error global crece de forma dramática. Veremos qué ocurre con este método, pero antes veamos cómo deducir los métodos de multipaso a partir de la integración numérica.

3.4 Métodos de multipaso deducidos a partir de la integración numérica

Partamos de la ecuación diferencial

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

y buscamos aproximar $\mathbf{y}(t_f; t_0, \mathbf{y}_0)$. Para ello fijamos $h = (t_f - t_0)/n$ y $t_i = t_0 + hi$, $i = 0, 1, \dots, n$. Integrando respecto de la variable independiente

$$\mathbf{y}(t_{i+1}; t_0, \mathbf{y}_0) - \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{y}'(t; t_0, \mathbf{y}_0) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)) dt.$$

Si queremos construir un método de p pasos, sustituimos $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0))$ por un polinomio de interpolación de grado p , que denominaremos $\mathbf{Q}(t)$, y que cumplirá la condición

$$\mathbf{Q}(t_i - jh) = \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{y}(t_i - jh; t_0, \mathbf{y}_0)), \quad j = i - p, \dots, i.$$

Este polinomio de interpolación verifica que

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)) = \mathbf{Q}(t) + \mathbf{E}(t),$$

donde $\mathbf{E}(t)$ es el error cometido al aproximar la función por el polinomio interpolador, y que será clave a la hora de determinar el error local cometido en la aproximación. El método numérico que hemos de construir tendrá la forma

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{q}(t) dt,$$

donde

$$\mathbf{q}(t_i - jh) = \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{y}_{i-j}), \quad j = i - p, \dots, i,$$

es decir, el polinomio interpolador sobre los datos anteriores que serán conocidos. El error local de truncamiento será en este caso

$$\mathbf{t}_{i+1} = \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{Q}(t) dt - \mathbf{y}(t_{i+1}; t_0, \mathbf{y}_0) = - \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{E}(t) dt,$$

es decir, dependerá del error que se comete al calcular el polinomio interpolador.

Vamos a ver a continuación cómo se construyen los métodos de multipaso explícitos e implícitos.

3.4.1 Métodos de Adams–Bashforth

Para construir estos métodos utilizamos la forma de Newton del polinomio interpolador dada por las diferencias finitas. Dada la sucesión x_i , se definen

$$\nabla^1 x_i = \nabla x_i = x_i - x_{i-1},$$

y para $k > 1$,

$$\nabla^k x_i = \nabla^{k-1} x_i - \nabla^{k-1} x_{i-1}.$$

Por ejemplo

$$\nabla^2 x_i = \nabla x_i - \nabla x_{i-1} = (x_i - x_{i-1}) - (x_{i-1} - x_{i-2}) = x_i - 2x_{i-1} + x_{i-2},$$

y

$$\begin{aligned}\nabla^3 x_i &= \nabla^2 x_i - \nabla^2 x_{i-1} \\ &= (x_i - 2x_{i-1} + x_{i-2}) - (x_{i-1} - 2x_{i-2} + x_{i-3}) \\ &= x_i - 3x_{i-1} + 3x_{i-2} - x_{i-3}.\end{aligned}$$

Por convenio, estableceremos que $\nabla^0 x_i = x_i$.

Si $t = t_i + sh$, el polinomio de interpolación tiene la forma

$$\begin{aligned}\mathbf{q}(t) &= \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + s\nabla\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \binom{s+1}{2} \nabla^2\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \dots + \binom{s+p-1}{p} \nabla^p\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) \\ &= \sum_{j=0}^p \binom{s+j-1}{j} \nabla^j\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i),\end{aligned}$$

donde

$$\binom{m}{k} = \frac{m(m-1)\dots(m-k+1)}{k!}$$

para $m \in \mathbb{R}$ y $k \in \mathbb{N}$, y

$$\binom{m}{0} = 1.$$

Además, el error del polinomio de interpolación

$$\mathbf{E}(t) = \binom{s+p}{p+1} h^{p+1} \mathbf{f}^{(p+1)}(t_i, \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0)) + \mathcal{O}(h^{p+2}).$$

Como $s = \frac{t-x_i}{h}$, reescribimos

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{q}(t) dt = \mathbf{y}_i + h \int_0^1 \mathbf{q}(x_i + sh) ds.$$

El método de Adams–Bashforth se construye a partir del desarrollo

$$\begin{aligned}
 \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h \int_0^1 \mathbf{q}(x_i + sh) ds \\
 &= \mathbf{y}_i + h \left(\int_0^1 \sum_{j=0}^p \binom{s+j-1}{j} \nabla^j \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) ds \right) \\
 &= \mathbf{y}_i + h \left(\sum_{j=0}^p \nabla^j \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) \int_0^1 \binom{s+j-1}{j} ds \right) \\
 &= \mathbf{y}_i + h \sum_{j=0}^p \gamma_j \nabla^j \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i),
 \end{aligned}$$

donde los coeficientes

$$\begin{aligned}
 \gamma_0 &= 1, \\
 \gamma_j &= \int_0^1 \binom{s+j-1}{j} ds, \quad j = 1, 2, \dots, p,
 \end{aligned}$$

se calculan de forma directa. De hecho, los primeros coeficientes son

γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5	γ_6
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{251}{720}$	$\frac{95}{288}$	$\frac{19087}{60480}$

Además, el error local de truncamiento es de la forma

$$\mathbf{t}_{i+1} = -h^{p+2} \gamma_{p+1} \mathbf{y}^{p+2}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) + \mathcal{O}(h^{p+3}),$$

por lo que es orden $\mathcal{O}(h^{p+2})$. Así, si buscamos un método de error global $\mathcal{O}(h^3)$, necesitaremos que $p = 2$, siendo el método de la forma

$$\begin{aligned}
 \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h \left(\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \frac{5}{12} \nabla^2 \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) \right) \\
 &= \mathbf{y}_i + h \left(\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \frac{1}{2} [\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{5}{12} [\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) - 2\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + \mathbf{f}(t_{i-2}, \mathbf{y}_{i-2})] \right) \\
 &= \mathbf{y}_i + \frac{1}{12} h (23\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) - 16\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}) + 5\mathbf{f}(t_{i-2}, \mathbf{y}_{i-2})).
 \end{aligned}$$

Como vemos, al método de Adams–Bashforth le podemos aplicar el teorema de convergencia global, por lo que será convergente, al contrario de lo que ocurría con el primer ejemplo que estudiamos.

3.4.2 Métodos de Adams–Moulton

Los métodos de Adams–Moulton se obtienen de igual manera que los explícitos de Adams–Basfhforth, pero ahora tomando el polinomio interpolador en $t = t_{i+1} + sh$, con lo que

$$\mathbf{q}^*(t) = \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) + s \nabla \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) + \binom{s+1}{2} \nabla^2 \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \dots + \binom{s+p-1}{p} \nabla^p \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1})$$

$$= \sum_{j=0}^p \binom{s+j-1}{j} \nabla^j \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}),$$

con lo que, como $s = \frac{t-x_{i+1}}{h}$, reescribimos

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{q}^*(t) dt = \mathbf{y}_i + h \int_{-1}^0 \mathbf{q}^*(x_i + sh) ds.$$

Desarrollando, obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h \int_{-1}^0 \mathbf{q}(x_i + sh) ds \\ &= \mathbf{y}_i + h \left(\int_{-1}^0 \sum_{j=0}^p \binom{s+j-1}{j} \nabla^j \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) ds \right) \\ &= \mathbf{y}_i + h \left(\sum_{j=0}^p \nabla^j \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) \int_{-1}^0 \binom{s+j-1}{j} ds \right) \\ &= \mathbf{y}_i + h \sum_{j=0}^p \gamma_j^* \nabla^j \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}), \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} \gamma_0^* &= 1, \\ \gamma_j^* &= \int_{-1}^0 \binom{s+j-1}{j} ds, \quad j = 1, 2, \dots, p, \end{aligned}$$

y el error local de truncamiento es

$$\mathbf{t}_{i+1} = -h^{p+2} \gamma_{p+1}^* \mathbf{y}^{p+2}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0) + \mathcal{O}(h^{p+3}).$$

Los primeros coeficientes son en este caso

γ_1^*	γ_2^*	γ_3^*	γ_4^*	γ_5^*	γ_6^*
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{3}{160}$	$-\frac{863}{60480}$

Tomando $p = 2$ obtenemos el método de dos pasos y orden tres

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h \left(\mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) - \frac{1}{2} \nabla \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) - \frac{1}{12} \nabla^2 \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) \right) \\ &= \mathbf{y}_i + \frac{h}{12} (5\mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) + 8\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) - \mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1})). \end{aligned}$$

A la hora de aproximar \mathbf{y}_{i+1} , démonos cuenta de que si definimos

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{y}_{i+1}) &= \mathbf{y}_i + h \sum_{j=0}^p \gamma_j^* \nabla^j \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}), \\ &= \mathbf{y}_i + h \sum_{j=0}^p \beta_j^* \mathbf{f}(t_{i+1-j}, \mathbf{y}_{i+1-j}), \end{aligned}$$

por lo que

$$\begin{aligned} \|\mathbf{G}(\mathbf{y}) - \mathbf{G}(\mathbf{z})\| &= h|\beta_0^*| \|\mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{z})\| \\ &\leq h|\beta_0^*|L\|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|, \end{aligned}$$

dado que \mathbf{f} es Lipschitziana en la variable \mathbf{y} . Así, para que se pueda aplicar el Teorema del punto fijo a \mathbf{G} hemos de elegir tamaños de paso h suficientemente pequeños para que

$$h|\beta_0^*|L < 1.$$

3.5 Estabilidad de los métodos multipaso lineales

Sea $\mathbf{y}(t; t_0, \mathbf{y}_0)$ la solución del problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

y sean $t_f > t_0$, y $h = \frac{t_1 - t_0}{n}$. Sea \mathbf{y}_{i+1} la aproximación de $\mathbf{y}(t_{i+1}; t_0, \mathbf{y}_0)$ dada por el método multipaso

$$\mathbf{y}_{i+1} = \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}_{i-j} + h \sum_{j=0}^p b_j \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{y}_{i-j}), \quad (3.3)$$

donde los coeficientes se han escogido de manera que el error local de truncamiento es $\mathcal{O}(h^k)$, $k \leq p+1$. Como sabemos, la convergencia local no implica necesariamente la convergencia global. Vamos a ver qué propiedad adicional hemos de añadir a la convergencia local para que el método sea globalmente convergente.

Para ello, aplicamos el método al problema

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{0}, \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \end{cases}$$

con lo que el método multipaso queda como

$$\mathbf{y}_{i+1} = \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{y}_{i-j},$$

o equivalentemente

$$\mathbf{y}_{i+1} - a_0 \mathbf{y}_i - a_1 \mathbf{y}_{i-1} - \dots - a_p \mathbf{y}_{i-p} = 0,$$

que es una ecuación en diferencias lineal cuyo polinomio característico es

$$p(\lambda) = \lambda^{p+1} - a_0 \lambda^p - \dots - a_p.$$

Por la condición de convergencia local, sabemos que

$$p(1) = 1 - \sum_{j=0}^p a_j = 0,$$

por lo que 1 es solución particular de la ecuación en diferencias. Dicha ecuación, será entonces estable si las restantes raíces de $p(\lambda)$ tienen módulo menor o igual que uno, y si éste es uno, se trata de una raíz simple. En este caso, el método (3.3) puede escribirse como

$$\begin{cases} \mathbf{z}_{i+1}^1 = \mathbf{z}_i^2, \\ \mathbf{z}_{i+1}^2 = \mathbf{z}_i^3, \\ \dots \\ \mathbf{z}_{i+1}^p = \mathbf{z}_i^{p+1}, \\ \mathbf{z}_{i+1}^{p+1} = \sum_{j=0}^p a_j \mathbf{z}_i^{p-j+1} + h \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{z}_i^{p-j+1}), \end{cases}$$

donde $\mathbf{z}_i^{p-j+1} = \mathbf{y}_{i-j}$, $j = 0, 1, \dots, p$. Matricialmente lo escribimos como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{z}_{i+1}^1 \\ \mathbf{z}_{i+1}^2 \\ \dots \\ \mathbf{z}_{i+1}^p \\ \mathbf{z}_{i+1}^{p+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ a_0 & a_1 & a_2 & \dots & a_{p-1} & a_p \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{z}_i^1 \\ \mathbf{z}_i^2 \\ \dots \\ \mathbf{z}_i^p \\ \mathbf{z}_i^{p+1} \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \dots \\ \mathbf{0} \\ \sum_{j=-1}^p b_j \mathbf{f}(t_i - jh, \mathbf{z}_{i+1}^{p-j+1}) \end{pmatrix}.$$

Si la matriz

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ a_0 & a_1 & a_2 & \dots & a_{p-1} & a_p \end{pmatrix}$$

tiene radiopectral

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{A}) &= \max \{ |\mu| : \mu \text{ valor propio de } \mathbf{A} \} \\ &= \max \{ |\mu| : p(\mu) = 0 \} \leq 1, \end{aligned}$$

entonces si $b_{-1} = 0$, el método multipaso verifica las condiciones del teorema de convergencia global, por lo que si el método es estable de orden local de truncamiento $\mathcal{O}(h^{k+1})$, entonces será convergente de orden $\mathcal{O}(h^{k+1})$. Si $b_{-1} \neq 0$, la estabilidad también implica la convergencia, aunque la demostración sale fuera de los contenidos del curso.

Si consideramos el método del ejemplo inicial,

$$\mathbf{y}_{i+1} = -4\mathbf{y}_i + 5\mathbf{y}_{i-1} + 4h\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + 2h\mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}).$$

vemos que

$$p(\lambda) = \lambda^2 + 4\lambda - 5,$$

que tiene por raíces 1 y -5, por lo que el método no es estable, y de ahí su divergencia. Para conseguir un método convergente, hemos de imponer que el orden local de truncamiento sea una unidad menor, esto es, quedarnos con las ecuaciones

$$\begin{cases} a_0 + a_1 = 1, \\ -a_1 + b_0 + b_1 = 1, \\ a_1 - 2b_1 = 1, \end{cases}$$

que nos da el conjunto uniparamétrico de soluciones

$$\begin{cases} a_0 = -2\mu, \\ a_1 = 1 + 2\mu, \\ b_0 = 2 + \mu, \\ b_1 = \mu, \end{cases} \quad \mu \in \mathbb{R},$$

que da lugar a la familia de métodos

$$\mathbf{y}_{i+1} = -2\mu\mathbf{y}_i + (1 + 2\mu)\mathbf{y}_{i-1} + (2 + \mu)h\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + \mu h\mathbf{f}(t_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}),$$

con polinomio característico

$$p(\lambda) = \lambda^2 + 2\mu\lambda - (1 + 2\mu),$$

que para ser estable de cumplir que

$$-1 \leq 1 + 2\mu \leq 1,$$

o equivalentemente

$$-1 \leq \mu \leq 0,$$

y eligiendo $\mu = 0$, obtenemos el método

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_{i-1} + 2h\mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i),$$

conocido como la regla del punto medio. Es obviamente estable ya que

$$p(\lambda) = \lambda^2 - 1,$$

cuyas raíces son ± 1 .

3.6 Fórmulas BDF

Las fórmulas BDF se basan en la utilización del polinomio interpolador en los puntos \mathbf{y}_{i+1-j} , $j = 0, 1, \dots, p$, $h = \frac{t_f - t_0}{n}$, de la solución aproximada dada por

$$\mathbf{q}(s) = \sum_{j=0}^p \binom{s+j-1}{j} \nabla^j \mathbf{y}_{i+1},$$

cuyo error es

$$\mathbf{E}(t) = \binom{s+p}{p+1} h^{p+1} \mathbf{f}^{p+1}(t_i, \mathbf{y}(t_i; t_0, \mathbf{y}_0)) + \mathcal{O}(h^{p+2}).$$

y suponemos que se verifica la ecuación diferencial para dicho polinomio en t_{i+1} , esto es,

$$\mathbf{q}'(0) = \mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{q}(t_{i+1})).$$

Por una parte, $\mathbf{q}(t_{i+1}) = \mathbf{y}_{i+1}$, y por otra, dado que $t = t_{i+1} + sh$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}'(s) &= \frac{d}{ds} \left(\sum_{j=0}^p \binom{s+j-1}{j} \nabla^j \mathbf{y}_{i+1} \right) \\ &= \sum_{j=0}^p h^{-1} \frac{d}{dt} \left(\binom{s+j-1}{j} \right) \nabla^j \mathbf{y}_{i+1}. \end{aligned}$$

Como

$$\binom{s+j-1}{j} = \frac{(s+j-1)(s+j-2)\dots(s+1)s}{j!} = g_j(s),$$

se tiene que

$$g'_j(0) = \begin{cases} \frac{(j-1)!}{j!} = \frac{1}{j} & \text{si } j > 0, \\ 0 & \text{si } j = 0, \end{cases}$$

de donde

$$\sum_{j=1}^p \frac{1}{j} \nabla^j \mathbf{y}_{i+1} = h\mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}),$$

que se conocen como las fórmulas BDF. Por ejemplo, si $p = 2$,

$$\begin{aligned} h\mathbf{f}(t_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}) &= \sum_{j=1}^2 \frac{1}{j} \nabla^j \mathbf{y}_{i+1} = \nabla \mathbf{y}_{i+1} + \frac{1}{2} \nabla^2 \mathbf{y}_{i+1} \\ &= \mathbf{y}_{i+1} - \mathbf{y}_i + \frac{1}{2} (\mathbf{y}_{i+1} - 2\mathbf{y}_i + \mathbf{y}_{i-1}) \\ &= \frac{3}{2} \mathbf{y}_{i+1} - 2\mathbf{y}_i + \frac{1}{2} \mathbf{y}_{i-1}, \end{aligned}$$

y como vemos es de dos pasos.

Como estos métodos son implícitos, de igual manera que pasaba con los métodos de Adams implícitos, el tamaño de paso h debe ser elegido para que el método iterativo sea convergente con constante de Lipschitz menor que uno. En cuanto al error de truncamiento local, puede probarse que es de orden $\mathcal{O}(h^{p+1})$.

3.7 Metodos predictor–corrector

Los métodos de predictor corrector se basan en utilizar alternativamente métodos multipaso explícitos e implícitos de un mismo orden para aproximar la solución. El método explícito se usa para obtener la condición inicial con la que obtener el mediante un método iterativo, una mejor aproximación con el método implícito.

Por ejemplo, consideramos como predictor el método explícito

$$y_{i+1} = -4y_i + 5y_{i-1} + 4hy_i + 2hy_{i-1}, \quad (3.4)$$

y como corrector, consideramos de entre la familia

$$\mathbf{y}_{i+1} = a_0 \mathbf{y}_i + a_1 \mathbf{y}_{i-1} + hb_{-1} \mathbf{f}(t_i + h, \mathbf{y}_{i+1}) + hb_0 \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) + hb_1 \mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}),$$

dados por el sistema

$$\begin{cases} a_0 = 1 - \lambda, \\ a_1 = \lambda, \\ b_{-1} = \frac{5}{12} - \lambda, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \\ b_0 = \frac{2}{3} - 3\lambda, \\ b_1 = -\frac{1}{12} + 5\lambda, \end{cases}$$

Para obtener un método convergente, calculamos las raíces de

$$p(t) = t^2 + (\lambda - 1)t - \lambda,$$

que son

$$\begin{aligned} t &= \frac{1 - \lambda \pm \sqrt{(1 - \lambda)^2 + 4\lambda}}{2} \\ &= \frac{1 - \lambda \pm \sqrt{(1 + \lambda)^2}}{2} = \frac{1 - \lambda \pm (1 + \lambda)}{2}, \end{aligned}$$

que nos da 1 y $-\lambda$ como soluciones, por lo que el método con $\lambda = 0$, dado por

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \frac{5}{12} \mathbf{f}(t_i + h, \mathbf{y}_{i+1}) + h \frac{2}{3} \mathbf{f}(t_i, \mathbf{y}_i) - h \frac{1}{12} \mathbf{f}(t_i - h, \mathbf{y}_{i-1}), \quad (3.5)$$

será convergente.

Un esquema para aplicar estos métodos sería el siguiente:

- Como el método es de orden 2, utilizamos un método de Runge–Kutta de orden 3 para estimar \mathbf{y}_1 .
- Predecimos el valor de \mathbf{y}_2 por \mathbf{y}_2^* con el método (3.4). Como el error local es de orden 4, esta aproximación será de este orden.
- Mejoramos la aproximación anterior calculando \mathbf{y}_2 con el método (3.5), tomando como punto inicial para hacer las iteraciones el punto \mathbf{y}_2^* .
- Cuando el valor obtenido de \mathbf{y}_2 sea aceptable, volvemos a aplicar los dos puntos anteriores para obtener \mathbf{y}_3 , y así sucesivamente.

Hemos de destacar que el método (3.5) sí es estable y por tanto convergente.

3.8 Multipaso o Runge–Kutta

La elección del método numérico utilizado para obtener la solución aproximada depende en gran medida del coste de computación de la función \mathbf{f} . Si este coste es bajo, en general utilizaríamos un método de Runge–Kutta, pero cuando este es alto utilizamos uno de multipaso, ya que el coste computacional de cálculo de \mathbf{f} es menor en este caso. Además, las distintas evaluaciones de \mathbf{f} en etapas anteriores se pueden utilizar en varios pasos, por lo que no cada vez que se aplica el método multipaso hay que evaluar la función \mathbf{f} en todos los pasos.

Parte II

Bloque de práctica

Capítulo 4

Introducción a Mathematica

Sumario. Generalidades de Mathematica. Funciones, derivadas, representación gráfica de funciones.

Mathematica es un programa que permite hacer cálculos matemáticos complicados con gran rapidez. Para entendernos, es como una calculadora gigante a la que no sólo podemos pedirle que haga cálculos numéricos, sino que también hace derivadas, cálculo de primitivas, representación gráfica de curvas y superficies, etcétera.

Abordaremos en esta práctica una iniciación a Mathematica partiendo desde cero, intentando poner de manifiesto su utilidad a la hora de trabajar con expresiones matemáticas complicadas, bien sean éstas numéricas o simbólicas, permitiendo hacer operaciones en poco coste de tiempo y con bastante facilidad.

Pretendemos con esta práctica introducir al alumno en el manejo de este potente programa que puede servirle de utilidad en futuros cálculos que deba realizar. Esencialmente vamos a aprender a utilizar el programa, por lo que esta práctica trata de explicar como pedirle a Mathematica que haga aquello que nosotros deseamos. Además, el programa puede utilizarse para corregir los problemas propuestos al alumno en la clase de problemas.

A pesar de la utilidad del programa, debemos hacer hincapié en el hecho de que es necesario por parte del alumno un conocimiento matemático teórico de todas las funciones y sentencias que vamos a usar. Por ejemplo, aunque una calculadora multiplica números con suma facilidad, sólo nos percatamos de su potencia en cuanto conocemos dicha operación y somos capaces de realizarla de un modo mucho más lento. Con Mathematica ocurre lo mismo. Sólo conociendo teóricamente las operaciones que Mathematica realiza nos percataremos de su utilidad.

4.1 Preliminares

Cuando se arranca Mathematica, aparece una pantalla blanca vacía. En ella podemos escribir aquellas operaciones que queremos que realice. Una vez tecleada la operación, hemos de pulsar las teclas *shift + enter* para obtener el resultado. Por ejemplo, supongamos que queremos hacer la

operación $2 + 2$. Teclearemos entonces

$$2 + 2$$

en la pantalla. A continuación pulsamos *mayúsculas + enter* o la tecla *intro* en el teclado numérico y a continuación aparecerá en pantalla

$$\begin{aligned} \text{In}[1] &:= 2 + 2 \\ \text{Out}[1] &= 4. \end{aligned}$$

Todas las operaciones realizadas por el programa cuando se pulsan las teclas mayúsculas + enter tienen asignadas un número de entrada marcado por $\text{In}[\cdot]$ y el mismo número de salida cuando se realiza la operación marcada por $\text{Out}[\cdot]$. Podrá aparecer únicamente un número de entrada, como veremos posteriormente. Al ir explicando las diferentes operaciones que Mathematica realiza, iremos escribiéndolas en la forma en que el programa lo escribe en la pantalla de ordenador.

Además de la suma se pueden realizar las siguientes operaciones algebraicas como si se tratara de una calculadora:

$x + y$	suma de números
$x - y$	resta de números
x/y	división de números
$x y$ $x * y$	producto de números
x^y	potencia x^y

Cuando Mathematica realiza alguna de las siguientes operaciones, por ejemplo $1/3 + 2/7$, operará estos números ofreciendo siempre su valor exacto, es decir, se tiene

$$\begin{aligned} \text{In}[2] &:= 1/3 + 2/7 \\ \text{Out}[2] &= \frac{13}{21}. \end{aligned}$$

Sin embargo, a veces nos es más útil tener el valor de este número expresado con cifras decimales. Para ello se tienen las sentencias

$$\begin{aligned} &x//\text{N} \ \text{N}[x] \\ &\text{N}[x, n]. \end{aligned}$$

Las primeras escriben el número x con seis cifras significativas, mientras que la segunda escribe dicho número con un número n de cifras significativas que nosotros prefijamos (en la versión 4.0 del programa y posteriores esta última sentencia no siempre funciona del modo deseado). Por ejemplo, si escribimos

$$\begin{aligned} \text{In}[3] &:= 1/3 + 2/7 //\text{N} \\ \text{Out}[3] &= 0.619048, \end{aligned}$$

obtendremos el resultado con 6 cifras significativas. Si por el contrario escribimos

$$\begin{aligned} \text{In}[4] &:= \text{N}[1/3 + 2/7, 10] \\ \text{Out}[4] &= 0.619047619 \end{aligned}$$

lo obtendremos con un número 10 cifras significativas.

En caso de las operaciones numéricas también tendremos una valor numérico aproximado con seis cifras significativas si en la operación escribimos algún número en forma decimal. Así, al teclear

```
In[5] := 1./3 + 2/7
Out[5] = 0.619048.
```

Mathematica distingue así entre operaciones algebraicas exactas y operaciones numéricas aproximadas.

4.2 Paréntesis, corchetes y llaves

Mathematica distingue entre paréntesis, corchetes y llaves. Cada uno de estos elementos realiza una labor bien diferenciada en la estructura interna del programa. A grosso modo podemos indicar las siguientes generalidades:

- Los paréntesis se usan en las operaciones algebraicas para indicar la preferencia a la hora de hacer las operaciones. Así el paréntesis de

```
In[6] := (1 + 3)/7
Out[6] = 4/7
```

se usa para indicar que primero hacemos la suma $1+3$ y luego dividimos entre 7. Hemos de señalar que Mathematica sigue el orden conocido de preferencia sobre las operaciones. Así por ejemplo, si escribimos

```
In[7] := 1 + 3/7
Out[7] = 10/7
```

vemos como el resultado cambia notablemente al realizarse en primer lugar la división y posteriormente la suma.

- Los corchetes $[.]$ se usan para escribir el argumento de una función bien sea matemática, bien sea una operación específica del programa. Por ejemplo la función $\sin x$ se escribe $\text{Sin}[x]$, y para escribir un número x real con seis cifras significativas escribimos $\text{N}[x]$.
- Las llaves $\{\cdot\}$ se utilizan para asignar valores numéricos a las variables, por ejemplo a la hora de calcular límites de funciones. También se usan para construir conjuntos o listas de objetos matemáticos, como por ejemplo matrices o vectores.

En general es conveniente tener claro en qué momento se han de emplear los paréntesis, los corchetes y las llaves, ya que si confundimos su uso y escribimos por ejemplo $\text{Sin}\{x\}$ o $\text{Sin}(x)$ en lugar de $\text{Sin}[x]$, el programa nos lo hará saber mandándonos un mensaje de error de color azul.

Actividad 1 Realizar las siguientes operaciones con Mathematica:

$$(a) \frac{2.4+3^2}{4*7.2^2} \quad (b) (2 - 3.1)^{23} \quad (c) 3.75 + 8.987$$
$$(d) (3 + 4 * 5)^{5.6} \quad (e) \left(\frac{2.3 * 4}{2 - 4.5^2} \right)^{56} \quad (f) 2 \times 10^2 + 3 \times 10^{-3}$$
$$(g) (1 + i)(3 - i) \quad (h) \frac{1 + i}{3 - i} \quad (i) (1 + i)^7$$

Actividad 2 Dar los resultados de la aplicación 1 con 15 cifras significativas.

4.2.1 Errores

Puede ocurrir que al teclear una operación en Mathematica y pulsar las teclas mayúscula + enter, el programa nos devuelva una salida conteniendo frases de color azul. Esto ocurre cuando hay algún tipo de error o problema que el programa detecta. Estos errores pueden ser básicamente de dos tipos:

- Errores en la sintaxis de una sentencia. Por ejemplo al escribir $[1 + 2] * 3$ en vez de $(1 + 2) * 3$ o $N(\pi)$ en vez de $N[\pi]$.
- Errores producidos porque la expresión matemática o la operación realizada tiene algún problema, aunque esté bien escrita. Por ejemplo, si intentásemos calcular el determinante de una matriz no cuadrada.

Otras veces, el programa puede devolver un resultado erróneo aunque no nos escriba frases azules. Es decir el programa no detecta ningún error a pesar de que éste existe. Por ésto es necesario saber qué estamos esperando de la operación que hemos pedido que el programa nos haga para así criticar el resultado y valorarlo en su justa medida. No debeis nunca de olvidar que el programa calcula rápidamente, pero es tonto.

4.3 Funciones matemáticas de interés

Mathematica posee una serie de funciones matemáticas predefinidas que se escriben del siguiente modo:

$\text{Sqrt}[x] = \sqrt{x}$	$\text{Exp}[x] = e^x$
$\text{Log}[x] = \log x$	$\text{Log}[b, x] = \log_b x$
$\text{Sin}[x] = \sin x$	$\text{Cos}[x] = \cos x$
$\text{ArcSin}[x] = \arcsin x$	$\text{ArcCos}[x] = \arccos x$
$\text{Tan}[x] = \tan x$	$\text{ArcTan}[x] = \arctan x$
$n! = \text{factorial de } n$	$\text{Round}[x] = \text{parte entera de } x$
$\text{Abs}[x] = x $	$\text{FactorInteger}[n] = \text{factores primos de } n$

Es importante destacar que hemos de escribir las funciones tal y como se detalla en la anterior tabla, respetando la sintaxis totalmente. Mathematica distingue entre letras mayúsculas y minúsculas, y todas las funciones empiezan con letra mayúscula. Entonces podemos calcular

```
In[7] := Sqrt[16]
Out[7] = 4
In[8] := Sqrt[2]
Out[8] = √2
In[9] := Sqrt[2] //N
Out[9] = 1.41421
In[10] := N[Sqrt[7], 10]
Out[10] = 2.6457513111.
```

Las constantes matemáticas más interesantes son:

Pi	=	$\pi \simeq 3.14159$
E	=	$e \simeq 2.71828$
Infinity	=	∞
I	=	$i = \sqrt{-1}$
Degree	=	conversión de grados a radianes

Por ejemplo, para calcular el seno de 20 grados escribiríamos

```
In[11] := Sin[20 Degree] //N
Out[11] = 0.34202.
```

Si quisieramos mayor precisión en las anteriores constantes, debemos escribir

```
In[12] := N[Pi,10]
Out[12] = 3.1415926536,
```

que nos proporciona un valor del número π con diez cifras decimales.

Actividad 3 *Calcular los siguientes valores con 6 cifras significativas:*

$$(a) \sin 30^\circ + \cos 15^\circ \quad (b) \log_2 256 \quad (c) e^{10!}$$

$$(d) (\sin 1)^2 \quad (e) \sqrt{\log 34 + e^{12}} \quad (f) \left| \arcsin \frac{1}{2} + \frac{\log 2}{\sqrt{2}} \right|$$

4.4 Aprovechando cálculos anteriores

A veces es posible que tengamos que hacer una sucesión de cálculos consecutivos de manera que cada nueva operación se base en la anterior. Parece necesaria entonces una sentencia que nos remita a resultados anteriores sin tener que escribir la operación de nuevo. Dicha sentencia es %. Por ejemplo,

si queremos calcular $\cos(\sin 20^\circ)$ tendríamos que calcular primero $\sin 20^\circ$, para después calcular el coseno de dicha cantidad. Esta operación podríamos hacerla del modo siguiente:

```
In[13] := Sin[20 Degree] //N  
Out[13] = 0.34202  
In[14] := Cos[%]  
Out[14] = 0.942079.
```

Aquí $\text{Cos}[\%]$ nos calcula el coseno del resultado obtenido en la salida 13. Para remitirnos a un resultado obtenido dos pasos antes debemos escribir $\%\%$, y para resultados obtenidos k pasos antes escribiremos k símbolos $\%$. Para remitirnos a un resultado obtenido en la salida n podemos también escribir $\%n$. Por ejemplo $\text{Cos}[\%13]$ también nos remite a la salida 13.

4.5 Definición de variables y funciones

Supongamos que tenemos que hacer una serie de cálculos en los cuales interviene repetidamente una constante, como por ejemplo la constante de la gravitación universal, o al estudiar valores particulares de la función $f(x) = (1.45)^x + \sin x$. Es útil entonces definir variables con estos valores y funciones nuevas para minimizar el tiempo de escritura y hacer las operaciones de forma más ágil.

Las variables pueden ser designadas por letras o por sucesiones de letras. Supongamos que queremos definir la constante de la gravitación universal $G = 6.67 \times 10^{-11}$ con Mathematica. Entonces deberíamos hacer

```
In[15] := G = 6.67 * 10^-11  
Out[15] = 6.67 * 10^-11
```

Si ahora tenemos dos cuerpos de masa 3 kilogramos separados a una distancia de 10 metros, la fuerza con la que se atraen dichos cuerpos se calcula

```
In[16] := G * 3^2 / (10^2)  
Out[16] = 6.003 * 10^-12.
```

Para desposeer a G de su valor debemos teclear

```
In[17] := G = .
```

o bien

```
In[18] := Clear[G].
```

Algunas letras están asignadas ya por defecto por Mathematica y no pueden ser utilizadas para definir variables. Una de ellas es N. Si intentásemos escribir N=2, el programa devolverá una sentencia azul de error.

A la hora de trabajar con variables en Mathematica, hemos de tener en cuenta las siguientes reglas. Si x e y son dos variables que hemos definido con anterioridad, entonces

- $x y$ representará el producto $x \cdot y$.
- xy es una nueva variable formada por dos letras.
- $5x$ es el producto de 5 por x .
- x^2y es el producto x^2y y no x^{2y} .

Por otra parte, si en una misma línea queremos definir varias variables, o escribir varias expresiones debemos separar estas con ";" . Por ejemplo

```
In[19] := x = 1; y = 2; z = x + y
Out[19] = 3.
```

ha asignado el valor 1 a x , 2 a y y 3 a z , y sólo ha escrito el último valor. Si al final de la última expresión ponemos también ";" la operación no proporciona ninguna salida, es decir la expresión

```
In[20] := x = 1; y = 2; z = x + y;
```

no proporciona a continuación un Out[20] al pulsar mayúsculas + enter y asigna los mismos valores que en la sentencia anterior.

Para definir nuevas funciones hemos de usar la siguiente estructura:

$$\text{nomrefunción}[x_1-, x_2-, \dots, x_n-] := \text{expresión}.$$

El símbolo $-$ se usa para indicar que la letra que lo antecede es una variable de la función. Por ejemplo, para definir la función $f(x) = (1.45)^x + \sin x$ debemos escribir

```
In[21] := f[x] := 1.45^x + Sin[x].
```

Entonces si tecleamos

```
In[22] := f[1]
Out[22] := 3.18975.
```

obtenemos el valor de dicha función en 1. Para eliminar la función debemos escribir

```
In[23] := Clear[f, x]
```

indicando tanto la variable como el nombre de la función.

Hemos visto como introducir funciones escalares, pero a menudo es necesario trabajar con funciones vectoriales, por ejemplo la función

$$f(x, y, z) = (xy, x \sin z),$$

que como vemos es una función $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$. Para ello definimos la función como

```
In[24] := f[x-, y-, z-] := {x * y, x * Sin[z]}.
```

Si tecleamos ahora

```
In[25] := f[1, 1, Pi]  
Out[25] := {1, 0}
```

obtenemos un vector del plano. Para obtener las funciones coordenadas debemos escribir

```
In[26] := f[1, 1, Pi][[1]]  
Out[26] := 1
```

o

```
In[27] := f[1, 1, Pi][[2]]  
Out[27] := 0
```

según queramos trabajar con la primera o segunda coordenada.

4.6 Derivadas de funciones

Supongamos que tenemos una función de una variable real $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ a la que queremos calcular su derivada o derivada parcial respecto de alguna de sus variables. El comando que realiza ese cálculo con Mathematica es

$D[f, x]$ ó $D[f, x_i]$.

Por ejemplo si queremos calcular la derivada de $f(x) = \sin x$ escribiremos

```
In[24] := D[Sin[x], x]  
Out[24] = Cos[x],
```

especificando tanto la función como la variable respecto de la cual vamos a derivar. Para calcular la derivada parcial con respecto a la variable y de la función $f(x, y) = \sin(x + y)$ debemos escribir

```
In[25] := D[Sin[x + y], y]  
Out[25] = Cos[x + y].
```

Para calcular la derivada n -ésima de $f(x)$, hemos de proceder con el comando

$D[f, \{x, n\}]$.

Así la segunda derivada de $f(x) = \sin x$ se calcula tecleando

```
In[26] := D[Sin[x], \{x, 2\}]  
Out[26] = -Sin[x]
```

y $\frac{\partial^3 f}{\partial y^3}$ de la función $f(x, y) = \sin(x + y)$ sería

```
In[27] := D[Sin[x + y], \{y, 3\}]  
Out[27] = -Cos[x + y].
```

Si ahora queremos calcular derivadas parciales de funciones respecto de diferentes variables hemos de indicarlo del modo siguiente

$$\text{D}[f, x_1, x_2, \dots, x_n].$$

Así por ejemplo $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ de la función $f(x, y) = \sin(x + y)$ se calcula escribiendo

$$\begin{aligned} \text{In}[28] &:= \text{D}[\text{Sin}[x + y], x, y] \\ \text{Out}[28] &= -\text{Sin}[x + y]. \end{aligned}$$

Exercice 1 Calcula las derivadas de las siguientes funciones:

$$(a) f(x) = \log(\sin x). \quad (b) f(x) = \frac{\arcsin x}{e^x \log_4(x^2 + 10)}. \quad (c) f(x) = 1 + \left(\frac{3x + e^x}{x^2 + \tan \sqrt{x}} \right). \quad (d) f(x) = x^x.$$

Exercice 2 Demostrar que las funciones siguientes satisfacen la ecuación diferencial que aparece a su lado.

- (a) $y(x) = 2 - x + x^2$, de la ecuación $y' + y = x^2$.
- (b) $y(x) = \frac{1}{2}(e^{-x^2} + 1)$, de la ecuación $y' + 2xy = x$.
- (c) $y(x) = \sqrt{1 + x^2}$, de la ecuación $y'y = x$.
- (d) $y(x) = \frac{1}{4}(e^x - 2xe^{-x} - e^{-x})$, de la ecuación $y'' + 2y' + y = e^x$.

4.7 Representación gráfica de funciones

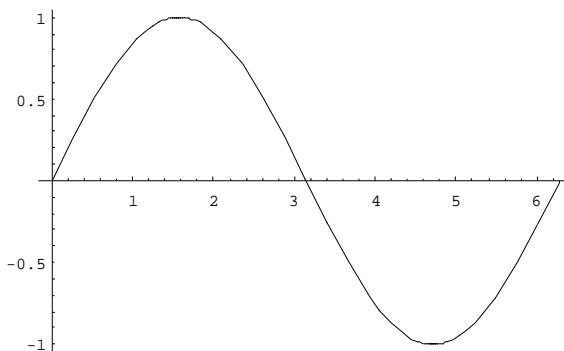
Mathematica permite hacer representaciones gráficas de funciones de una y varias variables. Para ello hemos de darle tanto la función, como el dominio de definición de ésta.

Para la representación gráfica de funciones reales de variable real, tenemos el comando

$$\text{Plot}[f[x], \{x, x_0, x_1\}],$$

donde indicamos la función, la variable de la función, y un intervalo $[x_0, x_1]$ donde hacer la representación. Así, para representar la función $f(x) = \sin x$ en el dominio $[0, 2\pi]$ escribimos

$$\text{In}[30] := \text{Plot}[\text{Sin}[x], \{x, 0, 2\text{Pi}\}].$$

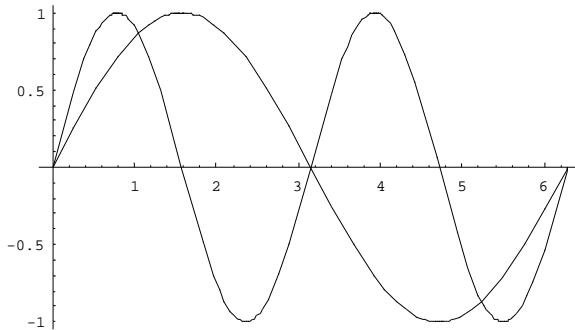


Para representar varias funciones a la vez hemos de escribir todas las funciones que deseemos representar entre llaves y separadas por comas, es decir

`Plot[{f1[x], f2[x], ..., fn[x]}, {x, x0, x1}].`

Si escribimos entonces

`In[31] := Plot[{Sin[x], Sin[2x]}, {x, 0, 2Pi}]`



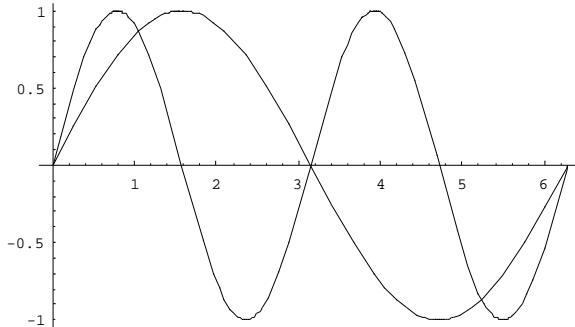
generaremos una representación gráfica simultánea de las funciones $\sin x$ y $\sin 2x$.

Para volver a representar gráfica una función ya representada previamente tenemos el comando

`Show[%n].`

Así, si escribimos

`In[33] := Show[%31],`



obtenemos una nueva representación gráfica simultánea de las funciones $\sin x$ y $\sin 2x$.

Exercice 3 Representar gráficamente las siguientes funciones de una variable:

$$(a) f(x) = \frac{1+x}{1-x^2} \text{ en el dominio } [-2, 2].$$

$$(b) f(x) = e^{x^2} \frac{1+x}{1-x^2} \text{ en el dominio } [-2, 2].$$

$$(c) f(x) = \sin\left(\frac{1+x}{1-x^2}\right) \text{ en el dominio } [-2, 2].$$

$$(d) f(x) = e^{x \cos x} \text{ en el dominio } [-5, 5].$$

$$(e) f(x) = \frac{e^x}{\cos x} \text{ en el dominio } [-\pi, \pi].$$

Exercice 4 Representar conjuntamente las gráficas de los apartados (a), (b) y (c) del ejercicio anterior.

Capítulo 5

Ecuaciones diferenciales con Mathematica

Sumario. Resolución de ecuaciones diferenciales: orden uno y ecuaciones lineales.

5.1 Ecuaciones diferenciales de primer orden

Veamos cómo Mathematica es capaz de resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. Podemos resolver tanto ecuaciones diferenciales de la forma

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

como problemas de condiciones iniciales de la forma

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0. \end{cases}$$

En primer lugar, hemos de aprender a escribir ecuaciones diferenciales de manera que Mathematica las entienda. Esto se hace siguiendo la siguiente forma

$$y'[x] == f[x, y[x]].$$

Para calcular todas las soluciones de dicha ecuación diferencial tenemos la sentencia

$$\text{DSolve}[y'[x] == f[x, y[x]], y[x], x],$$

indicando la ecuación y las variables dependiente e independiente. Así para resolver la ecuación $y' = xy$ escribiremos

$$\begin{aligned} \text{In[1]} &:= \text{DSolve}[y'[x] == x * y[x], y[x], x] \\ \text{Out[1]} &= \{\{y[x] \rightarrow E^{x^2/2} C[1]\}\} \end{aligned}$$

y la solución de la ecuación diferencial es de la forma $y(x) = C[1]e^{x^2/2}$, donde $C[1]$ es la constante que proviene de la integración.

Para resolver problemas de condiciones tenemos que utilizar la sentencia anterior escribiendo la ecuación diferencial y la condición inicial entre llaves y separadas por comas. Así el problema

$$\begin{cases} y' = xy \\ y(1) = 2 \end{cases}$$

se resuelve escribiendo

```
In[2] := DSolve[{y'[x] == x * y[x], y[1] == 2}, y[x], x]
Out[2] = {{y[x] → 2E^{-\frac{1}{2} + \frac{x^2}{2}}}}
```

cuya solución es $y(x) = 2e^{-\frac{1}{2} + \frac{x^2}{2}}$.

Exercise 5 Resolver las siguientes ecuaciones diferenciales de orden uno:

- (a) $yy' = \cos t, y(\pi) = 3.$
- (b) $y' = (1+x)(1+y).$
- (c) $\frac{y^2}{2} + 2ye^x + (y + e^x)y' = 0.$
- (d) $2xy^3 + 3x^2y^2y' = 0.$
- (e) $y' = x - y, y(0) = 0.$
- (f) $2xy^3 + 3x^2y^2y' = 0, y(2) = 4.$

Exercise 6 Hallar la familia de curvas que cumple que para todo punto (x,y) de la misma, la distancia entre (x,y) y el origen de coordenadas es igual a la longitud del segmento de la recta normal comprendido entre (x,y) y el punto de corte de la recta normal con el eje x .

Exercise 7 La población de medusas del Mar Menor varía de manera proporcional a la cantidad de medusas que hay en ese momento. Si inicialmente la población de medusas era de 100.000 individuos y al cabo de 2 años dicha población se triplicó, calcular la población al cabo de 10 años. Calcular la población de medusas para cada instante de tiempo t y calcular su límite cuando $t \rightarrow +\infty$. En virtud del resultado obtenido ¿te parece acertado el modelo? ¿qué pegas le encuentras?

Exercise 8 Un tanque contiene 40 l. de agua pura. Una solución salina con 100 gr. de sal por litro entra en el tanque a razón de 1.6 l/min. y sale del tanque a razón de 2.3 l/min. Se pide:

- (a) Determinar la concentración de sal en el tanque en cualquier tiempo.
- (b) Hallar la cantidad de agua en el tanque cuando la concentración de sal sea máxima.
- (c) Calcular la mayor cantidad de sal que llega a haber en el tanque en un momento dado.
- (d) Encontrar la concentración de sal en el tanque cuando éste tenga 25 l. de agua.

Exercise 9 La velocidad a la que se transmite una noticia en un grupo es directamente proporcional al número de individuos que aún no la conocen. Si inicialmente había 10 personas que sabían la noticia y a los 3 días la conocían 100 personas, determinar cuanta gente lo sabrá al mes de producirse la noticia (tomar como población de España 40.000.000).

5.2 Ecuaciones diferenciales lineales.

Finalizaremos estas prácticas indicando como resolver ecuaciones diferenciales lineales de orden mayor que uno, es decir, expresiones de la forma

$$y^{(n)} + p_1(x)y^{(n-1)} + \dots + p_{n-1}(x)y' + p_n(x)y = f(x), \quad (5.1)$$

donde $f(x)$ y las funciones $p_i(x)$, $1 \leq i \leq n$, son funciones continuas. En primer lugar, hemos de aprender a escribir la ecuación (5.1) de manera que el programa Mathematica la entienda. Esto se hace escribiendo:

$$y'^{n\prime}[x] + p_1[x]y'^{n-1\prime}[x] + \dots + p_{n-1}[x]y'[x] + p_n[x]y[x] == f[x]. \quad (5.2)$$

Nuevamente, la sentencia que se utiliza para resolver ecuaciones de este tipo es DSolve. Así, para resolver la ecuación (5.1) hemos de escribirla de la forma presentada en (5.2) dentro de una sentencia DSolve indicando la variable dependiente en primer lugar y la independiente a continuación. Por ejemplo, para resolver la ecuación

$$y'' - y = x$$

hemos de escribir

$$\text{In}[1] := \text{DSolve}[y''[x] - y[x] == x, y[x], x]$$

que proporciona la siguiente respuesta

$$\text{Out}[1] = \{\{y[x] \rightarrow -x + \text{E}^{-x}C[1] + \text{E}^x C[2]\}\},$$

de donde la solución general de la ecuación diferencial es $y(x) = -x + C[1]e^{-x} + C[2]e^x$, donde $C[1]$ y $C[2]$ son dos constantes que provienen de la integración. Podemos además resolver problemas de condiciones iniciales escribiendo éstas entre llaves. Por ejemplo, para resolver el problema anterior

$$\begin{cases} y'' - y = x \\ y(0) = 1; y'(0) = 0, \end{cases}$$

hemos de escribir lo siguiente:

$$\text{In}[2] := \text{DSolve}[\{y''[x] - y[x] == x, y[0] == 1, y'[0] == 0\}, y[x], x]$$

obteniendo

$$\text{Out}[2] = \{\{y[x] \rightarrow (\text{E}^{-x}x)(\text{E}^{2x} - \text{E}^x)\}\}.$$

Notemos aquí que las condiciones iniciales $C[1]$ y $C[2]$ han desaparecido al aplicar las condiciones $y(0) = 1$ e $y'(0) = 0$.

Exercice 10 Resolver las siguientes ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes constantes:

$$(a) 2y'' + y' + y = x.$$

$$(b) y'' + 2y' + y = xe^x, y(0) = 0, y'(0) = 1.$$

$$(c) y''' + 3y'' + 3y' + y = e^x.$$

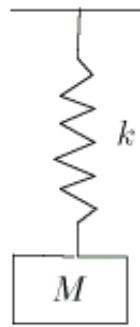
$$(d) y'' + 5y' + 6y = x^3 \cos x, y(1) = 1, y'(1) = 0.$$

$$(e) 2x^2y'' + xy' + y = 0.$$

5.3 Aplicaciones de las ecuaciones lineales con coeficientes constantes.

5.3.1 Movimiento armónico simple.

Como sabemos, el movimiento armónico simple es aquél producido al colocar una masa en muelle como muestra la siguiente figura



Entonces, si suponemos el cuerpo libre de rozamiento y lo desplazamos verticalmente respecto de su posición de equilibrio, dicho cuerpo comienza a moverse según la ecuación diferencial

$$my'' + ky = 0, \quad (5.3)$$

donde m es la masa del objeto y k es la constante de recuperación del muelle. Dado que la masa m y la constante k son positivas, puede comprobarse que para cualquier condición inicial, la solución de la ecuación (5.3) es de la forma

$$y(t) = c_1 \sin(\sqrt{k/m}t) + c_2 \cos(\sqrt{k/m}t),$$

donde c_1 y c_2 son dos constantes reales que se calcularán una vez tengamos las condiciones iniciales $y(0)$ e $y'(0)$. Si expresamos c_1 y c_2 en coordenadas polares

$$\begin{cases} c_1 = A \cos \varphi, \\ c_2 = A \sin \varphi, \end{cases}$$

obtenemos la expresión

$$y(t) = A \sin(\omega t + \varphi), \quad (5.4)$$

donde A recibe el nombre de amplitud, $\omega = +\sqrt{k/m}$ se conoce como frecuencia y φ como fase inicial.

Exercice 11 Supongamos que desplazamos el cuerpo de la posición de equilibrio 1 m. Se pide calcular las ecuaciones del movimiento para los siguientes valores de la masa y la constante de recuperación del muelle:

- (a) $m = 1$ kg. $k = 1$ N/m. e $y'(0) = 0$.
- (b) $m = 2$ kg. $k = 0.5$ N/m. e $y'(0) = 1$.

(c) $m = 1 \text{ kg.}$ $k = 4 \text{ N/m.}$ e $y'(0) = 2.$

Dibujar las gráficas de las funciones obtenidas al resolver las ecuaciones anteriores en el intervalo $[0, 10\pi]$ y comprobar que son periódicas, calculando el periodo de éstas. Obtener además la amplitud, frecuencia y fase inicial de los movimientos anteriores.

5.3.2 Movimiento amortiguado.

Si suponemos que sobre el cuerpo colgado del muelle anterior se ejerce una fuerza de rozamiento proporcional a la velocidad con constante de proporcionalidad c , sabemos que la ecuación del movimiento se escribe de la forma

$$my'' + cy' + ky = 0. \quad (5.5)$$

En este caso se presentan tres situaciones perfectamente diferenciadas:

- Movimiento *sobreamortiguado*. $c^2 - 4mk > 0.$
- Movimiento *críticamente amortiguado*. $c^2 - 4mk = 0.$
- Movimiento *subamortiguado*. $c^2 - 4mk < 0.$

En esta sección, pedimos resolver el siguiente problema.

Exercice 12 Desplazamos de nuevo el cuerpo de la posición de equilibrio 1 m. Calcular las ecuaciones del movimiento en los siguientes casos:

(a) $m = 1 \text{ kg.}; c = 1 \text{ N} \cdot \text{sg}/m$ y $k = 4 \text{ N/m.}$

(b) $m = 1 \text{ kg.}; c = 2 \text{ N} \cdot \text{sg}/m$ y $k = 1 \text{ N/m.}$

(c) $m = 1 \text{ kg.}; c = 3 \text{ N} \cdot \text{sg}/m$ y $k = 1 \text{ N/m.}$

(d) $m = 1 \text{ kg.}; c = 4 \text{ N} \cdot \text{sg}/m$ y $k = 4 \text{ N/m.}$

(e) $m = 1 \text{ kg.}; c = 3 \text{ N} \cdot \text{sg}/m$ y $k = 5 \text{ N/m.}$

Determinar qué tipo de movimiento se obtiene en cada caso y hacer sucesivas representaciones gráficas de las funciones anteriores en los intervalos $[0, 2\pi]$, $[0, 4\pi]$, $[0, 8\pi]$ y $[0, 20\pi]$. ¿Qué información puedes obtener de las gráficas de las funciones? Caracteriza cualitativamente el movimiento sobreamortiguado, críticamente amortiguado y subamortiguado.

Exercice 13 Hacer un estudio comparativo de los movimientos generados por los apartados de la Actividad 12 con el de un movimiento armónico simple tal que m y k tengan el valor que tenían en el apartado $y c = 0$. Representar a la vez las gráficas de las funciones obtenidas al resolver la ecuación amortiguada y la no amortiguada. Como orientación podeis tomar los intervalos dados en el ejercicio 12 para hacer las comparaciones.

5.3.3 Movimiento forzado.

Supondremos ahora que el cuerpo que inicialmente considerábamos colgado de un muelle, además de estar sujeto a fuerzas de rozamiento, está afectado por una fuerza $F(t)$ que modifica y condiciona su movimiento. Hablaremos entonces de movimiento forzado, cuya ecuación de movimiento viene dada por la ecuación diferencial

$$my'' + cy' + ky = F(t). \quad (5.6)$$

Exercice 14 Resolver el problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} y'' + 4y = F(t) \\ y(0) = y'(0) = 0 \end{cases}$$

en los siguientes casos:

- (a) $F(t) = 1$. (b) $F(t) = \cos t$. (c) $F(t) = \sin t$.
(d) $F(t) = \cos(2t)$. (e) $F(t) = \sin(2t)$. (f) $F(t) = e^t$.
(g) $F(t) = t$. (h) $F(t) = \sin(2.1t)$. (i) $F(t) = \cos(1.9t)$.

Hacer un estudio de las gráficas de las funciones resultantes en un intervalo de la forma $[0, T]$, aumentando el valor de T progresivamente, como en el ejercicio 12. ¿Qué gráficas parecen acotadas? ¿Qué explicación le das para el caso en que las gráficas no estén acotadas?

Exercice 15 Resolver la ecuación diferencial correspondiente a un muelle donde $m = 1$, $c = 2$ y $k = 2$

$$y'' + 2y' + 2y = 0.$$

Obtener a continuación para cada uno de los siguientes apartados la solución particular de la ecuación no homogénea correspondiente y la representación gráfica por separado y conjunta de la solución particular de la ecuación no homogénea y de la solución de los problemas de condiciones iniciales correspondientes en los intervalos $[0, 1]$, $[0, 2]$, $[0, 5]$ y $[0, 10]$.

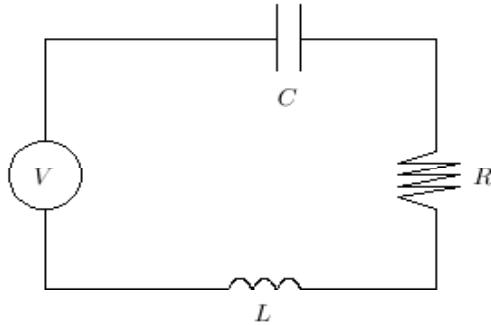
- (a) $y'' + 2y' + 2y = \cos t$, $x(0) = 1$, $x'(0) = 0$.
(b) $y'' + 2y' + 2y = e^{-t}$, $x(0) = 1$, $x'(0) = 0$.
(c) $y'' + 2y' + 2y = t^2 + 1$, $x(0) = 1$, $x'(0) = 0$.

¿Qué consecuencias puedes sacar a partir de las gráficas obtenidas?

5.4 Aplicación a los circuitos eléctricos

Consideremos un circuito eléctrico que lleve en serie una bobina de inductancia L , una resistencia R , un condensador de capacidad C y que es alimentado por una f.e.m. $V(t)$, según muestra la siguiente

figura



Suponiendo que L , R y C son constantes, mediante física elemental se sabe que el voltaje generado $V(t)$ se consume en todos los elementos del circuito, es decir,

$$V(t) = V_C + V_R + V_L$$

donde V_C , V_R y V_L representan la diferencia de potencial entre el condensador, la resistencia y la bobina respectivamente. Sabiendo que

$$V_C = \frac{q(t)}{C},$$

donde $q(t)$ es la carga en cada instante de tiempo,

$$V_R = Rq'(t)$$

y

$$V_L = Lq''(t),$$

obtenemos la ecuación lineal de orden dos

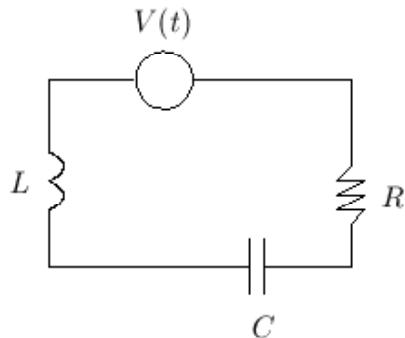
$$Lq''(t) + Rq'(t) + q(t)/C = V(t). \quad (5.7)$$

Teniendo en cuenta que la intensidad $i(t)$ se define como la derivada de la carga $q(t)$ obtenemos la ecuación en términos de la intensidad

$$Li''(t) + Ri'(t) + i(t)/C = V'(t) \quad (5.8)$$

Como puede apreciarse, las ecuaciones (5.7) y (5.8) son idénticas a la ecuación que proviene de la vibración de un muelle. Así, cabe el mismo análisis para circuitos que hicimos en el apartado anterior.

Exercice 16 Consideremos el circuito eléctrico de la figura.



Calcular la intensidad de corriente que pasa por los cables de dicho circuito en los siguientes casos, haciendo un estudio gráfico de la misma, suponiendo que el circuito está descargado ($i(0) = i'(0) = 0$):

- (a) $C = 1F; R = 1\Omega; L = 0H; V(t) = \sin t.$
- (b) $C = 1F; R = 2\Omega; L = 0H; V(t) = e^t \cos(2t).$
- (c) $C = 2F; R = 3\Omega; L = 1H; V(t) = e^{3t}.$
- (d) $C = 1F; L = 1H; V(t) = \sin t.$
- (e) $C = 0.5F; R = 1\Omega; L = 1H; V(t) = t^2.$
- (f) $C = 0.25F; R = 4\Omega; L = 2H; V(t) = -t \cos t.$

Capítulo 6

Programación en Mathematica

Sumario. Generalidades de la programación en Mathematica. Representación gráfica de datos discretos.

A continuación vamos a explicar algunas sentencias que se utilizan para hacer programas con Mathematica. Las principales herramientas que vamos a necesitar para hacer los programas son las siguientes:

- ¿Cómo establecer comunicación entre el ordenador y quien ejecuta el programa?
- ¿Cómo construir bucles con Mathematica?
- ¿Cómo definir funciones y variables?
- ¿Cómo interrumpir la ejecución de un programa cuando éste esté bloqueado?

Vamos a explicar como hacer cada una de estas cosas, para poder construir nuestro programa. En primer lugar, vamos a contestar a la primera pregunta: para interrumpir un programa o una evaluación de Mathematica basta con pulsar las teclas

Alt + coma.

Para las otras cuestiones, se necesita una explicación más amplia que a continuación desarrollamos.

6.1 Operaciones y definición de variables.

6.1.1 Definición de variables y funciones

Como sabemos, para definir una variable numérica basta con tomar una letra o conjunto de letras e igualarlas al valor deseado. Por ejemplo, si queremos asignar a la letra q el valor 6.5, escribiremos en la pantalla

$$q = 6.5$$

los que producirá la siguiente respuesta en la pantalla del ordenador

```
In[1] := q = 6.5
Out[1] = 6.5
```

Si lo que queremos es definir una función, hemos de hacerlo indicando la variable entre corchetes según el siguiente esquema:

$$\text{Nombre}[\text{var}__] = \text{función}.$$

Así, para definir la función $f(x) = e^x \cos x$ hemos de escribir

$$\begin{aligned}\text{In}[2] &:= f[x_] = \text{Exp}[x] * \text{Cos}[x] \\ \text{Out}[2] &= \text{Exp}[x] * \text{Cos}[x].\end{aligned}$$

Otro tipo de variables bastante interesantes son las vectoriales. Podemos definir una variable vectorial, por ejemplo de dimensión tres haciendo la siguiente operación

$$\begin{aligned}\text{In}[3] &:= a[1] = 5 \\ \text{Out}[3] &= 5\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{In}[4] &:= a[2] = 2 \\ \text{Out}[4] &= 2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{In}[5] &:= a[1] = 9 \\ \text{Out}[5] &= 9\end{aligned}$$

y habremos introducido el vector $(5, 2, 9)$. Si queremos saber el valor de la variable a hemos de escribir

$$\begin{aligned}\text{In}[6] &:= ?a \\ &\text{Global } 'a \\ &a[1] = 5 \\ &a[2] = 2 \\ &a[3] = 9\end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned}\text{In}[7] &:= \text{Table}[a[i], \{i, 3\}] \\ \text{Out}[7] &= \{5, 2, 9\}.\end{aligned}$$

Podemos dejar sin asignar valores al vector. Si hacemos

$$\text{In}[8] := \text{Clear}[a[2]]$$

y

$$\begin{aligned}\text{In}[7] &:= \text{Table}[a[i], \{i, 3\}] \\ \text{Out}[7] &= \{5, a[2], 9\}\end{aligned}$$

dejando el valor de $a[2]$ vacío.

Para borrar las variables o las funciones utilizaremos la sentencia `Clear[var o func]`. Escribiendo

$$\text{Clear}[q]$$

desposeemos a q del valor 6.5 asignado anteriormente.

6.1.2 Operaciones

Como sabemos las cuatro operaciones básicas que tenemos son

+	Suma
-	Resta
*	Multiplicación
/	División

junto con el símbolo $=$. Podemos combinar esta operaciones para obtener otros tipos de operaciones y estructuras lógicas muy usadas en programación. Como las más interesantes resumimos las siguientes:

Operaciones de Test

$==$	Igual
$!=$	Distinto
$<$	Menor que
$>$	Mayor que
\leq	Menor o igual que
\geq	Mayor o igual que

Operaciones Lógicas

! o Not	Negación
$\&\&$	Y
$\ $	O
True	Verdad
False	Falsedad

Por ejemplo, si escribimos $10 < 8$, aparecerá en pantalla

```
In[1] := 10 < 8
Out[1] = False
```

indicando la falsedad de la afirmación. Si escribimos $7 > 4$ y $2 \neq 3$ aparecerá

```
In[2] := 7 > 4 && 2 != 3
Out[2] = True
```

indicando que las dos sentencias son verdaderas. Si ponemos una verdadera y una falsa y escribimos

```
In[3] := 7 > 4 && 2 = 3
Out[3] = False
```

mientras que

```
In[4] := 7 > 4 || 2 = 3
Out[4] = True
```

Finalmente

```
In[5] := Not[7 < 4]
Out[5] = True
```

dado que lo contrario de $7 < 4$ es $7 > 4$, que es verdadero.

Otras combinaciones de símbolos que pueden resultar útiles son las siguientes:

$x++$	Aumenta el valor de x una unidad
$x--$	Disminuye el valor de x una unidad
$++x$	Preincrementa x una unidad
$--x$	Predisminuye x una unidad
$x+ = k$	Aumenta el valor de x k unidades
$x- = k$	Disminuye el valor de x k unidades
$x* = k$	Multiplica x por k
$x/ = k$	Divide x por k

Por ejemplo, si hacemos $x = 7$ y realizamos las siguientes operaciones, obtenemos

```
In[6] := x ++
Out[6] = 7
```

donde el valor de x ahora es 8, pero en pantalla se escribe su antiguo valor. Si hubiéramos escrito

```
In[6] := ++x
Out[6] = 8
```

ahora el valor de x sigue siendo 8 y el programa escribe el valor actual. De un modo parecido funciona con $--$. Si escribimos

```
In[6] := x+ = 2
Out[6] = 9
```

el valor de x será 9, igual que el que aparece en pantalla.

6.2 Construcción de programas con Mathematica.

Uno de los temas centrales en los programas que vamos a realizar es la construcción de bucles o procesos iterativos, los cuales han de ejecutarse un número de terminado de veces. Para la una correcta creación de bucles, explicamos a continuación una serie de sentencias útiles. Recuerdan en gran medida a expresiones de lenguajes de programación como el Pascal, Basic o C.

6.2.1 If

La sentencia "If" se emplea para establecer elementos condicionantes en un programa. Las diferentes sintaxis con las que puede manejarse son las siguientes.

If[condición, f].

Si la condición es verdadera el programa ejecutará f , y si es falsa no hará nada. Por ejemplo,

```
In[1] := If[2 > 1, 2 + 2]
Out[1] = 4
```

pero si escribimos

```
In[2] := If[2 > 1, 2 + 2]
```

no se obtendrá ninguna salida. Otro tipo de expresión es la siguiente

$$\text{If}[\text{condición}, f_1, f_2].$$

Ahora, si la condición es cierta el programa ejecutará f_1 y si es falsa ejecutará f_2 . Por ejemplo

```
In[3] := If[1 > 2, 2 + 1, 2 + 2]
Out[3] = 4.
```

6.2.2 Which

La sentencia "which" también se emplea para introducir elementos de toma de decisiones en un programa. La estructura de la sentencia es la siguiente

$$\text{Which}[\text{test}_1, f_1, \text{test}_2, f_2, \dots].$$

Es útil a la hora de definir funciones a trozos. Por ejemplo

```
In[1] := h[x_] = Which[x < 0, x^2, x > 5, x^3, True, 0],
```

definirá la función

$$h(x) = \begin{cases} x^2 & \text{si } x < 0 \\ x^3 & \text{si } x > 5 \\ 0 & \text{si } 0 \leq x \leq 5. \end{cases}$$

6.2.3 Switch

Esta sentencia también es útil para producir toma de decisiones en un programa. Es otra sentencia muy utilizada para definir funciones a trozos. Su estructura es la siguiente

$$\text{Switch}[\text{condición}, C_1, f_1, C_2, f_2, \dots],$$

y funciona de la siguiente manera. Evalúa la condición y la compara con C_1 . Si ambas coinciden ejecuta f_1 . A continuación, compara la condición con C_2 y si ambas coinciden ejecuta f_2 y así sucesivamente. Por ejemplo

```
In[1] := Switch[3, 0, a, 1, b, 3, c]
Out[1] = c.
```

6.2.4 Do

Esta sentencia es útil para la construcción de bucles o procesos repetitivos, como por ejemplo calcular la suma

$$\sum_{i=0}^{10} i^2. \quad (6.1)$$

Veamos como hacerla empleando esta sentencia. Para ello necesitamos en primer lugar saber como se comporta y cual es su sintaxis. Son las siguientes:

$$\text{Do}[\text{expresión}, \{i, i_{\max}\}], \quad (6.2)$$

$$\text{Do}[\text{expresión}, \{i, i_{\min}, i_{\max}, di\}], \quad (6.3)$$

$$\text{Do}[\text{expresión}, \{i\}]. \quad (6.4)$$

La sentencia (6.2) evalúa la expresión desde el valor $i = 1$ hasta el valor $i = i_{\max}$, aumentando su valor de uno en uno. En la segunda sentencia (6.3) evaluamos la expresión desde un valor mínimo que nosotros escogemos, $i = i_{\min}$, hasta un valor máximo $i = i_{\max}$, pero ahora aumentamos el valor de i en cada paso de di en di unidades. Por último, (6.4) ejecuta la expresión i veces. Así, para obtener el valor de la suma (6.1) hemos de escribir

```
In[1] := s = 0; Do[s = s + i^2, {i, 0, 10, 1}]; s  
Out[1] = 385.
```

Hemos de remarcar que la sentencia *Do* no escribe nada en pantalla, sólo ejecuta la operación que se le indica. Es por ello que al final escribimos *s* en In[1]. Para obtener la suma de los cubos de los números pares entre el uno y el 100 debemos escribir

```
In[2] := s = 0; Do[s = s + i^3, {i, 2, 100, 2}]; s  
Out[2] = 13005000.
```

6.2.5 While

Otra manera de construir bucles es empleando la sentencia *While*. A diferencia de la anterior, esta sentencia incorpora la posibilidad de toma de decisiones. La sintaxis es la siguiente:

$$\text{While}[\text{test}, \text{expresión}],$$

que produce la ejecución de la expresión mientras es test de un resultado positivo. Por ejemplo, para obtener la suma de (6.1) podríamos escribir

```
In[1] := s = 0; i = 0; While[(i = i + 1) <= 10, s = s + i^2]; s  
Out[1] = 385.
```

Nótese que, al igual que pasaba con *Do*, la sentencia *While* no escribe nada en la pantalla, por lo que hemos de indicarle al final que lo escriba. Es importante también darse cuenta de como escribir la condición y el papel que juegan los paréntesis en la misma.

6.2.6 For

Otro modo de construir un bucle combinado con toma de decisiones es la sentencia *For*, cuya sintaxis es la siguiente:

For[inicio, test, incremento, expresión],

que partiendo de un valor inicial, evalúa la expresión a la vez que incrementa el valor inicial hasta que el test falla. Nuevamente no escribe nada en pantalla, por lo que para obtener la suma (6.1) hemos de escribir

```
In[1] := s = 0; For[i = 0, i <= 10, i++, s = s + i^2]; s  
Out[1] = 385.
```

6.2.7 Break

Frecuentemente al trabajar con bucles puede llegarse a una situación que provoca la repetición indefinida del mismo. Por ejemplo, si escribimos

```
For[i = 1, i < 0, i++, s = s + i^2]
```

sumaríamos indefinidamente ya que i nunca va a ser menor que cero. Esto provocaría una situación en la cual el ordenador se "cuelga". La sentencia *Break* puede ser empleada para impedir este proceso, teniendo la sintaxis

Break[].

Así, si escribimos

```
For[i = 1, i < 0, i++, If[s > 400, Break[]]; s = s + i^2],
```

que producirá una salida del bucle al superar s el valor 400. Escribiéndolo en pantalla tendríamos

```
In[1] := s = 0; For[i = 1, i < 0, i++, If[s > 400, Break[]]; s = s + i^2]; s  
Out[1] = 0.
```

6.2.8 Goto, Label

Estas dos sentencias se emplean para conectar dos sitios determinados de un programa. La sintaxis de ambas es

Label[etiqueta],

Goto[etiqueta].

Por ejemplo, si escribimos

```
In[1] := s = 0; i = 0; Label[hola]; s = s + i^2;  
i++; If[i <= 10, Goto[hola]]; s  
Out[1] = 385
```

que nos vuelve a calcular la suma (6.1). Estas sentencias han de emplearse en último lugar, para intentar escribir bucles que no seamos capaces de construir usando las sentencias anteriores.

6.2.9 Print

Esta sentencia se utiliza exclusivamente para escribir en la pantalla. Como hemos visto, hay sentencias que no escriben nada en la pantalla. Con *Print* podemos conocer el valor de las evaluaciones producidas. Así, por ejemplo, podemos ir viendo paso a paso cómo se calcula el valor de la suma

$$\sum_{i=0}^4 i^2$$

escribiendo

```
In[1] := s = 0; i = 0; While[(i == i + 1) <= 4, s = s + i^2; Print[s]]  
1  
5  
14  
30.
```

Puede suceder que al escribir frases con la sentencia *Print* el programa cambie las palabras de orden. Para evitar esto basta con escribir la frase entre comillas, utilizando la expresión

Print["Frase"].

6.2.10 Input

La sentencia *Input* se emplea para introducir datos al programa desde el exterior del mismo cuando éste está en ejecución. Se utiliza para establecer un diálogo entre el programa y el usuario. La sintaxis es la siguiente:

Input[] (6.5)

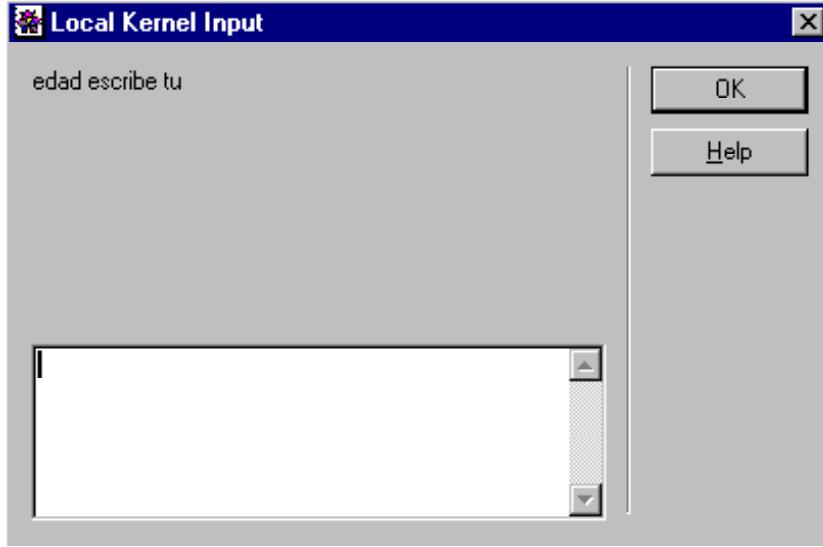
o

Input[Anotación]. (6.6)

Cuando se escribe (6.5) aparecerá un cuadro de diálogo que habrá que llenar y que suelen ser datos útiles del programa. Cuando se escribe (6.6) aparecerá el mismo cuadro, pero con la anotación que hayamos decidido poner. Por ejemplo, se escribimos

Input[escribe tu edad]

aparecerá un cuadro de la siguiente forma



que habrá que cumplimentar y aceptar para que desaparezca. Una vez introducido el valor, por ejemplo 22, y aceptado, aparecerá en pantalla lo siguiente:

```
In[1] := Input[escribe tu edad]
Out[1] = 22.
```

6.3 Un programa

Vamos a diseñar un programa que aproxime numéricamente mediante el método de Euler la solución del problema de condiciones iniciales

$$\begin{cases} y' = ty, \\ y(t_0) = y_0, \end{cases}$$

donde las condiciones iniciales t_0 e y_0 , el instante final t_f en el queremos conocer el valor de la solución, y el número de pasos con el que este valor se approximada han de introducirse tras la ejecución del programa.

```
f[t_, y_] := t * y;
t0 = Input["Tiempo inicial"];
y0 = Input["Valor de inicial de la función"];
tf = Input["Tiempo final"];
n = Input["Número de pasos"];
h = (tf - t0)/n;
For[i = 1, i < n + 1, i++, y1 = y0 + h * f[t0, y0];
t1 = t0 + h; y0 = y1; t0 = t1];
Print["El valor aproximado es " y0];
```

6.4 Presentaciones gráficas

A menudo, aparte de los datos numéricos en sí, es interesante tener una representación gráfica de los mismos. En el caso de la aproximación numérica de soluciones de ecuaciones diferenciales, éstos son dados en forma de sucesión de números reales y_n , con n variando de 1 a un valor N , de manera que y_N es la aproximación a la solución para el tiempo t_f que hemos elegido. En el caso de sistemas de ecuaciones diferenciales, tendremos una sucesión de vectores de los cuales, cada coordenada se corresponde con la aproximación de la función solución en el instante de tiempo dado. En cualquiera de los dos casos, es conveniente tener una manera de presentar los datos obtenidos mediante la integración numérica de una manera gráfica.

En general, el comando ListPlot permite hacer tales presentaciones mediante la estructura, pero previamente, tenemos que tener una manera de introducir en Mathematica las sucesiones con las que deseamos trabajar.

Dada una sucesión de números reales y_n , ésta se puede introducir en Mathematica de dos maneras. La primera es hacerlo como una lista en una variable, que se haría con la sintaxis

```
In[1] := Y = {y1, y2, ..., yn}  
Out[1] = {y1, y2, ..., yn}
```

No obstante, si tenemos muchos datos, digamos 1000, no es operativo introducirlos de esta manera. Para ello tenemos la sentencia Append, que tiene la sintaxis

```
Append[Y, yn+1]
```

que agrega el dato y_{n+1} al final de la lista Y . Veamos cómo:

```
In[1] := Y = {2, 5, 6}  
Out[1] = {2, 5, 6}  
In[2] := Append[Y, 8]  
Out[2] = {2, 5, 6, 8}
```

Supongamos ahora que deseamos introducir los mil primeros términos de la sucesión dada por la recurrencia $y_{n+1} = y_n + 2$, donde $y_1 = 1$, es decir, $y_n = (1, 3, 5, 7, \dots)$. Escribimos el siguiente programa

```
Y = {1}; x0 = 1; For[i = 1, i < 1000, i++, x1 = x0 + 2;  
Z = Append[Y, x1]; x0 = x1; Y = Z]
```

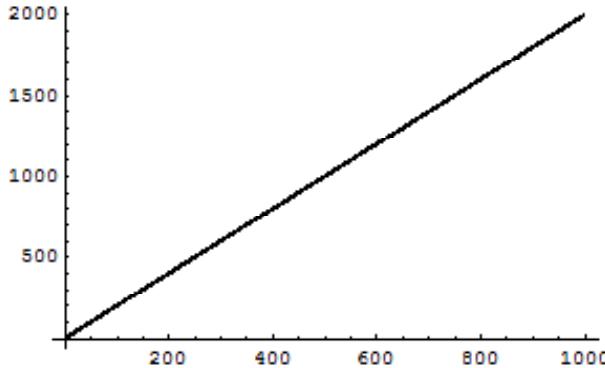
Una vez ejecutamos el programa, almacenaremos en Y el valor de la sucesión.

Una manera alternativa de introducir dicha sucesión es mediante los arrays, que en dimensión uno se escriben como

```
Array[Y, n].
```

Esta sentencia genera automáticamente un vector que tiene por coordenadas $Y[1], Y[2], \dots, Y[n]$, que en principio estará vacío de contenido. Para introducir la sucesión anterior escribiríamos el programa

```
Array[Y, 1000]; x0 = 1; For[i = 1, i < 1001,  
i++, Y[i] = x0; x1 = x0 + 2; x0 = x1]
```



Figura~6.1: Representación gráfica proporcionada por la salida del comando ListPlot.

Si deseamos que en el array anterior el índice empiece a contar de cero, debemos usar la forma

`Array[Y, n, 0].`

Diferentes alternativas para estas sentencias pueden consultarse en la ayuda del programa. Pasemos a ver cómo representar gráficamente la información con el comando ListPlot, que tiene cualquiera de las siguientes estructuras

`ListPlot[Y]`

ó

`ListPlot[Array[Y, 1000]]`

según hallamos introducido la sucesión de una u otra manera. Así, tanto el programa

```
Y = {1}; x0 = 1; For[i = 1, i < 1000, i ++, x1 = x0 + 2;
Z = Append[Y, x1]; x0 = x1; Y = Z]; ListPlot[Y]
```

como su alternativa

```
Array[Y, 1000]; x0 = 1; For[i = 1, i < 1001, i ++, Y[i] = x0;
x1 = x0 + 2; x0 = x1]; ListPlot[Array[Y, 1000]]
```

nos devuelven la gráfica dada en la figura 6.1.

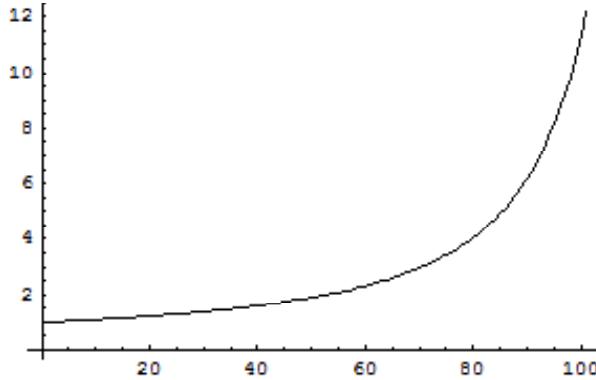
El comando ListPlot tiene la opción de unir dos puntos consecutivos con una recta. Tendría la sintaxis

`ListPlot[Y, PlotJoined -> True]`

ó

`ListPlot[Array[Y, n], PlotJoined -> True]`

Veamos como obtener una información gráfica de de aproximación que obtuvimos del problema de condiciones iniciales generado a partir de la ecuación $y' = ty$. Para ello, basta modificar el programa



Figura~6.2: Aproximación de la solución del problema de condiciones inciales.

anterior según se indica

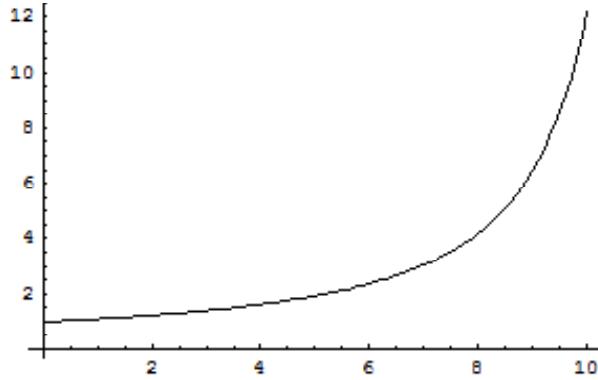
```
f[t_, y_] := t * y;  
t0 = Input["Tiempo inicial"];  
y0 = Input["Valor de inicial de la función"];  
tf = Input["Tiempo final"];  
n = Input["Número de pasos"]; Array[s, n + 1, 0]  
h = (tf - t0)/n; s[0] = y0;  
For[i = 1, i < n + 1, i++, s[i] = y0 + h * f[t0, s[i - 1]]; t1 = t0 + h; t0 = t1];  
ListPlot[Array[s, n, 0], PlotJoined -> True];
```

obtenemos la figura 6.2 como aproximación de la solución con condición inicial $y(0) = 1$, donde el tiempo final es 10 y el número de pasos 100.

Como puede apreciarse en la gráfica 6.2, en el eje x aparecen datos hasta 100, que se corresponden con el número de pasos. Si hubiésemos elegido 1000 pasos, aparecería obviamente 1000 al ser éstos en número de elementos en la sucesión generada. Podemos hacer una representación gráfica donde el eje x recorra el intervalo de definición de la función solución de la siguiente manera

```
f[t_, y_] := t * y;  
t0 = Input["Tiempo inicial"];  
y0 = Input["Valor de inicial de la función"];  
tf = Input["Tiempo final"];  
n = Input["Número de pasos"]; Array[s, n + 1, 0]  
h = (tf - t0)/n; s[0] = y0; r = {{t0, s[0]}}  
For[i = 1, i < n + 1, i++, s[i] = y0 + h * f[t0, s[i - 1]]; t1 = t0 + h; t0 = t1  
; r1 = Append[r, {t0, s[i]}]; r = r1];  
ListPlot[r, PlotJoined -> True];
```

es decir, definiendo una sucesión r de vectores del plano, y representando ésta como muestra la figura 6.3



Figura~6.3: Representación de la solución en el dominio de definición.

A veces, es necesario tener que representar a la vez dos sucesiones. Por ejemplo, las soluciones aproximadas y exacta de una ecuación diferencial para conocer o estimar la bondad de la aproximación. Por ejemplo, la solución del problema

$$\begin{cases} y' = ty, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

es

$$y(t) = e^{t^2/2}.$$

Supongamos que queremos ver una representación gráfica conjunta de dicha función y su aproximación en el intervalo $[0, 1]$ mediante 100 pasos. Para ello, generamos los valores de la solución exacta en los 100 puntos donde obtenemos la aproximación numérica con el programa

```
g[t_]:=Exp[t^2/2];t0=0.;tf=1;n=100;h=(tf-t0)/n;
graf={\{t0,g[t0]\}};For[i=1,i<101,i++,t1=t0+h;t0=t1;
graf1=Append[graf,\{t0,g[t0]\}],graf=graf1]
```

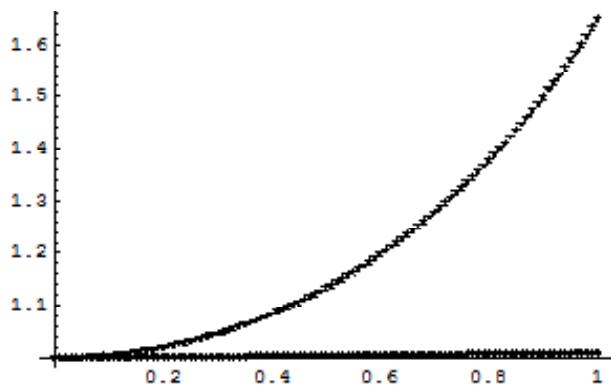
Igualmente, ejecutamos el programa anterior para obtener la solución aproximada almacenada en la variable r . Sin embargo, para representar ambas funciones a la vez hemos de activar un paquete especial de Mathematica tecleando

```
<< Graphics`MultipleListPlot`
```

A continuación utilizamos la sentencia `MultipleListPlot`, que permite representar varias sucesiones con la siguiente sintaxis

```
MultipleListPlot[\{r,graf\},PlotJoined->True]
```

que da lugar a la gráfica 6.4. Otras opciones para esta sentencia pueden verse en el manual del programa.



Figura~6.4: Representación conjunta de las soluciones aproximada y exacta del problema de condiciones iniciales.

Apéndice A

Ecuaciones en diferencias

Sumario. Ecuaciones en diferencias. Solución de una ecuación en diferencias. Ecuaciones lineales: teoría general. Transformada Z. Estabilidad de ecuaciones en diferencias lineales. Estabilidad local de ecuaciones en diferencias no lineales.

A.1 Introducción

Una *ecuación en diferencias* es una expresión de la forma

$$F(n, y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+k}) = 0,$$

donde $F : \Omega \subseteq \mathbb{R}^{k+2} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función definida sobre un subconjunto Ω de \mathbb{R}^{k+1} . El número k recibe el nombre de *orden* de la ecuación. Por ejemplo, las ecuaciones

$$\begin{aligned} y_{n+2} - y_n &= 0, \\ ny_{n+3} - e^{y_{n+3}y_n} &= y_{n+1}, \end{aligned}$$

son de órdenes 2 y 3, respectivamente. Aparte del orden, existe una gran diferencia entre las ecuaciones anteriores. En la primera se puede despejar el término y_{n+2} , quedando la ecuación

$$y_{n+2} = y_n,$$

mientras que en la segunda ecuación tal operación no puede realizarse, es decir, no se va a poder despejar explícitamente el término y_{n+3} . Nosotros vamos a centrarnos en el primer tipo de ecuaciones, que llamaremos *resueltas* respecto de el mayor término de la sucesión y_n . A partir de este momento, consideraremos ecuaciones en diferencias de la forma

$$y_{n+k} = f(n, y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+k-1}), \tag{A.1}$$

siendo $f : \Lambda \subseteq \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ una función.

Por una *solución* de la ecuación (A.1) entenderemos una solución x_n de números reales de manera que verifique

$$x_{n+k} = f(n, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+k-1}).$$

Así, por ejemplo la sucesión constante $x_n = 1$ es solución de la ecuación $y_{n+2} = y_n$. También lo es la sucesión $x_n = (-1)^n$. Como vemos, una ecuación puede tener distintas soluciones, pero ésta es única si imponemos una serie de k condiciones iniciales. Así, $x_n = (-1)^n$ es la única solución de la ecuación

$$\begin{cases} y_{n+2} = y_n, \\ y_1 = -1, \quad y_2 = 1. \end{cases}$$

Llamaremos a estos problemas de *condiciones iniciales*, por su analogía con las ecuaciones diferenciales ordinarias.

Dentro de las ecuaciones en diferencias, tienen un especial interés las llamadas *ecuaciones lineales*, que son de la forma

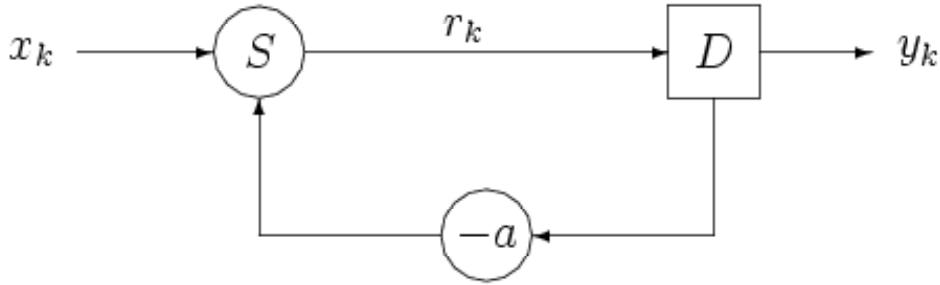
$$y_{n+k} + a_n^1 y_{n+k-1} + \dots + a_n^k y_n = b_n,$$

donde a_n^1, \dots, a_n^k, b_n son sucesiones de números reales. En el caso de que las sucesiones a_n^1, \dots, a_n^k sean constantes, esto es, $a_n^i = a_i$ para todo $n \geq 0$ y para todo $i \in \{1, \dots, k\}$, la ecuación lineal se dirá de coeficientes constantes. En general, también distinguiremos entre ecuaciones homogéneas si $b_n = 0$ para todo $n \geq 0$, y no homogéneas en caso contrario. Las ecuaciones

$$\begin{aligned} y_{n+3} + ny_{n+1} - y_n &= 1, \\ y_{n+2} - y_{n+1} - y_n &= 0, \end{aligned}$$

son ecuaciones en diferencia lineales, siendo la primera no homogénea y la segunda homogénea y con coeficientes constantes.

Las ecuaciones lineales juegan un importante papel en la modelización de circuitos digitales. Veámoslo con el siguiente ejemplo que proviene de la electrónica (ver [Oga2]). Para fijar ideas, consideremos el siguiente ejemplo.

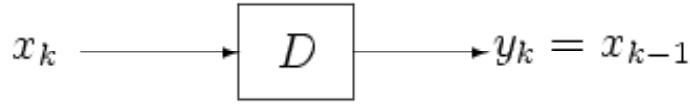


Este dispositivo genera una sucesión de salida y_k para una sucesión de entrada x_k de la siguiente manera. El elemento marcado con una a dentro de un círculo amplifica el dato de entrada la magnitud $a \in \mathbb{R}$. Por ejemplo

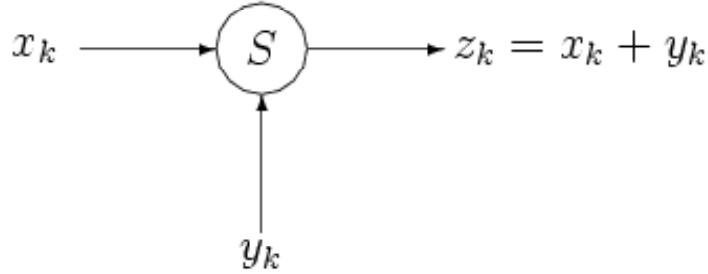


El segundo elemento, una D dentro de un rectángulo, retarda la señal o sucesión de entrada una

unidad temporal. Así



Finalmente, el elemento marcado con un símbolo S dentro de un círculo, suma los datos que le llegan:



Combinando varios de estos elementos, construimos los llamados circuitos digitales, como el de la figura anterior. Ésta representa uno de los tipos más sencillos de retroalimentación de una señal. Los datos de entrada vienen dados por la sucesión x_k y los de salida por

$$y_{k+1} = r_k. \quad (\text{A.2})$$

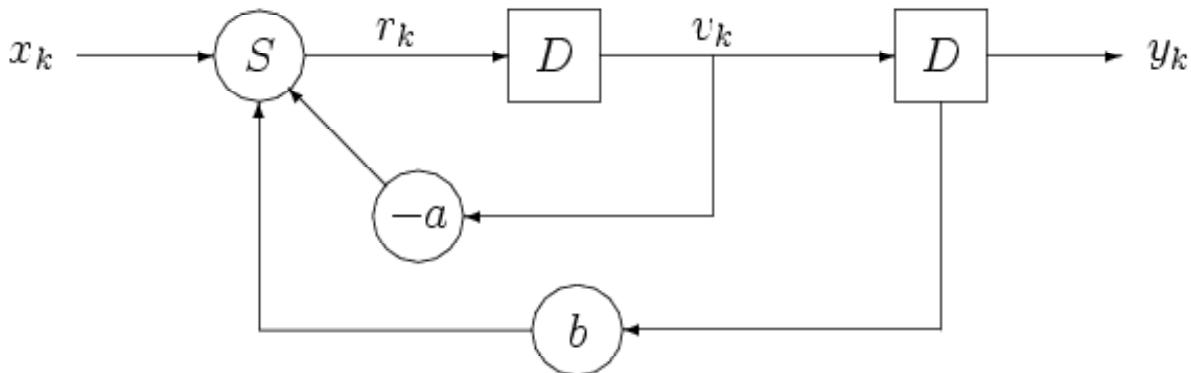
En el proceso, los datos intermedios r_k vienen dados por la expresión

$$r_k = x_k - ay_k, \quad (\text{A.3})$$

donde a es un número real. Combinando (A.2) y (A.3) obtenemos la ecuación en diferencias de orden uno

$$y_{k+1} + ay_k = x_k.$$

Si complicamos el dispositivo, como se muestra en la figura,



se obtiene una ecuación de orden dos. Aquí

$$y_{k+1} = v_k,$$

$$v_{k+1} = r_k,$$

$$r_k = x_k + by_k - av_k,$$

de donde se obtiene la ecuación

$$y_{k+2} + ay_{k+1} - by_k = x_k.$$

Por ejemplo supongamos la ecuación

$$\begin{cases} y_{k+2} + y_{k+1} - 2y_k = 0; \\ y_0 = 0, \quad y_1 = 1. \end{cases}$$

Veremos a continuación cómo abordar el estudio de estas ecuaciones.

A.2 Transformada Z

A.2.1 Definición y propiedades básicas

Consideremos una sucesión de números complejos x_k . Se define la *transformada Z* de la misma como la serie

$$\mathcal{Z}[x_k](z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_n}{z^n}. \quad (\text{A.4})$$

Nótese que (A.4) es una serie de Laurent con parte regular x_0 y parte singular $\sum_{n=1}^{\infty} x_n z^{-n}$, y que por tanto convergerá en un disco de convergencia de la forma

$$A(0, r, +\infty) = \{z \in \mathbb{C} : |z| > r\}$$

donde r es el radio de convergencia de la serie de potencias $\sum_{n=1}^{\infty} x_n z^n$.

Por ejemplo, si $\delta = (1, 0, 0, 0, \dots)$ entonces su transformada Z es

$$\mathcal{Z}[\delta](z) = 1$$

definida en todo el plano complejo. Si $x_k = (1, 1, 1, \dots)$, entonces

$$\mathcal{Z}[1](z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^n} = \frac{1}{1 - \frac{1}{z}} = \frac{z}{z - 1},$$

siempre que $|z| > 1$.

Propiedades básicas.

- Linealidad. Dadas las sucesiones x_k e y_k y $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, se verifica

$$\mathcal{Z}[\alpha x_k + \beta y_k](z) = \alpha \mathcal{Z}[x_k](z) + \beta \mathcal{Z}[y_k](z)$$

para todo z en el dominio de definición de $\mathcal{Z}[x_k](z)$ y $\mathcal{Z}[y_k](z)$.

Demostración. Basta calcular

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}[\alpha x_k + \beta y_k](z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha x_n + \beta y_n}{z^n} \\ &= \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_n}{z^n} + \beta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y_n}{z^n} = \alpha \mathcal{Z}[x_k](z) + \beta \mathcal{Z}[y_k](z).\end{aligned}$$

■

- Dada la sucesión x_k , definimos la nueva sucesión $y_k = x_{k+1}$. Entonces

$$\mathcal{Z}[y_k](z) = \mathcal{Z}[x_{k+1}](z) = z\mathcal{Z}[x_k](z) - zx_0.$$

En general, si $k_0 \in \mathbb{N}$ y definimos $y_k = x_{k+k_0}$, tenemos la fórmula

$$\mathcal{Z}[x_{k+k_0}](z) = z^{k_0} \mathcal{Z}[x_k](z) - \sum_{n=0}^{k_0-1} x_n z^{k_0-n}.$$

Demostración. Calculamos

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}[x_{k+1}](z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_{n+1}}{z^n} \\ &= z \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_{n+1}}{z^{n+1}} = z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_n}{z^n} \\ &= z \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_n}{z^n} - zx_0 = z\mathcal{Z}[x_k](z) - zx_0.\end{aligned}$$

■

- Dada la sucesión x_k y $a \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, se verifica

$$\mathcal{Z}[a^k x_k](z) = \mathcal{Z}[x_k](z/a).$$

Dmostración. Calculamos

$$\mathcal{Z}[a^k x_k](z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n x_n}{z^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_n}{(z/a)^n} = \mathcal{Z}[x_k](z/a).$$

■

Por ejemplo, si $x_k = (1, 2, 2^2, 2^3, \dots)$, se tiene que

$$\mathcal{Z}[2^k](z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{z^n} = \frac{1}{1 - \frac{2}{z}} = \frac{z}{z - 2}.$$

- Dadas las sucesiones x_k y k^m , $m \in \mathbb{N}$, se verifica

$$\mathcal{Z}[k^m x_k](z) = [-z \frac{d}{dz}]^m \mathcal{Z}[x_k](z),$$

donde por $-z \frac{d}{dz}$ se entiende la operación derivada y luego multiplicación por $-z$.

Demostración. Hacemos la demostración por inducción en m . Si $m = 1$, entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[kx_k](z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{nx_n}{z^n} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nx_n}{z^n} \\ &= z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nx_n}{z^{n+1}} = z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dz} \frac{-x_n}{z^n} \\ &= z \frac{d}{dz} \left(- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_n}{z^n} \right) = -z \frac{d}{dz} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_n}{z^n} - x_0 \right) = -z \frac{d}{dz} \mathcal{Z}[x_k](z). \end{aligned}$$

Si suponemos el resultado cierto para m , veamos que también lo es para $m + 1$. Para esto calculamos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[k^{m+1} x_k](z) &= \mathcal{Z}[k \cdot k^m x_k](z) = -z \frac{d}{dz} \mathcal{Z}[k^m x_k](z) \\ &= (-z \frac{d}{dz}) [-z \frac{d}{dz}]^m \mathcal{Z}[x_k](z) = [-z \frac{d}{dz}]^{m+1} \mathcal{Z}[x_k](z). \end{aligned}$$

■

Por ejemplo, si $x_k = k^2$, entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[k^2](z) &= [-z \frac{d}{dz}]^2 \mathcal{Z}[1](z) = [-z \frac{d}{dz}]^2 \frac{z}{z-1} \\ &= -z \frac{d}{dz} \left(-z \frac{d}{dz} \frac{z}{z-1} \right) = -z \frac{d}{dz} \left(\frac{-z}{z-1} + \frac{z^2}{(z-1)^2} \right) \\ &= \frac{z}{z-1} - \frac{3z^2}{(z-1)^2} + \frac{2z^3}{(z-1)^3}, \end{aligned}$$

si $|z| > 1$.

A.2.2 Transformada Z inversa

Es interesante obtener transformadas Z inversas de funciones de variable compleja $F(z)$, es decir, qué sucesiones verifican que

$$\mathcal{Z}[x_n](z) = F(z),$$

o equivalentemente

$$x_n = \mathcal{Z}^{-1}[F(z)].$$

Para calcular la transformada Z de una función $F(z)$ basta calcular el desarrollo en serie de Laurent centrada en cero de manera que tenga un anillo de convergencia de la forma $\{z \in \mathbb{C} : |z| > r\}$, donde $r \geq 0$. Por ejemplo, si $F(z) = \frac{1}{z-1}$, entonces desarrollando en serie de Laurent

$$\frac{1}{z-1} = \frac{1}{z} \frac{1}{1-\frac{1}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^{n+1}}$$

si $|z| > 1$. Entonces la sucesión

$$x_k = \mathcal{Z}^{-1}[1/(z-1)] = (0, 1, 1, 1, \dots).$$

A.2.3 Aplicación a la resolución de la ecuación en diferencias lineales con coeficientes constantes

Consideramos el problema

$$\begin{cases} y_{k+2} + y_{k+1} - 2y_k = 1; \\ y_0 = 0, \quad y_1 = 1, \end{cases}$$

obtenido anteriormente. Tomando la transformada Z en la ecuación, usando las propiedades de ésta y tomando en consideración las condiciones iniciales obtenemos

$$\mathcal{Z}[y_{k+2} + y_{k+1} - 2y_k](z) = \mathcal{Z}[1](z),$$

y desarrollando

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}[y_{k+2} + y_{k+1} - 2y_k](z) &= \mathcal{Z}[y_{k+2}](z) + \mathcal{Z}[y_{k+1}](z) - 2\mathcal{Z}[y_k](z) \\ &= z^2\mathcal{Z}[y_k](z) - z + z\mathcal{Z}[y_k](z) - 2\mathcal{Z}[y_k](z) \\ &= (z^2 + z - 2)\mathcal{Z}[y_k](z) - z. \end{aligned}$$

Por otra parte

$$\mathcal{Z}[1](z) = \frac{z}{z-1}.$$

Entonces

$$(z^2 + z - 2)\mathcal{Z}[y_k](z) = z + \frac{z}{z-1} = \frac{z^2}{z-1},$$

con lo que

$$\mathcal{Z}[y_k](z) = \frac{z^2}{(z^2 + z - 2)(z-1)}.$$

Pasamos a fracciones simples

$$\mathcal{Z}[y_k](z) = \frac{z^2}{(z-1)^2(z+2)} = \frac{-1}{(z-1)^2} - \frac{3}{z-1} + \frac{4}{z+2},$$

y calculamos la transformada inversa obteniendo los desarrollos en series de Laurent

$$\frac{1}{z+2} = \frac{1}{z} \frac{1}{1 - \frac{-2}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-2}{z}\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2)^n}{z^{n+1}}$$

si $|z| > 2$.

$$\frac{1}{z-1} = \frac{1}{z} \frac{1}{1 - \frac{1}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^{n+1}}$$

si $|z| > 1$. Finalmente

$$\frac{-1}{(z-1)^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{z-1} \right) = \frac{d}{dz} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^{n+1}} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dz} \frac{1}{z^{n+1}} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{z^{n+2}}$$

si $|z| > 1$. Entonces si $|z| > 2$ se tiene que

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}[y_k](z) &= \frac{-1}{(z-1)^2} - \frac{3}{z-1} + \frac{4}{z+2} \\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{z^{n+2}} - 3 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^{n+1}} + 4 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2)^n}{z^{n+1}} \\ &= \frac{1}{z} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{z^{n+2}} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3}{z^{n+2}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4(-2)^{n+1}}{z^{n+2}} \\ &= \frac{1}{z} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-n-4+4(-2)^{n+1}}{z^{n+2}},\end{aligned}$$

por lo que si $k \geq 2$

$$y_k = 4(-2)^{k+1} - 4 + k.$$

Veamos a continuación el siguiente ejemplo, en que las raíces son complejas:

$$\begin{cases} x_{n+2} - 2x_{n+1} + 2x_n = 1, \\ x_0 = x_1 = 0. \end{cases}$$

Si aplicamos la transformada Z a la ecuación, tenemos que

$$\mathcal{Z}[x_{n+2} - 2x_{n+1} + 2x_n](z) = \mathcal{Z}[1](z).$$

Por un lado

$$\mathcal{Z}[1](z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^n} = \frac{1}{1 - \frac{1}{z}} = \frac{z}{z-1},$$

mientras que

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}[x_{n+2} - 2x_{n+1} + 2x_n](z) &= \mathcal{Z}[x_{n+2}](z) - 2\mathcal{Z}[x_{n+1}](z) + 2\mathcal{Z}[x_n](z) \\ &= z^2 \mathcal{Z}[x_n](z) - z^2 x_0 - zx_1 - 2z \mathcal{Z}[x_n](z) - 2zx_0 + 2\mathcal{Z}[x_n](z) \\ &= (z^2 - 2z + 2)\mathcal{Z}[x_n](z),\end{aligned}$$

de donde

$$\mathcal{Z}[x_n](z) = \frac{z}{(z-1)(z^2 - 2z + 2)}.$$

Desarrollamos la función en serie de Laurent para calcular x_n . Para ello en primer lugar

$$\begin{aligned}\frac{z}{(z-1)(z^2 - 2z + 2)} &= \frac{z}{(z-1)(z-1-i)(z-1+i)} \\ &= \frac{1}{z-1} - \frac{1}{2} \frac{1+i}{z-1-i} - \frac{1}{2} \frac{1-i}{z-1+i}.\end{aligned}$$

Calculamos de forma separada

$$\frac{1}{z-1} = \frac{1}{z} \frac{1}{1-\frac{1}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^n} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{z^n},$$

$$\frac{1}{z-1-i} = \frac{1}{z} \frac{1}{1-\frac{1+i}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1+i}{z} \right)^n = \sum_{n=1}^{\infty} (1+i)^{n-1} \frac{1}{z^n},$$

$$\frac{1}{z-1+i} = \frac{1}{z} \frac{1}{1-\frac{1-i}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1-i}{z} \right)^n = \sum_{n=1}^{\infty} (1-i)^{n-1} \frac{1}{z^n},$$

con lo que agrupando

$$\begin{aligned} \frac{z}{(z-1)(z^2-2z+2)} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{z^n} - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (1+i)^n \frac{1}{z^n} - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (1-i)^n \frac{1}{z^n} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2}(1+i)^n - \frac{1}{2}(1-i)^n \right) \frac{1}{z^n}, \end{aligned}$$

y teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} (1+i)^n &= 2^{n/2} \left(\cos \frac{n\pi}{4} + i \sin \frac{n\pi}{4} \right), \\ (1-i)^n &= 2^{n/2} \left(\cos \frac{n\pi}{4} - i \sin \frac{n\pi}{4} \right), \end{aligned}$$

obtenemos

$$\frac{z}{(z-1)(z^2-2z+2)} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(1 - 2^{n/2} \cos \frac{n\pi}{4} \right) \frac{1}{z^n},$$

y por tanto

$$x_n = 1 - 2^{n/2} \cos \frac{n\pi}{4}.$$

A.2.4 Fórmula de inversión compleja

Supongamos que

$$\mathcal{Z}[x_k](z) = \sum_{k=0}^{\infty} x_k z^{-k},$$

y multipliquemos ambos miembros de la igualdad por z^{n-1} , de donde

$$\mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1} = \sum_{k=0}^{\infty} x_k z^{n-k-1}.$$

Supongamos una circunferencia del plano complejo γ que contiene todas las singularidades de la función $\mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1}$, para todo $n \geq 1$. Por la fórmula integral de Cauchy

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1} dz &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \sum_{k=0}^{\infty} x_k z^{n-k-1} dz \\ (*) &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{k=0}^{\infty} \int_{\gamma} x_k z^{n-k-1} dz = x_n, \end{aligned}$$

dado que

$$\int_{\gamma} x_k z^{n-k-1} dz = \begin{cases} 0 & \text{si } n - k \neq 2, \\ 2\pi i x_n & \text{si } n - k = 2. \end{cases}$$

Por el Teorema de los residuos

$$x_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1} dz = \sum_{i=1}^m \text{Res}(\mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1}, z_i)$$

donde si z_i es un polo de orden m , entonces el residuo es

$$\text{Res}(\mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1}, z_i) = \frac{1}{(m-1)!} \lim_{z \rightarrow z_i} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} ((z - z_i)^m \mathcal{Z}[x_k](z) z^{n-1}).$$

Vamos a modo de ejemplo a obtener la transformada inversa de

$$f(z) = \frac{z(z-1)}{(z-2)^2(z+3)}.$$

Sus polos son 2, de orden dos, y -3 que es de orden uno. Entonces

$$\begin{aligned} \text{Res}(f(z) z^{n-1}, 2) &= \frac{1}{1!} \lim_{z \rightarrow 2} \frac{d}{dz} \left((z-2)^2 \frac{z^n(z-1)}{(z-2)^2(z+3)} \right) \\ &= \lim_{z \rightarrow 2} \frac{d}{dz} \left(\frac{z^n(z-1)}{(z+3)} \right) \\ &= \lim_{z \rightarrow 2} \frac{(nz^{n-1}(z-1) + z^n)(z+3) - z^n(z-1)}{(z+3)^2} \\ &= \frac{(n2^{n-1} + 2^n)5 - 2^n}{25} = \frac{4}{25}2^n + \frac{1}{50}n2^n, \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \text{Res}(f(z) z^{n-1}, -3) &= \lim_{z \rightarrow -3} (z-3) \frac{z^n(z-1)}{(z-2)^2(z+3)} \\ &= \lim_{z \rightarrow -3} \frac{z^n(z-1)}{(z-2)^2} = -\frac{4}{25}(-3^n). \end{aligned}$$

De esta forma

$$x_n = \frac{4}{25}2^n + \frac{1}{50}n2^n - \frac{4}{25}(-3^n).$$

Sea ahora

$$f(z) = \frac{1}{z^2 + 1},$$

cuyos polos simples son $\pm i$. Entonces

$$\begin{aligned} \text{Res}(f(z) z^{n-1}, i) &= \lim_{z \rightarrow i} (z-i) \frac{z^{n-1}}{(z-i)(z+i)} \\ &= \lim_{z \rightarrow i} \frac{z^{n-1}}{(z+i)} = \frac{1}{2i} i^{n-1} = -\frac{1}{2} i^n, \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}\text{Res}(f(z)z^{n-1}, -i) &= \lim_{z \rightarrow -i} (z + i) \frac{z^{n-1}}{(z - i)(z + i)} \\ &= \lim_{z \rightarrow -i} \frac{z^{n-1}}{(z - i)} = -\frac{1}{2i}(-i)^{n-1} = \frac{1}{2}(-i)^n,\end{aligned}$$

por lo que

$$x_n = -\frac{1}{2}i^n + \frac{1}{2}(-i)^n.$$

Expresando los números complejos en forma trigonométrica y utilizando la fórmula de De Moivre, obtenemos

$$\begin{aligned}x_n &= -\frac{1}{2}i^n + \frac{1}{2}(-i)^n \\ &= -\frac{1}{2}(\cos \frac{\pi}{2} + i \sin \frac{\pi}{2})^n + \frac{1}{2}(\cos \frac{-\pi}{2} + i \sin \frac{-\pi}{2})^n \\ &= -\frac{1}{2}(\cos \frac{n\pi}{2} + i \sin \frac{n\pi}{2}) + \frac{1}{2}(\cos \frac{-\pi n}{2} + i \sin \frac{-\pi n}{2}),\end{aligned}$$

y dado que

$$\sin \frac{n\pi}{2} = -\sin \frac{\pi n}{2}$$

y

$$\cos \frac{n\pi}{2} = -\cos \frac{\pi n}{2}$$

obtenemos

$$x_n = -\cos \frac{n\pi}{2}.$$

A.2.5 Funciones de transferencia.

La función de transferencia asociada a la transformada Z se define de forma análoga a la función de transferencia asociada a la transformada de Laplace. Consideremos en este contexto una ecuación en diferencias finitas de la forma

$$a_n y_{k+n} + a_{n-1} y_{k+n-1} + \dots + a_1 y_{k+1} + a_0 y_k = x_k, \quad (\text{A.5})$$

siendo $a_i \in \mathbb{R}$, $0 \leq i \leq n$. Entonces, suponiendo que $y_i = 0$ para $i < k$, tomando la transformada Z obtenemos que

$$(a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \dots + a_1 z + a_0) \mathcal{Z}[y_k](z) = \mathcal{Z}[u_k](z),$$

por lo que

$$\mathcal{Z}[y_k](z) = \frac{1}{a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \dots + a_1 z + a_0} \mathcal{Z}[u_k](z).$$

Se define entonces la función de transferencia asociada a la ecuación como

$$T(z) = \frac{\mathcal{Z}[y_k](z)}{\mathcal{Z}[u_k](z)} = \frac{1}{a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \dots + a_1 z + a_0}.$$

Podemos estudiar entonces la estabilidad de la ecuación entendiendo ésta de forma análoga al caso continuo estudiada en el tema anterior, es decir, si para toda solución asociada a una condición inicial dada se verifica que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y_k = 0.$$

El siguiente resultado caracteriza la estabilidad del sistema en base a los polos de la función de transferencia.

Theorem 3 *El sistema dado por la ecuación (A.5) es estable si y sólo si todos los polos de la función de transferencia verifican que $|z| < 1$.*

A.3 Ecuaciones no lineales

Consideremos ahora una ecuación en diferencias de orden k no lineal

$$y_{n+k} = f(n, y_n, \dots, y_{n+k-1}),$$

donde $f : \Lambda \subseteq \mathbb{R}^{k+1} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función continua. Esta ecuación puede reducirse a un sistema de orden uno de la manera siguiente. Definimos las variables $z_n^1 = y_n, z_n^2 = y_{n+1}, \dots, z_n^k = y_{n+k-1}$. Entonces

$$\begin{cases} z_{n+1}^1 = z_n^2, \\ z_{n+1}^2 = z_n^3, \\ \dots \\ z_{n+1}^{k-1} = z_n^k, \\ z_{n+1}^k = f(n, z_{n+1}^1, \dots, z_{n+1}^k). \end{cases}$$

Esto es, si $\mathbf{z}_n = (z_n^1, \dots, z_n^k)$, entonces de forma compacta el sistema se puede escribir como

$$\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{f}(\mathbf{n}, \mathbf{z}_n)$$

donde

$$\mathbf{f}(\mathbf{n}, z_n^1, \dots, z_n^k) = (z_n^2, z_n^3, \dots, z_n^k, f(n, z_{n+1}^1, \dots, z_{n+1}^k)).$$

Si la ecuación o sistema de orden uno no depende explícitamente de n , se dice que dicha ecuación o sistema es autónomo. Por ejemplo,

$$y_{n+1} = 4y_n(1 - y_{n-1}),$$

es una ecuación autónoma y

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + y_n, \\ y_{n+1} &= x_n - y_n, \end{aligned}$$

es un sistema autónomo de orden uno.

Las ecuaciones y sistemas de orden uno han tenido un reciente desarrollo debido a que son modelos de ciencias experimentales como la ecología y la economía. Con frecuencia, presentan lo que se conoce como comportamiento caótico o complicado.

Bibliografía

- [AbBr] M.L. Abell y J.P. Braselton, *Differential Equations with Mathematica*, Ed. AP Professional.
- [BuFa] R. Burden y J. D. Faires, *Métodos numéricos*, Thomson.
- [Cas] E. Castillo y otros, *Mathematica*, Ed. Paraninfo.
- [Dor] J. R. Dormand, *Numerical methods for differential equations*, CRC Press.
- [Ela] S. N. Elaydi, *An introduction to difference equations*, Springer–Verlag.
- [Jim] V. Jiménez López, *Apuntes de ecuaciones diferenciales*, Servicio de publicaciones, Universidad de Murcia, 2000.
- [Lam] J. D. Lambert, *Numerical methods for ordinary differential equations*, Wiley.
- [MaMy] B. M. Mahan y R. J. Myers, *Química, curso universitario*, Addison–Wesley Iberoamericana, 1990.
- [McPo] M. P. McDowell y J. M. Powers, *Mathematical modeling of the Brusselator*, Preprint Universidad de Notre Dame (2008).
- [NaSa] R. K. Nagle y E. B. Saff, *Fundamentos de ecuaciones diferenciales* (2^a edición), Addison Wesley Longman, 1992.
- [Oga2] K. Ogata, *Discrete-time control systems*, Prentice Hall, 1995.
- [Sim] G. F. Simmons, *Ecuaciones diferenciales (con aplicaciones y notas históricas)*, 2^a Edición, McGraw–Hill, 1993.
- [VJAP] L. Vázquez, S. Jiménez, C. Aguirre y P. J. Pascual, *Métodos numéricos para la Física y la Ingeniería*, McGraw–Hill.
- [Wol] Stephen Wolfram, "The *Mathematica Book*", Wolfram Media, Cambridge University Press.