

## Métodos Numéricos y Ecuaciones Diferenciales

### 1. Las Ideas Generales

Dada una ecuación diferencial de segundo orden de la forma

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = F\left(\frac{dx(t)}{dt}, x(t), t\right)$$

siempre se puede convertir en un sistema de dos ecuaciones lineales de primer orden, al extender el espacio de variables de la forma

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dx(t)}{dt} \stackrel{\text{def}}{=} p(t) \\ x(t) \stackrel{\text{def}}{=} q(t) \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{d^2x(t)}{dt^2} = F\left(\frac{dx(t)}{dt}, x(t), t\right) \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{dq(t)}{dt} = p(t) \\ \frac{dp(t)}{dt} = F(p(t), q(t), t) \end{cases}$$

este sistema puede ser re-arreglado en forma vectorial

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(t) \\ F(p(t), q(t), t) \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{d\mathbf{Q}(t)}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}(t), t)$$

Así dado un conjunto de potenciales elásticos y las fuerzas que de ellos derivan,

$$V(x) = \begin{cases} kx & \leftarrow p = 1 \\ \frac{1}{2}kx^2 & \leftarrow p = 2 \\ \frac{1}{3}kx^3 & \leftarrow p = 3 \\ \vdots \\ \frac{1}{p}k \|x\|^p \end{cases} \Rightarrow F_k(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \Rightarrow F_k(x) = \begin{cases} -k \frac{x}{\|x\|} \\ -kx \\ -kx^2 \\ \vdots \\ -k \|x\|^{p-1} \frac{x}{\|x\|} \end{cases}$$

el sistema dinámico correspondiente a la ecuación de Newton será

$$\frac{d\mathbf{Q}(t)}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}(t), t) \Rightarrow \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(t) \\ \frac{1}{m} [F_{ext}(x(t), t)] - k \|x(t)\|^{p-1} \frac{x(t)}{\|x(t)\|} \end{pmatrix}$$

#### 1.0.1. Los Métodos y su Clasificación

Dada una ecuación diferencial de primer orden,  $\frac{dy(x)}{dx} = y'(x) = f(y(x), x)$ , con  $y_k$  el valor de la función obtenida con el método, con  $y_k = y(x_k)$ , donde  $x_k = x_0 + kh$  y  $h$  el paso. Diremos que un método es de **paso único** si la determinación de  $y_{k+1}$  sólo involucra un único valor de  $y_k$  y **múltiple**

**paso** si para calcularlo se utilizan varios valores  $y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-p}$ . Por otra parte se denomina un método **explícito** si para determinar  $y_{k+1}$  se utilizan valores anteriores  $y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-p}$  y **implícito** si se utilizan una función del mismo valor  $y_{k+1}$ . Así

$$y_{k+1} = y_{k-1} + 2h f(x_k, y_k)$$

representa un método **explícito de paso único** mientras que

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})]$$

será **implícito de múltiples pasos**.

### 1.0.2. El Rebusque de Taylor

Tal y como hemos dicho arriba, dada una ecuación diferencial, su solución a través de un método de paso único puede ser escrita como

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + \varphi(x_k, y_k, h) \quad \text{con} \quad h = x_{i+1} - x_i;$$

Lo primero que se puede hacer es expandir por Taylor alrededor del punto  $x = x_k$

$$y(x) = y(x_k) + (x - x_k) y'(x_k) + \frac{1}{2!} (x - x_k)^2 y''(x_k) + \dots + \frac{1}{n!} (x - x_k)^n y^{(n)}(x_k) + \dots$$

e identificamos

$$\begin{aligned} y(x_k) &\rightarrow y_k y'(x) = f(y(x), x) \\ y'(x_k) &\rightarrow f(y_k, x_k) \\ y''(x_k) &\rightarrow f'(y_k, x_k) = \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\substack{x=x_k \\ y=y_k}} + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\substack{x=x_k \\ y=y_k}} y'_k \\ y'''(x_k) &\rightarrow f''(y_k, x_k) = \partial_x f' + \partial_y f' y'_k = \partial_{xx} f + (\partial_{xy} f) y'_k + [\partial_{yx} f + (\partial_{yy} f) y'_k] y'_k + \partial_y f y''_k \\ &\vdots \end{aligned}$$

por lo que reconstruimos la serie de Taylor hasta el orden que podamos o requiramos

$$y_{n+1} = y_n + h f(y_k, x_k) + \frac{1}{2!} h^2 f'(y_k, x_k) + \frac{1}{3!} h^3 f''(y_k, x_k) + \dots + \frac{1}{n!} h^n f^{(n-1)}(y_k, x_k) + \dots$$

quedando acotado el error por

$$\varepsilon_{red} = \frac{1}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n)}(y(\xi), x(\xi))$$

## 2. La idea de la Integración y los Métodos

La idea de integrar una ecuación diferencial ordinaria puede ilustrarse, formalmente de la siguiente forma

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} d\xi f(\xi, y(\xi))$$

entonces el método se centra en como se aproxima la función dentro de la integral

<b>Euler</b>	Se aproxima la función con en el punto anterior
$f(x_k, y_k)$	$\Rightarrow y_{k+1} = y_k + h f(x_k, y_k)$
<b>Euler Mejorado o Heuns</b>	Se aproxima la función mediante un promedio en los extremos
$\frac{1}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})]$	$\Rightarrow y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})]$
	$\Rightarrow y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_k + h f(x_k, y_k))]$

con  $h = x_{i+1} - x_i$  el paso de integración. Nótese además que hemos utilizado Euler otra vez para expresar  $y_{k+1} = y_{k+1}(y_k, x_k)$

El Método de Euler constituye una expansión por Taylor hasta primer orden por lo que el error es claramente de segundo orden por cuanto si comparamos con la expansión en series de Taylor correspondiente tendremos

$$y_{k+1} = y_k + h \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_k} + \frac{h^2}{2!} \left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{x=x_k} + \dots$$

$$\|\varepsilon_{tot}\| \propto \frac{h^2}{2!} \left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{x=x_k}$$

### 2.0.3. El Método de Euler y el problema de Valores Iniciales

Este método si bien no se utiliza en la práctica en su forma estándar para ecuaciones diferenciales ordinarias, si ilustra el proceso de discretización de una ecuación diferencial y su solución mediante métodos numéricos.

Para resolver la ecuación de un oscilador armónico libre que parte del reposo, i.e.

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \omega_0^2\phi(t) = 0 \quad \text{con: } \omega_0^2 = \frac{k}{m}; \quad \phi(t_0) = 1; \quad \text{y} \quad \left. \frac{d\phi(t)}{dt} \right|_{t=t_0} = 0$$

en la cual  $\phi(t)$  representa la posición de un cuerpo de masa  $m$  unido a un resorte de constante elástica  $k$ .

Discretizando mediante diferencia centrada

$$h = t_{i+1} - t_i; \quad \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} \approx \frac{1}{h^2} [\phi(t_{i+1}) - 2\phi(t_i) + \phi(t_{i-1})] \equiv \frac{1}{h^2} [\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}]$$

con lo cual la ecuación del oscilador libre queda como

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \omega_0^2\phi(t) = 0 \quad \Rightarrow \phi_{i+1} - (2 - h^2\omega_0^2)\phi_i + \phi_{i-1} = 0$$

esta última ecuación es la versión en **diferencias finitas** de la ecuación diferencial y es claro que se convierte en una ecuación algebraica. Finalmente, los dos valores iniciales para la iteración  $\phi_0$  y  $\phi_1$  surgen de las condiciones iniciales

$$\phi_0 \equiv \phi(t = t_0) = 1$$

$$\left. \frac{d\phi(t)}{dt} \right|_{t=t_0} = 0 \Rightarrow \phi_1 \approx \phi_0$$

#### 2.0.4. Los Métodos de Runge-Kutta

Es el conjunto de métodos más populares y de mayor uso. La idea del método de Runge-Kutta es producir resultados equivalentes a desarrollos en Taylor de orden superior a Euler en métodos de un único paso por lo tanto

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} d\xi f(\xi, y(\xi))$$

y se aproxima la función con un promedio ponderado.

$$f(\xi, y(\xi)) \approx [\alpha f(y_k, x_k) + \beta f(y_k + \delta f(y_k, x_k) h_k, x_k + \gamma h_k)] \quad \text{con} \quad h_k = x_{k+1} - x_k$$

donde  $\alpha, \beta, \gamma$  y  $\delta$  son los pesos estadísticos a ser determinados. Por lo tanto

$$y_{k+1} = y_k + [\alpha f(y_k, x_k) + \beta f(y_k + \delta f(y_k, x_k) h_k, x_k + \gamma h_k)] h_k$$

Expandiendo por Taylor de dos variables

$$g(x + \lambda, y + \mu) = g(x, y) + [\lambda \partial_x g + \mu \partial_y g] + \frac{1}{2!} [\lambda^2 \partial_x^2 g + 2\lambda\mu \partial_{xy} g + \mu^2 \partial_y^2 g] + \dots$$

tendremos

$$y_{k+1} = y_k + [\alpha + \beta] f_k h_k + \beta [\gamma \partial_x f_k + \delta f_k \partial_y f_k] h_k^2 +$$

$$+ \beta \left[ \frac{\gamma^2}{2} \partial_x^2 f_k + 2\gamma\delta f_k \partial_{xy} f_k + \frac{\delta^2}{2} f_k^2 \partial_y^2 f_k \right] h_k^3 + \dots$$

con  $f_k = f(y_k, x_k)$  y como se ve claramente, queda libertad para escoger

**Euler Mejorado o Heuns**     $\alpha = \beta = \frac{1}{2}; \quad \gamma = \delta = 1$

$$y_{k+1} = y_k + f_k h_k + \frac{1}{2} [\partial_x f_k + f_k \partial_y f_k] h_k^2$$

**Euler Modificado**     $\alpha = 0; \quad \beta = 1; \quad \gamma = \delta = \frac{1}{2}$

$$y_{k+1} = y_k + f_k h_k + \left[ \frac{1}{2} \partial_x f_k + \frac{1}{2} f_k \partial_y f_k \right] h_k^2$$

Runge-Kutta de cuarto orden aproxima la función  $f(\xi, y(\xi))$  en cuatro puntos intermedios en el intervalo  $x_k < x < x_{k+1}$  por lo cual

$$y_{k+1} = y_k + [\alpha \kappa_1 + \beta \kappa_2 + \gamma \kappa_3 + \delta \kappa_4] h_k$$

podemos plantearnos varias formas de hacerlo

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h_k}{6} [\kappa_1 + 2\kappa_2 + 2\kappa_3 + \kappa_4]$$

donde

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\ \kappa_2 &= f\left(x_k + \frac{1}{2}h_k, y_k + \frac{1}{2}\kappa_1\right) \\ \kappa_3 &= f\left(x_k + \frac{1}{2}h_k, y_k + \frac{1}{2}\kappa_2\right) \\ \kappa_4 &= f(x_k + h_k, y_k + \kappa_3)\end{aligned}$$

o también

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h_k}{8} [\kappa_1 + 3\kappa_2 + 3\kappa_3 + \kappa_4]$$

donde

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\ \kappa_2 &= f\left(x_k + \frac{1}{3}h_k, y_k + \frac{1}{3}\kappa_1\right) \\ \kappa_3 &= f\left(x_k + \frac{1}{3}h_k, y_k + \frac{1}{3}\kappa_2\right) \\ \kappa_4 &= f(x_k + h_k, y_k + \kappa_3)\end{aligned}$$

Más aún el método de **Fehlberg de 4/5 orden** se puede escribir como

$$y_{k+1} = y_k + h_k [C_1\kappa_1 + C_2\kappa_2 + C_3\kappa_3 + C_4\kappa_4 + C_5\kappa_5 + C_6\kappa_6] + O(h^6)$$

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\ \kappa_2 &= f(x_k + a_2h_k, y_k + b_{21}\kappa_1) \\ \kappa_3 &= f(x_k + a_3h_k, y_k + b_{31}\kappa_1 + b_{32}\kappa_2) \\ \kappa_4 &= f(x_k + a_4h_k, y_k + b_{41}\kappa_1 + b_{42}\kappa_2 + b_{43}\kappa_3) \\ &\vdots \\ \kappa_6 &= f(x_k + a_6h_k, y_k + b_{61}\kappa_1 + b_{62}\kappa_2 + b_{63}\kappa_3 + b_{64}\kappa_4 + b_{65}\kappa_5)\end{aligned}$$

la cual puede ser redefinida y truncada para obtener

$$\tilde{y}_{k+1} = y_k + h_k [\tilde{C}_1\kappa_1 + \tilde{C}_2\kappa_2 + \tilde{C}_3\kappa_3 + \tilde{C}_4\kappa_4 + \tilde{C}_5\kappa_5] + O(h^5)$$

### 2.0.5. Métodos Multipaso

Los métodos multipaso se basan encontrar el valor  $y_{n+k}$  como una función de  $k$  valores precedentes:  $y_{n+k-1}, y_{n+k-2}, y_{n+k-3}, \dots, y_n$ . Para  $k = 1$ , retomamos los métodos de paso único del tipo Euler o Runge-Kutta. Será *explícito (abierto)* si el valor  $y_{n+k}$  puede ser calculado directamente o *implícito (abierto)* si la fórmula contiene el valor  $y_{n+k}$  deseado.

Otra vez la idea está en aproximar el argumento de la integración formal

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{i+1} = y_i + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} d\xi f(\xi, y(\xi))$$

nótese en este caso que el punto  $i + 1$  recibe la contribución de  $k$  puntos anteriores. El integrando  $f(\xi, y(\xi))$  lo aproximaremos con un polinomio de interpolación de Newton de orden  $n$ . Tal que

$$f(\xi, y(\xi)) \rightarrow f(\xi) = p_n(\xi) + R_n(\xi)$$

con  $p_n(\xi)$  el polinomio de interpolación y  $R_n(\xi)$  el residuo. Donde  $i$

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f[x_n] + (x - x_n) f[x_n, x_{n-1}] + (x - x_n)(x - x_{n-1}) f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}] + \dots \\ &\quad + (x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) \dots (x - x_1) f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, x_{n-3}, \dots, x_0] \\ R_n(x) &= (x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) \dots (x - x_0) \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!} \quad \text{con } x_0 < \zeta < x_n \end{aligned}$$

haciendo  $p_n(x) \equiv f(x_n + \alpha h)$  con  $\alpha$  cero o negativo de tal modo que en términos del operador diferencias atrasada  $\nabla f(x) = f(x) - f(x - h)$  siendo  $h$  el incremento

$$\begin{aligned} f(x_n + \alpha h) &= f_n + \alpha \nabla f_n + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!} \nabla^2 f_n + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{3!} \nabla^3 f_n + \\ &\quad + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2) \dots (\alpha+r-1)}{r!} \nabla^r f_n \end{aligned}$$

donde hemos denotado  $f_n \equiv f(x_n, y(x_n))$ ,  $\nabla^m f_n \equiv \nabla^m f|_{x=x_n}$ , y  $\alpha = (x - x_i)/h$ . Por lo tanto

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} d\xi f(\xi, y(\xi)) \\ &= y_i + h \int_{-k}^1 d\alpha f(x_n + \alpha h) \\ y_{i+1} &= y_i + h \left[ \alpha f_i + \frac{\alpha^2}{2} \nabla f_i + \alpha^2 \left( \frac{\alpha}{3} + \frac{1}{2} \right) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} + \alpha^2 \left( \frac{\alpha^2}{4} + \alpha + 1 \right) \frac{\nabla^3 f_i}{3!} + \right. \\ &\quad \left. + \alpha^2 \left( \frac{\alpha^3}{5} + \frac{3\alpha^2}{2} + \frac{11\alpha}{3} + 3 \right) \frac{\nabla^4 f_i}{4!} + \dots \right]_{-k}^1 \end{aligned}$$

por razones de conveniencia que son evidentes al hacer el desarrollo, se toman las fórmulas para  $k = r$  y  $k$  impar y obtendremos

$$\begin{aligned}
 \left. \begin{array}{l} k = 0 \\ r = 3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[ f_i + \frac{1}{2} \nabla f_i + \frac{5}{12} \nabla^2 f_i + \frac{3}{8} \nabla^3 f_i \right] \\ R = \frac{251}{720} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
 \left. \begin{array}{l} k = 1 \\ r = 1 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h [2f_i + 0 \nabla f_i] \\ R = \frac{1}{3} h^3 f^{(2)}(\zeta) \end{array} \right. \\
 \left. \begin{array}{l} k = 3 \\ r = 3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[ 4f_i - 4 \nabla f_i + \frac{3}{8} \nabla^2 f_i + 0 \nabla^3 f_i \right] \\ R = \frac{14}{45} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
 \left. \begin{array}{l} k = 5 \\ r = 5 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[ 6f_i - 12 \nabla f_i + 15 \nabla^2 f_i - 9 \nabla^3 f_i + \frac{33}{10} \nabla^4 f_i \right] \\ R = \frac{41}{140} h^7 f^{(6)}(\zeta) \end{array} \right.
 \end{aligned}$$

y al expresar las diferencias atrasadas las fórmulas explícitas (abierta) quedan expresadas como

$$\begin{aligned}
 \left. \begin{array}{l} k = 0 \\ r = 3 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}] & R \sim O(h^5) \\
 \left. \begin{array}{l} k = 1 \\ r = 1 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + 2hf_i & R \sim O(h^3) \\
 \left. \begin{array}{l} k = 3 \\ r = 3 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{4h}{3} [2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}] & R \sim O(h^5) \\
 \left. \begin{array}{l} k = 5 \\ r = 5 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{3h}{10} [11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4}] & R \sim O(h^7)
 \end{aligned}$$

Siguiendo el mis procedimiento se pueden escribir las fórmulas implícitas (cerradas) para las mismas “curiosas” situaciones. Para este caso la conveniencia se obtienes para  $k$  impar y  $r = k + 2$

$$\begin{aligned}
 \left. \begin{array}{l} k = 0 \\ r = 3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[ f_{i+1} - \frac{1}{2} \nabla f_{i+1} - \frac{1}{12} \nabla^2 f_{i+1} - \frac{1}{24} \nabla^3 f_{i+1} \right] \\ R = \frac{-19}{720} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
 \left. \begin{array}{l} k = 1 \\ r = 3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_{i-1} + h \left[ 2f_{i+1} - 2 \nabla f_i - \frac{1}{3} \nabla^2 f_{i+1} - 0 \nabla^3 f_{i+1} \right] \\ R = \frac{-1}{90} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
 \left. \begin{array}{l} k = 3 \\ r = 5 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_{i-3} + h \left[ 4f_{i+1} - 8 \nabla f_i - \frac{20}{3} \nabla^2 f_{i+1} - \frac{8}{3} \nabla^3 f_{i+1} + \frac{14}{45} \nabla^4 f_{i+1} \right] \\ R = \frac{-8}{945} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right.
 \end{aligned}$$

desarrollando las diferencias atrasadas, tendremos

$$\left. \begin{array}{l} k=0 \\ r=3 \end{array} \right\} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_{i-1} - 5f_{i-1} + 9f_{i-2}] \quad R \sim O(h^5)$$

$$\left. \begin{array}{l} k=1 \\ r=3 \end{array} \right\} y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f_{i+1} + f_i + f_{i-1}] \quad R \sim O(h^5)$$

$$\left. \begin{array}{l} k=3 \\ r=5 \end{array} \right\} y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} [7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3}] \quad R \sim O(h^7)$$

Se debe puntualizar lo siguiente respecto a las fórmulas explícitas e implícitas de los métodos multipaso antes mencionados

- Los métodos multipasos, normalmente, requieren menos evaluaciones de las funciones que los métodos monopaso para un mismo nivel de precisión.
- Los métodos multipaso requieren de un método monopaso que le permita determinar los  $y_{n+k-1}, y_{n+k-2}, y_{n+k-3}, \dots, y_n$  puntos iniciales.
- Las fórmulas explícitas son, normalmente, menos precisas que las implícitas. La razón se fundamenta en que, mientras las explícitas extrapolan la solución al punto  $y_{i+1}$ , las implícitas la interpolan, por cuanto la toman en cuenta en el momento de calcularla.
- Las fórmulas explícitas e implícitas deben ser consideradas como complementarias, por cuanto las explícitas pueden *predecir* el valor de  $y_{i+1}$  necesario para la  $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$  del cálculo de  $y_{i+1}^*$  en la fórmula implícita.

Existen varias combinaciones *predictor-corrector*, entre ellas mencionamos:

#### Milne de cuarto orden

- Predictor

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3} [2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f_{i+1} - 4f_i + f_{i-1}]$$

#### Milne de sexto orden

- Predictor

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3h}{10} [11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} [7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3}]$$

#### Adams Modificado o Adams Moulton

- Predictor

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

El método de extrapolación multipaso más exitoso (conjuntamente con los métodos de paso único del tipo **Runge-Kutta**) es el de extrapolación racional de **Bulirsch-Stoer** en el cual se define un paso superior de  $H$  y una serie de subpaso  $h_\eta = H/\eta$  con el aumento del número de subpasos, en algún momento siguiendo algún criterio de convergencia se hace una extrapolación (racional) que representa el límite  $\eta \rightarrow \infty$ .

El método de Bulirsch-Stoer tiene una estrategia diferente al los anteriores y posee, como motor de aproximación el método del punto medio modificado o salto de rana (*leap frog*). Este esquema se utiliza con frecuencia en discretizaciones de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y se basa en aproximar la derivada por el valor el promedio en los dos extremos:

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y'(x_n) = f(y(x_n), x_n) = \frac{y(x_n) - y(x_{n-1}))}{2h}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} z_0 &\equiv y(x) \\ z_1 &= z_0 + hf(x, z_0) \\ &\vdots \\ z_{n+1} &= z_{n-1} - 2hf(x + nh, z_n) \end{aligned}$$

para finalmente calcular

$$y(x + H) \approx y_n \equiv \frac{1}{2} [z_n + z_{n-1} + hf(x + H, z_n)]$$

Nótese que si reacomodamos

$$y(x + H) \approx \frac{4y_n - y_{n/2}}{3}$$

obtendremos un método de cuarto orden que requiere menos evaluaciones de  $f(y(x_n), x_n)$  por paso  $h$

### 3. Control del Paso

**En General para métodos de 4<sup>to</sup> orden.** Tal y como se mencionó en el caso de la integración numérica, el primer criterio que surge es dividir el paso  $h$  en la mitad, calcular todo de nuevo y

comparar los resultados a ver si está dentro de los límites de tolerancia que nos hemos impuesto

$$\left\| \frac{y_h - y_{h/2}}{y_h} \right\| \equiv \Delta(y_h, y_{h/2}) < \varepsilon_{\text{máx}} \Rightarrow$$

$$\frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_{h/2})} \approx \left( \frac{h_0}{h_t} \right)^5 \Rightarrow h_0 = h_t \left( \frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_{h/2})} \right)^{1/5}$$

donde hemos denotado  $h_0$  como el paso ideal. Esta relación es general para cualquier método de 4 orden de paso único, multipaso, implícito o explícito.

Más aún, la práctica ha indicado que

$$h_0 = \begin{cases} \mathcal{M} h_t \left( \frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_{h_t}^*)} \right)^{0,20} \equiv \mathcal{M} h_t \left( \frac{\Delta_0}{\Delta_h} \right)^{0,20} & \Delta_0 \geq \Delta_1 \\ \mathcal{M} h_t \left( \frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_{h_t}^*)} \right)^{0,25} \equiv \mathcal{M} h_t \left( \frac{\Delta_0}{\Delta_h} \right)^{0,25} & \Delta_0 < \Delta_1 \end{cases}$$

donde  $0 < \mathcal{M} < 1$  un factor de seguridad

**Para métodos Runge-Kutta.** es importante mencionar que se utilizan mayoritariamente métodos hasta cuarto orden porque de mayor orden ( $M$ , por ejemplo) involucran más de  $M$  evaluaciones (y menos  $M - 2$ ) de la derivada. Por ello para este tipo de métodos se descubrió que considerando el mismo número de puntos para la evaluación intermedia se pueden generar métodos de distinto orden, y para colmo de suerte el menor orden de esta situación se expresa para métodos de 4 y 5 orden. En particular Runge-Kutta de 5 orden se puede escribir como:

$$y_{k+1} = y_k + h_k [C_1 \kappa_1 + C_2 \kappa_2 + C_3 \kappa_3 + C_4 \kappa_4 + C_5 \kappa_5 + C_6 \kappa_6] + O(h^6)$$

$$\kappa_1 = f(x_k, y_k)$$

$$\kappa_2 = f(x_k + a_2 h_k, y_k + b_{21} \kappa_1)$$

$$\kappa_3 = f(x_k + a_3 h_k, y_k + b_{31} \kappa_1 + b_{32} \kappa_2)$$

$$\kappa_4 = f(x_k + a_4 h_k, y_k + b_{41} \kappa_1 + b_{42} \kappa_2 + b_{43} \kappa_3)$$

$$\vdots$$

$$\kappa_6 = f(x_k + a_6 h_k, y_k + b_{61} \kappa_1 + b_{62} \kappa_2 + b_{63} \kappa_3 + b_{64} \kappa_4 + b_{65} \kappa_5)$$

y con los mismos puntos (¡ las mismas evaluaciones ! ) se puede reescribir para 4 orden como:

$$\tilde{y}_{k+1} = y_k + h_k [\tilde{C}_1 \kappa_1 + \tilde{C}_2 \kappa_2 + \tilde{C}_3 \kappa_3 + \tilde{C}_4 \kappa_4 + \tilde{C}_5 \kappa_5] + O(h^5)$$

por lo tanto el error se puede estimar

$$\Delta(y_{k+1}, \tilde{y}_{k+1}) = \sum_{i=1}^6 (C_i - \tilde{C}_i) \kappa_i$$

y el control del paso se utiliza exactamente igual

$$h_0 = h_t \left( \frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, \tilde{y}_h)} \right)^{0,20}$$

**Para métodos multipasos y predictor corrector** la situación puede tener un refinamiento adicional antes de proceder a modificar el paso  $h$ . El esquema sería para un método predictor corrector del tipo Adams Modificado o Adams Moulton, donde el

- Predictor

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

se realiza una serie de iteraciones dentro de la fórmula de corrector, i.e.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} \left[ 9f \left( x_{i+1}, y_{i+1} \right) + 19f(x_i, y_i) - 5f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2}) \right]$$