

Universidad de Oviedo

Facultad de Ciencias

Grado en Matemáticas

Trabajo de Fin de Grado

Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden mediante métodos de Nyström

Autor: Nicolás Carrizosa Arias

Supervisado por:

Pablo Pérez Riera

Curso 2023-2024

Índice general

Resumen	5
1. Los métodos de Nyström	7
2. Análisis del orden de un método RK	15
2.1. Desarrollo en serie de la solución exacta	17
2.2. Desarrollo en serie de la solución numérica	25
2.3. Condiciones de orden de un método RK	34
3. Análisis del orden de un método RKN	37
3.1. Desarrollo en serie de la solución exacta	39
3.2. Desarrollo en serie de la solución numérica	47
3.3. Condiciones de orden de un método RKN	58
3.4. Métodos de Nyström para ecuaciones $\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$	61
4. Construcción de un método RKN y experimentos numéricos	65
4.1. Construcción de un método RKN especial	65
4.2. Experimentos numéricos	66
Bibliografía	71

Resumen

Los fenómenos físicos en los que intervienen fuerzas y aceleraciones suelen modelarse mediante sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden. Esto sucede comúnmente en problemas relacionados con la mecánica clásica, la mecánica cuántica o la electrónica [10]. Salvo en casos muy particulares, resulta imposible determinar la solución exacta del problema y por tanto es necesario recurrir a métodos numéricos.

En esta situación (y tal como se pensó hasta principios del siglo XX), es común transformar el sistema diferencial de orden 2 en otro equivalente de orden 1, doblando la dimensión del sistema, para poder resolverlo numéricamente con métodos clásicos (de uno o varios pasos).

Desde un punto de vista computacional, el coste de trabajar con un sistema de ecuaciones de mayor tamaño puede afectar decisivamente a la eficiencia de los métodos utilizados. Por ello, es interesante disponer de métodos específicos para sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden, como propuso Nyström en 1925 [8].

En este Trabajo de Fin de Grado se estudia el marco teórico de los métodos de Runge-Kutta-Nyström, que derivan de los métodos de Runge-Kutta y están diseñados especialmente para la resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden.

En la primera parte del trabajo se recuerdan algunas nociones elementales sobre la resolución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales y los métodos de Runge-Kutta, que se estudian en el Grado. La justificación rigurosa de las propiedades de tales métodos y el análisis del error necesitan del desarrollo de la Teoría de Butcher, que se trata en el Capítulo 2. Este estudio es la antesala obligatoria para el Capítulo 3, dedicado a los métodos de Nyström; en él se hace un análisis del error y se deducen los principales resultados sobre su orden de consistencia. En el último capítulo se construye un método de Nyström y se llevan a cabo simulaciones numéricas.

El libro de Hairer, Nørsett y Wanner [5] ha sido la referencia principal utilizada en este trabajo. También [3] y [2] han sido consultados frecuentemente.

Capítulo 1

Los métodos de Nyström

En este trabajo nos ocuparemos de la resolución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden del tipo

$$\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}, \mathbf{y}'), \quad t \in I = [t_0, t_0 + T], \quad (1.1)$$

con condiciones iniciales

$$\mathbf{y}(t_0) = \boldsymbol{\eta}, \quad \mathbf{y}'(t_0) = \boldsymbol{\eta}'.$$

Para su resolución numérica se puede utilizar un método clásico (de uno o varios pasos) para sistemas de primer orden, pero para ello es necesario transformar el sistema original de orden 2 en otro de orden 1, lo que supone doblar el tamaño del sistema y aumentar el coste computacional del método a utilizar. Sin embargo, existen métodos diseñados específicamente para estos sistemas, como son los métodos de Nyström.

Como hemos dicho, el sistema (1.1) se puede transformar en un sistema equivalente de orden 1 y resolverlo con un método de Runge-Kutta. Para ello, basta considerar $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}, \mathbf{y}')^T$ como una nueva variable, de manera que el sistema (1.1) equivale a

$$\mathbf{Y}' = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \mathbf{y}' \\ \mathbf{f}(t, \mathbf{y}, \mathbf{y}') \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

Si denotamos \mathbf{f}_1 y \mathbf{f}_2 a las funciones

$$\mathbf{f}_1(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}, \quad \mathbf{f}_2(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}),$$

y definimos \mathbf{F} mediante

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \mathbf{f}_2(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{f}(t, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{pmatrix},$$

entonces (1.2) se puede escribir en la forma

$$\mathbf{Y}' = \mathbf{F}(t, \mathbf{Y}). \quad (1.3)$$

Este sistema de primer orden se puede resolver con un método de Runge-Kutta de q etapas con tabla de Butcher [1]

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,q} \\ c_2 & a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_q & a_{q,1} & a_{q,2} & \dots & a_{q,q} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_q \end{array} \quad \text{o abreviadamente} \quad \begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^t \end{array}. \quad (1.4)$$

Los métodos de Runge-Kutta (abreviadamente, RK) son una familia especial de métodos de un paso. Para resolver un problema de valor inicial de primer orden

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), & t \in I = [t_0, t_0 + T], \\ \mathbf{y}(t_0) = \boldsymbol{\eta}, \end{cases} \quad (1.5)$$

con un método de Runge-Kutta, es necesario construir una *partición* \mathcal{P}_h

$$\mathcal{P}_h = \{t_0, t_1, \dots, t_N : t_n < t_{n+1} \text{ para } n = 0, 1, \dots, N-1 \text{ y } t_N = t_0 + T\}$$

del intervalo $I = [t_0, t_0 + T]$. La diferencia $h_n = t_{n+1} - t_n$ es el *paso* que se necesita para avanzar desde t_n hasta t_{n+1} (Figura 1.1).

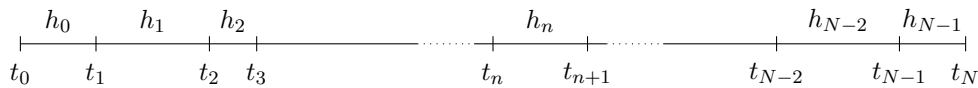


Figura 1.1: Una partición del intervalo $I = [t_0, t_0 + T]$. La diferencia $h_n = t_{n+1} - t_n$ es el *paso* que se necesita para avanzar desde t_n hasta t_{n+1} .

Un método de un paso calcula una aproximación \mathbf{y}_{n+1} mediante una fórmula en la que interviene la aproximación \mathbf{y}_n , pero no las anteriores; también puede intervenir el instante t_n y el paso h_n . El método más sencillo es el método de Euler explícito, cuya ley de recurrencia es

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n).$$

En general, partiendo de una aproximación inicial \mathbf{y}_0 la ley de recurrencia de un método de un

paso es de la forma

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n \phi(t_n, \mathbf{y}_n, h_n), \quad n = 0, \dots, N - 1. \quad (1.6)$$

La *función incremento* ϕ depende del método elegido.

Cuando se utiliza el método de Runge-Kutta (1.4) para aproximar numéricamente la solución del problema (1.5), en cada instante t_n usando un paso h_n , hay que disponer de q evaluaciones intermedias $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_q$ definidas por

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_n + c_1 h_n, \mathbf{y}_n + h_n a_{1,1} \mathbf{k}_1 + h_n a_{1,2} \mathbf{k}_2 + \dots + h_n a_{1,q} \mathbf{k}_q), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_n + c_2 h_n, \mathbf{y}_n + h_n a_{2,1} \mathbf{k}_1 + h_n a_{2,2} \mathbf{k}_2 + \dots + h_n a_{2,q} \mathbf{k}_q), \\ &\vdots \\ \mathbf{k}_q &= \mathbf{f}(t_n + c_q h_n, \mathbf{y}_n + h_n a_{q,1} \mathbf{k}_1 + h_n a_{q,2} \mathbf{k}_2 + \dots + h_n a_{q,q} \mathbf{k}_q). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Si la matriz de coeficientes $A = \{a_{i,j}\}$ de la tabla de Butcher (1.4) es estrictamente triangular inferior, entonces las evaluaciones $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_q$ están definidas explícitamente y el método se dice *explícito*; en caso contrario, el método es *implícito*. Este sistema (1.7) depende de la terna $\{t_n, \mathbf{y}_n, h_n\}$; por eso cada \mathbf{k}_i es una función de esos tres argumentos. Una vez calculadas estas evaluaciones, la aproximación \mathbf{y}_{n+1} se define mediante

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n (b_1 \mathbf{k}_1 + \dots + b_q \mathbf{k}_q), \quad (1.8)$$

es decir

$$\phi(t_n, \mathbf{y}_n, h_n) = b_1 \mathbf{k}_1 + \dots + b_q \mathbf{k}_q.$$

Ahora, para adaptar el método de Runge-Kutta (1.4) cuando se utiliza para resolver el problema (1.5), vamos a suponer que en el instante t_n se conoce una aproximación $(\mathbf{y}_n, \mathbf{y}'_n)$ del valor exacto $(\mathbf{y}(t_n), \mathbf{y}'(t_n))$; entonces, para calcular la aproximación $(\mathbf{y}_{n+1}, \mathbf{y}'_{n+1})$ en el instante $t_{n+1} = t_n + h_n$ es necesario obtener $2q$ variables intermedias $\{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_q\}$ y $\{\mathbf{k}'_1, \dots, \mathbf{k}'_q\}$ definidas por

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{y}'_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}'_j, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{k}'_i = \mathbf{f}\left(t_n + c_i h_n, \mathbf{y}_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}_j, \mathbf{y}'_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}'_j\right), \quad (1.10)$$

para $i \in \{1, 2, \dots, q\}$. Una vez obtenidas, basta hacer

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{k}_i, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{y}'_{n+1} = \mathbf{y}'_n + h_n \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{k}'_i. \quad (1.12)$$

En la práctica, esto supone un gran coste computacional, porque el número de variables se duplica.

Vamos a ver que el algoritmo se puede escribir de una forma más sencilla; esa es la idea original de Nyström [8] y de los métodos que llevan su nombre. En lo que sigue, supondremos que los coeficientes $\{c_i\}$ y $\{a_{i,j}\}$ del método de Runge-Kutta (1.4) satisfacen la denominada condición de *suma de filas*: para cada $i = 1, 2, \dots, q$, se cumple

$$\sum_{j=1}^q a_{i,j} = c_i, \quad (1.13)$$

y que los coeficientes $\{b_i\}$ verifican la condición de *consistencia*

$$\sum_{i=1}^q b_i = 1. \quad (1.14)$$

La condición de *suma de filas* (1.13) significa que cada \mathbf{k}_i en (1.7) es una aproximación de orden 1 de la derivada; la condición de *consistencia* (1.14) permite interpretar la suma

$$b_1 \mathbf{k}_1 + \dots + b_q \mathbf{k}_q$$

que aparece en (1.8) como una media ponderada de tales aproximaciones de la derivada.

Si sustituimos las fórmulas (1.9) en (1.10), se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{k}'_i &= \mathbf{f} \left(t_n + c_i h_n, \mathbf{y}_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \left(\mathbf{y}'_n + h_n \sum_{k=1}^q a_{j,k} \mathbf{k}'_k \right), \mathbf{y}'_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}'_j \right) \\ &= \mathbf{f} \left(t_n + c_i h_n, \mathbf{y}_n + h_n c_i \mathbf{y}'_n + h_n^2 \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^q a_{i,j} a_{j,k} \mathbf{k}'_k, \mathbf{y}'_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}'_j \right). \end{aligned}$$

Por brevedad, denotemos

$$\bar{a}_{i,j} = \sum_{k=1}^q a_{i,k} a_{k,j}, \quad (1.15)$$

para cualesquiera $i, j \in \{1, 2, \dots, q\}$. Con esta notación, la expresión anterior de \mathbf{k}'_i se puede reescribir en la forma

$$\mathbf{k}'_i = \mathbf{f} \left(t_n + c_i h_n, \mathbf{y}_n + h_n c_i \mathbf{y}'_n + h_n^2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{k}'_j, \mathbf{y}'_n + h_n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}'_j \right). \quad (1.16)$$

En cuanto a la fórmula (1.11), equivale a

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h_n \mathbf{y}'_n + h_n^2 \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \mathbf{k}'_i, \quad (1.17)$$

donde hemos denotado

$$\bar{b}_i = \sum_{j=1}^q b_j a_{j,i}, \quad (1.18)$$

para $i \in \{1, 2, \dots, q\}$. La expresión (1.12) no es necesario modificarla. De esta manera, el método queda definido por las expresiones (1.16), (1.17) y (1.12), en las que no intervienen las variables $\{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_q\}$, en lugar de (1.9), (1.10), (1.11) y (1.12). En la práctica, esto supone un ahorro de casi la mitad de las variables que deben almacenarse [5].

En 1925, Nyström [8] propuso usar métodos de este tipo, pero sin exigir que los coeficientes $\bar{a}_{i,j}$ y \bar{b}_i se calculen como en (1.15) y (1.18), lo que permite mayor grado de libertad para escogerlos. En su honor, estos métodos se conocen como *métodos de Nyström* (abreviadamente, RKN) [5].

Por lo tanto, los métodos de Nyström constituyen una generalización de los métodos de Runge-Kutta; como ellos, son métodos de un paso, de manera que son aplicables las definiciones y resultados estudiados en [9] para este tipo de métodos.

El *error global* en un instante t_n , que se denota \mathbf{e}_n , es la diferencia entre la solución exacta y la solución aproximada en ese instante:

$$\mathbf{e}_n = \mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}_n.$$

Se dice que el método de un paso (1.6) es *convergente* para el problema de valor inicial (1.5) si

$$\|\boldsymbol{\eta} - \mathbf{y}_0\| \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad h \rightarrow 0 \quad \implies \quad \max_{1 \leq n \leq N} \|\mathbf{e}_n\| \rightarrow 0,$$

donde h denota el *diámetro de la partición* \mathcal{P}_h , es decir, $h := \max_{n=0, \dots, N-1} h_n$. Además, se dice que es *convergente de orden* $p > 0$ para el problema (1.5) si

$$\|\boldsymbol{\eta} - \mathbf{y}_0\| = \mathcal{O}(h^p) \quad \implies \quad \max_{1 \leq n \leq N} \|\mathbf{e}_n\| = \mathcal{O}(h^p).$$

En general, es muy complicado analizar directamente el comportamiento asintótico del error global, porque la solución aproximada se define mediante una ley de recurrencia (1.6) (una ecuación en diferencias) que, habitualmente, es no lineal. Por ello, se introduce el concepto de *error local* en un instante t_n , con paso h_n y asociado a una solución \mathbf{y} de la ecuación diferencial del problema (1.5):

$$\varepsilon(t_n, h_n; \mathbf{y}) = \mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}(t_n) - h_n \phi(t_n, \mathbf{y}(t_n), h_n).$$

El error local es el error propio del método: representa el error cometido al dar un paso partiendo del valor exacto; es el precio inevitable que hay que pagar por utilizar el método numérico en cada instante.

El método de un paso (1.6) es *consistente* con la ecuación diferencial del problema (1.5) si, para cualquier solución \mathbf{y} de la ecuación diferencial del problema, se cumple

$$h \rightarrow 0 \implies \sum_{n=0}^{N-1} \|\boldsymbol{\varepsilon}(t_n, h_n; \mathbf{y})\| \rightarrow 0.$$

Además, se dice que el método es de *orden* al menos $p > 0$ si, para cualquier solución \mathbf{y} de la ecuación diferencial que sea de clase C^{p+1} , se verifica

$$\sum_{n=0}^{N-1} \|\boldsymbol{\varepsilon}(t_n, h_n; \mathbf{y})\| = \mathcal{O}(h^p).$$

Para que el método sea de orden p , es suficiente que se verifique $\|\boldsymbol{\varepsilon}(t_n, h_n; \mathbf{y})\| = \mathcal{O}(h^{p+1})$ para $n = 0, 1, \dots, N - 1$.

La consistencia (o el orden) de un método no aseguran que sea convergente, por el efecto que puede tener la acumulación de los errores locales en cada instante. Por eso se introduce el concepto de estabilidad, que es un indicador de la sensibilidad del método numérico con respecto a perturbaciones en los datos iniciales.

El método de un paso (1.6) se dice *estable* si existen $h^* > 0$ y $M > 0$ tales que para cualquier partición $\mathcal{P}_h = \{t_0 < t_1 < \dots < t_N = t_0 + T\}$ con diámetro $h \leq h^*$ y cualesquiera tres colecciones $\{\mathbf{u}_n\}_{n=0}^N$, $\{\mathbf{v}_n\}_{n=0}^N$ y $\{\mathbf{w}_n\}_{n=0}^N$ que verifiquen

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + h_n \boldsymbol{\phi}(t_n, \mathbf{u}_n, h_n), \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + h_n \boldsymbol{\phi}(t_n, \mathbf{v}_n, h_n) + \mathbf{w}_n, \end{aligned} \quad n = 0, 1, \dots, N - 1,$$

se cumple

$$\|\mathbf{v}_n - \mathbf{u}_n\| \leq M \left(\|\mathbf{v}_0 - \mathbf{u}_0\| + \sum_{i=0}^{n-1} \|\mathbf{w}_i\| \right), \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

La estabilidad equivale a afirmar que pequeñas perturbaciones en la relación de recurrencia generan pequeños cambios en la solución numérica. La estabilidad es una propiedad intrínseca del método (más bien, de su ley de recurrencia), no de la ecuación diferencial del problema. Para un método de un paso, es conocido que se garantiza la estabilidad si la función incremento $\boldsymbol{\phi}$ es lipschitziana respecto de su segundo argumento.

El resultado siguiente relaciona los conceptos de convergencia, estabilidad y consistencia; la demostración puede consultarse en [5].

Teorema 1.1. *Si un método de un paso es estable y consistente con la ecuación diferencial del*

problema (1.5), entonces el método es convergente.

Además, si el método de un paso tiene orden $p > 0$, entonces es convergente de orden p .

Observación 1.1. Notemos que es suficiente estudiar el comportamiento del error local en un instante genérico $t_0 \in I$ con paso h , en vez de considerar cada instante t_i de la partición $\mathcal{P}_h = \{t_0 < t_1 < \dots < t_i < \dots < t_N\}$ del intervalo de integración.

Esto es debido a que en los métodos de un paso el cómputo de $\varepsilon(t_i, h_i; \mathbf{y})$ no depende de los instantes t_j ni de las aproximaciones \mathbf{y}_j anteriores. En todo este trabajo, ese será el criterio utilizado, porque permitirá aligerar la notación.

La dificultad de la construcción de métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales reside en el análisis del error local y en asegurar que el método proporcione aproximaciones fiables y de bajo coste computacional para la solución del problema.

Para poder abordar la base teórica de los métodos de Nyström (concretamente el estudio del error local), resulta necesario profundizar primero en la Teoría de Butcher para los métodos de Runge-Kutta; en concreto, el fundamento de los métodos de Nyström es una generalización de la Teoría de Butcher para ecuaciones diferenciales de segundo orden.

Capítulo 2

Análisis del orden de un método RK

En este capítulo deduciremos el desarrollo en potencias del paso del error local de un método RK. Siguiendo la línea de [5], se establecerá una relación entre los términos del desarrollo en serie de Taylor del error local y ciertos objetos de Teoría de Grafos. Esto permitirá deducir las condiciones que deben de satisfacer los coeficientes del método RK para alcanzar un determinado orden. A toda la teoría que se desarrolla a partir de esta idea se la denomina *Teoría de Butcher*, en honor a J.C. Butcher [1].

Si bien esta sección se suele enfocar a través del concepto de B-serie (ver [2]), en este trabajo se optará por un acercamiento más directo expuesto en [5] porque es más sencillo de extender para los métodos de Nyström, que se estudiarán en el Capítulo 3.

El problema de valor inicial.

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), & t \in I = [t_0, t_0 + T], \\ \mathbf{y}(t_0) = \boldsymbol{\eta}, \end{cases} \quad (2.1)$$

se puede transformar en un sistema autónomo equivalente considerando el cambio de variable

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} t \\ \mathbf{y} \end{pmatrix}.$$

Además de lo expuesto en el capítulo anterior, se puede probar que, si el método RK satisface la condición de suma de filas (1.13), entonces la solución numérica del problema original coincide con la del problema autónomo asociado [9].

Así pues, sin pérdida de generalidad, consideramos un problema autónomo de la forma

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y}), & t \in I = [t_0, t_0 + T], \\ \mathbf{y}(t_0) = \boldsymbol{\eta}, \end{cases} \quad (2.2)$$

con $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$. Tomemos un método RK de q etapas definido por la tabla de Butcher (1.4) y cuyos coeficientes cumplan la condición de suma de filas (1.13). A partir de un terna $\{t_0, \mathbf{y}_0, h\}$, la aproximación \mathbf{y}_1 de la solución exacta \mathbf{y} del problema (2.2) en $t_0 + h$ viene dada por

$$\begin{cases} \mathbf{k}_i = \mathbf{f}\left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^q a_{ij} \mathbf{k}_j\right), & i = 1, 2, \dots, q \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{k}_i. \end{cases} \quad (2.3)$$

De aquí en adelante, indicaremos con un superíndice en mayúscula las diferentes componentes de un vector: $\mathbf{y} = (\mathbf{y}^J)_{J=1,2,\dots,d}$. Por ejemplo, en (2.2) se puede ver la ecuación diferencial individualizada para cada componente $J = 1, 2, \dots, d$ como

$$(\mathbf{y}^J)' = \mathbf{f}^J(\mathbf{y}) = \mathbf{f}^J(\mathbf{y}^1, \dots, \mathbf{y}^d).$$

Esta notación resultará especialmente útil en los sumatorios.

Como la ecuación diferencial del problema (2.2) es autónoma, podemos expresar la ley (2.3) del método RK de manera alternativa. Si denotamos $\mathbf{g}_i = \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^q a_{ij} \mathbf{k}_j$, entonces $\mathbf{k}_j = \mathbf{f}(\mathbf{g}_j)$ y por lo tanto

$$\mathbf{g}_i = \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^q a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{g}_j).$$

Así, la relación de recurrencia del RK original se puede reformular como:

$$\begin{cases} \mathbf{g}_i^J = \mathbf{y}_0^J + h \sum_{j=1}^q a_{ij} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j^1, \dots, \mathbf{g}_j^d), & i = 1, 2, \dots, q \\ \mathbf{y}_1^J = \mathbf{y}_0^J + h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_i^1, \dots, \mathbf{g}_i^d) \end{cases} \quad (2.4)$$

para cada componente $J = 1, 2, \dots, d$.

Para poder establecer qué condiciones deben satisfacer los coeficientes $\{a_{ij}\}$, $\{b_i\}$ y $\{c_i\}$ para que el método alcance un cierto orden, es necesario analizar el desarrollo de Taylor del error local

$$\varepsilon(t_0, h; \mathbf{y}) = \mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_0 - h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{f}(\mathbf{g}_i),$$

donde \mathbf{y}_1 es el valor aproximado que proporciona el método partiendo del valor exacto \mathbf{y}_0 en el instante t_0 .

Para ello, se estudian por separado los desarrollos en serie asociados a la solución exacta $\mathbf{y}(t_0 + h)$ y a la aproximación numérica \mathbf{y}_1 proporcionada por el método (2.4), donde esta última se está

entendiendo como función de h .

Una primera manera de abordar este problema sería aplicar directamente la fórmula de Taylor a los términos $\mathbf{y}(t_0 + h)$ e \mathbf{y}_1 , supuesto que \mathbf{f} sea suficientemente regular. No obstante, a medida que se añaden más términos al desarrollo, los cálculos rápidamente se vuelven impracticables.

Por esta razón, para poder tratar de manera más cómoda y eficiente los desarrollos en serie, es conveniente introducir un formalismo desarrollado por Butcher (ver [1]) y posteriormente refinado por Hairer (ver [5]) [2]. Esta idea, consistente en reproducir el comportamiento de la Regla de la Cadena a través de una familia de grafos llamada *árboles ordenados monótonamente*, es el pilar fundamental de la Teoría de Butcher y lo que da pie, extendiéndolo a las ecuaciones diferenciales de segundo orden, a este trabajo.

2.1. Desarrollo en serie de la solución exacta

Sea \mathbf{y} una solución de la ecuación diferencial del problema (2.2). Las sucesivas derivadas de su componente J -ésima, \mathbf{y}^J , se pueden obtener derivando directamente en la ecuación diferencial. Por simplicidad de notación, se escribirá \mathbf{f} en lugar de $\mathbf{f}(\mathbf{y})$ e igualmente para todas sus derivadas. Teniendo en cuenta la Regla de la Cadena y que la ecuación es autónoma, resulta

$$\begin{aligned}
(\mathbf{y}^J)' &= \mathbf{f}^J, \\
(\mathbf{y}^J)'' &= \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J (\mathbf{y}^K)' = \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}^K, \\
(\mathbf{y}^J)''' &= \sum_{K,L=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L + \sum_{K,L=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L, \\
(\mathbf{y}^J)^{(4)} &= \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KLM}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}_M^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M \\
&\quad + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KM}^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_{LM}^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M, \\
&\quad \vdots
\end{aligned}$$

donde los superíndices indican coordenadas y los subíndices se asocian con la derivación respecto de las variables de los índices correspondientes:

$$\mathbf{f}_K^J = \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K}, \quad \mathbf{f}_{KL}^J = \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}^L}, \quad \dots, \quad \mathbf{f}_{I_1 \dots I_m}^J = \frac{\partial^m \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{I_1} \dots \partial \mathbf{y}^{I_m}}. \quad (2.5)$$

Tras el cálculo de estas primeras derivadas, se puede ver que en general $(\mathbf{y}^J)^{(n)}$ es suma de varios términos de naturaleza distinta; cada uno un sumatorio sobre las coordenadas del producto de

las diferentes derivadas parciales y componentes de \mathbf{f} . Por ejemplo, en $(\mathbf{y}^J)'''$ hay dos sumandos, mientras que en $(\mathbf{y}^J)^{(4)}$ hay seis, de los cuales el 2º, 3º y 4º coinciden (nótese que se está iterando sobre los índices, luego el sumando es independiente de la nomenclatura I, L o M) [2].

Los términos anteriores se construyen a partir de la Regla de Cadena y de la derivada del producto y suma de términos y se pueden modelar mediante los siguientes objetos matemáticos:

Definición 2.1. Dado $n \in \mathbb{N}$, sea $A_n = \{j_1 < j_2 < \dots < j_n\}$ un conjunto ordenado de n índices. Se define un *árbol ordenado monótonamente de orden n* como una aplicación

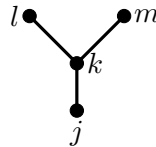
$$\tau : A_n \setminus \{j_1\} \longrightarrow A_n \quad (2.6)$$

tal que $\tau(j) < j$ para cada $j \in A_n \setminus \{j_1\}$.

Los árboles ordenados monótonamente se pueden representar a través de grafos. Por ejemplo, podemos identificar el árbol $\hat{\tau}$ de orden 4 dado por

$$\begin{aligned} \hat{\tau} : \{k, l, m\} &\longrightarrow \{j, k, l, m\} \\ k &\longmapsto j \\ l &\longmapsto k \\ m &\longmapsto k \end{aligned}$$

con el grafo



Podemos por tanto identificar los índices de un árbol ordenado monótonamente con los *nodos* de su grafo y de hecho los trataremos indistintamente.

Al número de nodos de un árbol τ , que denotaremos por $\varrho(\tau) = n$, se le denomina *orden* del árbol. El conjunto de todos los árboles ordenados monótonamente de orden n se denota por LT_n .

Por convenio se denotará por \emptyset al árbol vacío, que es el único árbol de orden 0, y por $\tau_0 : \emptyset \rightarrow \{j\}$ al único árbol de orden 1, cuyo grafo es un único nodo.

Se dirá además que un nodo j es *hijo* de $\tau(j)$, y a su vez, $\tau(j)$ se dirá *padre* de j . Queda claro que un mismo nodo puede tener varios hijos, pero sólo puede tener un único padre. Además, se llamará *raíz* de τ al nodo del cual descienden los demás.

Si volvemos al ejemplo anterior, se tiene $\hat{\tau} \in LT_4$. Además, el nodo raíz es j , que tiene por hijo a k y a su vez, este tiene por hijos a l y a m .

Notemos ahora que se puede establecer una correspondencia biunívoca entre los árboles ordenados monótonamente de un cierto orden y los términos de la derivada k -ésima de \mathbf{y}^J [2]. Esta correspondencia queda reflejada en la Tabla 2.1, que recoge las sucesivas derivadas de la componente \mathbf{y}^J y los árboles ordenados monótonamente hasta orden 4.

Dado un árbol ordenado monótonamente $\tau \in LT_n$, asignemos cada nodo z que no tiene hijos (llamado *hoja* del árbol) con un término del tipo \mathbf{f}^Z ; cada nodo z con un solo hijo w con el término \mathbf{f}_{WQ}^Z ; cada nodo z con dos hijos w y q con \mathbf{f}_{WQ}^Z , y así sucesivamente. Entonces, la presencia de un nodo genérico z en el árbol considerado se reflejaría con un término $\mathbf{f}_{\tau^{-1}(Z)}^Z$, donde $\tau(z)^{-1}$ denota la imagen inversa del índice z en el árbol τ (Notemos que en el subíndice de la expresión anterior estamos haciendo un abuso de notación: con $\tau^{-1}(Z)$ nos referimos a los índices en mayúsculas en $\tau^{-1}(z)$).

Asociemos ahora a τ el sumatorio sobre las coordenadas de \mathbf{f} del producto de los términos vinculados a cada uno de sus nodos (excluyendo en el sumatorio el índice asociado al nodo raíz).

Por ejemplo, los sumandos de la tercera derivada de \mathbf{y}^J se relacionan con los árboles de LT_3 de la siguiente manera:

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} k \bullet \\ \color{red}{/} \\ \color{red}{\backslash} \\ j \bullet \\ \color{green}{/} \\ l \bullet \end{array} & \longrightarrow & \sum_{L=1}^d \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L. \\
 \\
 \begin{array}{c} l \bullet \\ \color{blue}{/} \\ \color{blue}{\backslash} \\ k \bullet \\ \color{red}{/} \\ j \bullet \end{array} & \longrightarrow & \sum_{L=1}^d \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L.
 \end{array}$$

Precisamente de estas identificaciones, que son también ciertas para $(\mathbf{y}^J)^{(1)}$, $(\mathbf{y}^J)^{(2)}$ y $(\mathbf{y}^J)^{(4)}$ como se puede apreciar en la Tabla 2.1, surge la definición formal de *diferencial elemental*:

Definición 2.2. Dado un árbol ordenado monótonamente τ de orden n cuyos índices vienen dados por $A_n = \{j_1 < j_2 < \dots < j_n\}$, se define el *diferencial elemental de orden n de la componente J_1 -ésima de \mathbf{f} asociado a τ en el punto \mathbf{y}_0* como

$$\mathbf{F}^{J_1}(\tau)(\mathbf{y}_0) = \sum_{J_2, \dots, J_n=1}^d \prod_{i=1}^n \mathbf{f}_{\tau^{-1}(J_i)}^{J_i}(\mathbf{y}_0). \tag{2.7}$$

Se dice sencillamente *diferencial elemental de orden n de \mathbf{f}* al vector

$$\mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) = \left(\mathbf{F}^1(\tau)(\mathbf{y}_0), \dots, \mathbf{F}^d(\tau)(\mathbf{y}_0) \right)^T. \tag{2.8}$$

Por convenio, se consideran

$$\mathbf{F}^J(\emptyset)(\mathbf{y}_0) = \mathbf{y}_0 \quad \text{y} \quad \mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}_0) = \mathbf{f}^J.$$

Orden	Derivada	Árboles Ordenados Monótonamente
1	$(\mathbf{y}^J)' = \mathbf{f}^J$	\bullet_j
2	$(\mathbf{y}^J)'' = \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}^K$	$\begin{array}{c} \bullet_k \\ \\ \bullet_j \end{array}$
3	$(\mathbf{y}^J)''' = \sum_{K,L=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L + \sum_{K,L=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L$	$\begin{array}{c} \bullet_k \quad \bullet_l \\ \diagdown \quad / \\ \bullet_j \end{array}$ $\begin{array}{c} \bullet_l \\ \\ \bullet_k \\ \\ \bullet_j \end{array}$
4	$(\mathbf{y}^J)^{(4)} = \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KLM}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}_M^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KM}^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M + \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_{LM}^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M$	$\begin{array}{c} \bullet_k \quad \bullet_l \quad \bullet_m \\ \diagdown \quad \quad / \\ \bullet_j \end{array}$ $\begin{array}{c} \bullet_m \\ \\ \bullet_k \quad \bullet_l \\ \diagdown \quad / \\ \bullet_j \end{array}$ $\begin{array}{c} \bullet_m \\ \\ \bullet_k \quad \bullet_l \\ \diagdown \quad / \\ \bullet_j \end{array}$ $\begin{array}{c} \bullet_l \\ \\ \bullet_k \quad \bullet_m \\ \diagdown \quad / \\ \bullet_j \end{array}$ $\begin{array}{c} \bullet_m \\ \\ \bullet_l \\ \\ \bullet_k \\ \\ \bullet_j \end{array}$ $\begin{array}{c} \bullet_m \quad \bullet_l \\ \diagdown \quad / \\ \bullet_k \\ \\ \bullet_j \end{array}$

Tabla 2.1: Correspondencia entre los árboles ordenados monótonamente y las derivadas de ordenes 1 a 4 de \mathbf{y}^J .

El diferencial elemental $\mathbf{F}^{J_1}(\tau)(\mathbf{y}_0)$ se trata de la suma sobre los $n-1$ índices no-raíz J_2, J_3, \dots, J_n de τ del producto de las n derivadas parciales de las coordenadas de \mathbf{f} asociadas a los índices J_i con respecto de las variables dadas por sus hijos correspondientes, $\tau^{-1}(J_i)$.

Ejemplo 2.1 Para ilustrar el concepto de diferencial elemental, podemos considerar el árbol ordenado monótonamente de dos nodos

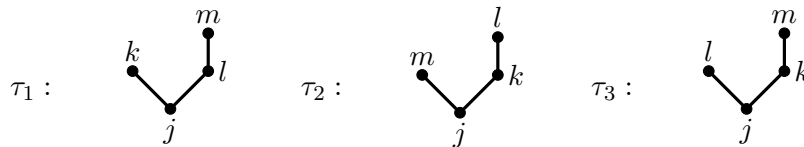


La diferencial elemental de \mathbf{f}^J asociada a τ resulta

$$\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}) = \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}^K,$$

que no es más que la expresión de la segunda derivada de \mathbf{y}^J .

Por otra parte, los tres árboles



parecen tener una estructura topológica similar. Además, los diferenciales elementales a los que se asocian, respectivamente

$$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M, \quad \sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KM}^J \mathbf{f}^M \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L, \quad \sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^L \mathbf{f}_M^K \mathbf{f}^M,$$

coinciden, ya que en realidad los índices K, M y L varían entre los mismos valores, que son las coordenadas 1 a d de \mathbf{y} .

Por tanto, aunque τ_1, τ_2 y τ_3 sean diferentes vistos como árboles ordenados monótonamente, en realidad están representando a un mismo diferencial elemental [5].

Resulta natural (teniendo en mente que nuestro objetivo es el de reflejar el comportamiento de la derivación y de la Regla de la Cadena a través de los árboles) ver que τ_1, τ_2 y τ_3 comparten una misma estructura si se eliminan sus índices.

Definición 2.3. Dos árboles ordenados monótonamente $\tau, \hat{\tau} \in LT_n$ se dicen *árboles equivalentes*,

y se denota por $\tau \sim \hat{\tau}$, si existe una permutación

$$\sigma : A_n \longrightarrow A_n$$

entre sus índices tal que $\sigma(j) = j$, donde j es el nodo raíz de los árboles, y además $\sigma \circ \tau = \hat{\tau} \circ \sigma$ en $A_n \setminus \{j\}$.

Esta condición quiere decir que σ define una permutación entre los índices A_n de tal manera que al aplicarla sobre τ resulta $\hat{\tau}$ y viceversa. Es decir, que los árboles no etiquetados asociados a ambos coinciden.

Se puede probar que \sim define una relación de equivalencia en LT_n [5].

Haciendo referencia al ejemplo anterior, se tiene $\tau_1 \sim \tau_2 \sim \tau_3$.

Denotaremos por T_n al espacio cociente definido por la relación \sim , es decir

$$T_n = LT_n / \sim$$

y a la clase de equivalencia $[\tau]_{\sim} \in T_n$ se le llama *árbol de orden n* y se denotará sencillamente por τ .

Su orden se seguirá denotando como $\varrho(\tau)$ y, además, denotaremos por $\alpha(\tau)$ al número de elementos de la clase de equivalencia τ . Precisamente, $\alpha(\tau)$ no es más que el número de posibles árboles ordenados monótonamente que se pueden obtener a partir de τ . Existen varias fórmulas para el cálculo de $\alpha(\tau)$, pero excede de los objetivos de este trabajo (ver [7]).

De nuevo, resulta adecuado considerar \emptyset , el árbol vacío, como el único árbol de orden 0 y $\tau_0 : \bullet$ al único árbol de primer orden.

Observación 2.1. A partir del ejemplo y definición anteriores, si se tienen dos árboles equivalentes τ_1 y τ_2 , entonces $F(\tau_1)(\mathbf{y}) = F(\tau_2)(\mathbf{y})$.

Volviendo al Ejemplo 2.1, la clase de equivalencia de los árboles τ_1, τ_2 y τ_3 viene dada por el árbol sin etiquetar de orden 4



Observación 2.2. Una vez introducido el concepto de árbol de orden n como una clase de equivalencia y teniendo en cuenta la Observación 2.1, se tiene

$$\sum_{\hat{\tau} \in \tau} \mathbf{F}(\hat{\tau})(\mathbf{y}) = \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}), \quad (2.9)$$

donde $\mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y})$, en un abuso de notación, representa al diferencial elemental asociado a cualquier árbol ordenado monótonamente de la clase de equivalencia τ .

A partir de ahora, para simplificar la notación, se denotará indistintamente un árbol ordenado monótonamente que uno sin índices, aunque representen objetos matemáticos diferentes. Las diferencias en el trato y significado de tales objetos se interpretarán a partir del contexto de la expresión en cuestión.

Por lo anterior, podemos enunciar el siguiente resultado para la derivada n -ésima de la solución exacta de la ecuación diferencial del problema:

Teorema 2.1. *Sea \mathbf{y} una solución de la ecuación diferencial de (2.2). Entonces, bajo condiciones suficientes de regularidad, para cualquier $n \in \mathbb{N}$, se cumple*

$$(\mathbf{y})^{(n)}(t_0) = \sum_{\tau \in LT_n} \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) = \sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0). \quad (2.10)$$

Demostración. Apliquemos inducción sobre el orden n de derivación de la componente J -ésima \mathbf{y}^J de una solución de la ecuación diferencial con $J = 1, \dots, d$ genérico.

Para $n = 1$, el único árbol monótonamente ordenado de orden 1 y su respectivo diferencial elemental es

$$\tau_0 : \begin{array}{c} \dot{j} \\ \bullet \end{array} \quad \mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}_0) = \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0)$$

Luego se cumple, dado que \mathbf{y} es solución de (2.2),

$$\sum_{\tau \in LT_1} \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0) = \mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}_0) = \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0) = (\mathbf{y}^J)'(t_0).$$

Para $n = 2$, el único árbol de orden 2 y su respectivo diferencial elemental es

$$\tau_1 : \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \dot{k} \\ \vdots \\ \dot{j} \\ \bullet \end{array} \quad \mathbf{F}^J(\tau_1)(\mathbf{y}_0) = \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J(\mathbf{y}_0) \mathbf{f}^K(\mathbf{y}_0)$$

Por tanto, por la Regla de la Cadena, tenemos

$$\sum_{\tau \in LT_2} \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0) = \mathbf{F}^J(\tau_1)(\mathbf{y}_0) = \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J(\mathbf{y}_0) \mathbf{f}^K(\mathbf{y}_0) = (\mathbf{y}^J)''(t_0).$$

Supongamos cierta la hipótesis de inducción hasta el orden $n - 1$ de derivación y veamos que esta propiedad se mantiene para n :

Partiendo de

$$(\mathbf{y}^J)^{(n)}(t_0) = \frac{d}{dt} (\mathbf{y}^J)^{(n-1)}(t_0) = \frac{d}{dt} \left(\sum_{\tau \in LT_{n-1}} \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) = \sum_{\tau \in LT_{n-1}} \frac{d}{dt} (\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0)),$$

donde se ha aplicado la hipótesis de inducción, el hecho de derivar $(\mathbf{y}^J)^{(n-1)}(t_0)$ se traduce en derivar los términos $\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0)$ para cada $\tau \in LT_{n-1}$. Si se recuerda ahora la expresión (2.7), por la Regla de la Cadena esto se corresponde geoméricamente con la adición de una nueva rama con una hoja al árbol τ en alguno de sus nodos a la hora de representar el sumando indicado. Esto da lugar a varios árboles de orden n a partir de τ , cada uno representando un único término de la derivada del diferencial elemental. Esta idea queda ilustrada en la Tabla 2.2.

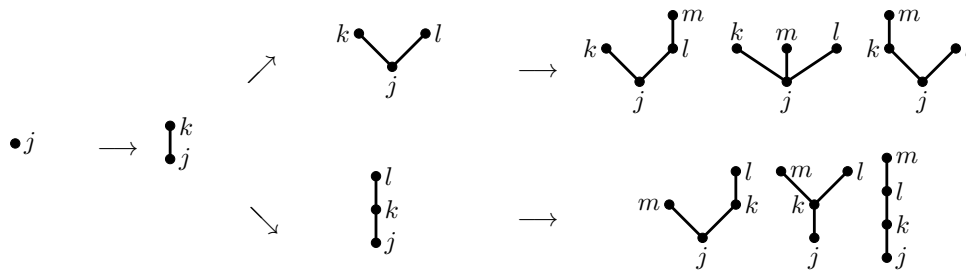


Tabla 2.2: Visualización de la derivación en los árboles.

En concreto, para el árbol τ con $\varrho(\tau) = n-1$, se obtienen $n-1$ nuevos árboles de orden n siguiendo el proceso descrito. Así, notando cómo se han definido los árboles ordenados monótonamente, mediante este proceso se obtienen todos los árboles de orden n posibles y cada uno de ellos aparece una única vez. Por ende, el sumatorio de los diferenciales elementales de estos nuevos árboles se está realizando sobre la totalidad de LT_n . Con lo cual se llega a la expresión

$$(\mathbf{y}^J)^{(n)}(t_0) = \sum_{\hat{\tau} \in LT_n} \mathbf{F}^J(\hat{\tau})(\mathbf{y}_0).$$

Queda así completado el proceso inductivo.

Finalmente, la segunda igualdad del enunciado se deduce de la expresión (2.9). \square

Como consecuencia inmediata de este teorema, se pueden expresar los términos del desarrollo en serie de Taylor de \mathbf{y} en función de los correspondientes diferenciales elementales.

Corolario 2.2. *La serie de Taylor asociada a cualquier solución \mathbf{y} de la ecuación diferencial en (2.2) se puede expresar, utilizando (2.10), como*

$$\mathbf{y}(t_0 + h) = \mathbf{y}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in LT_n} \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!} = \mathbf{y}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!}. \quad (2.11)$$

2.2. Desarrollo en serie de la solución numérica

Recordemos que el objetivo que perseguimos es desarrollar el error local

$$\varepsilon(t_0, h; \mathbf{y}) = \mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}(t_0) - h \phi(t_0, \mathbf{y}(t_0), h)$$

en potencias del paso h . En la sección anterior hemos analizado el desarrollo de la solución exacta $\mathbf{y}(t_0 + h)$; nos ocuparemos ahora del desarrollo de la solución aproximada

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{f}(\mathbf{g}_i).$$

Observación 2.3. Notemos que, dado que los términos \mathbf{g}_i e \mathbf{y}_1 en (2.4) se tratan como funciones del paso h de integración, para simplificar la notación indicaremos las evaluaciones de estos valores y sus sucesivas derivadas en el valor 0 como $(\mathbf{g}_i)^{(n)} \Big|_{h=0}$.

Un resultado que nos será de mucha utilidad teniendo en cuenta la definición de \mathbf{g}_i es la llamada *Regla General de Leibniz*, que se trata de una generalización de la regla de derivación del producto.

Lema 2.3. (*Regla de Leibniz*) Dadas dos funciones \mathbf{u} y \mathbf{v} n veces derivables, entonces el producto $\mathbf{u}\mathbf{v}$ también es derivable n veces y se cumple

$$(\mathbf{u}\mathbf{v})^{(n)} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mathbf{u}^{(n-k)} \mathbf{v}^{(k)},$$

donde, por convenio, se denota $\mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{w}$.

Particularizando esta fórmula para $\mathbf{v}(h) = h$, se tiene que

$$(h\mathbf{u}(h))^{(n)} \Big|_{h=0} = n (\mathbf{u}(h))^{(n-1)} \Big|_{h=0} \quad (2.12)$$

Demostración. Ver [11]. □

De igual manera que se hacía con la solución exacta, podemos obtener manualmente las primeras derivadas de \mathbf{g}_i^J :

Para $n = 0$, por la definición de \mathbf{g}_i , se tiene

$$(\mathbf{g}_i^J)^{(0)} \Big|_{h=0} = \mathbf{g}_i^J \Big|_{h=0} = \mathbf{y}_0^J. \quad (2.13)$$

Para $n = 1$, considerando (2.12) y el resultado anterior, tenemos

$$\begin{aligned}
(\mathbf{g}_i^J)^{(1)} \Big|_{h=0} &= \left(h \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j^1, \dots, \mathbf{g}_j^d) \right) \Big|_{h=0}^{(1)} \\
&= \left(\sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j^1, \dots, \mathbf{g}_j^d) \right) \Big|_{h=0}^{(0)} \\
&= \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0).
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Para $n = 2$, dado que la idea de nuevo es aplicar (2.12), primero resulta necesario calcular

$$(\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j))^{\text{(1)}} = \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{\text{(1)}}. \tag{2.15}$$

Por tanto, utilizando la expresión de $(\mathbf{g}_j^K)^{\text{(2)}}$ resulta

$$\begin{aligned}
(\mathbf{g}_i^J)^{\text{(2)}} \Big|_{h=0} &= \left(h \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j^1, \dots, \mathbf{g}_j^d) \right) \Big|_{h=0}^{\text{(2)}} \\
&= 2 \left(\sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j^1, \dots, \mathbf{g}_j^d) \right) \Big|_{h=0}^{\text{(1)}} \\
&= 2 \sum_{j=1}^q a_{i,j} \left(\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j^1, \dots, \mathbf{g}_j^d) \right)^{\text{(1)}} \Big|_{h=0} \\
&= 2 \sum_{j,k=1}^q a_{i,j} a_{j,k} \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}^K(\mathbf{y}_0).
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Notemos que si derivamos de nuevo (2.15), obtenemos

$$(\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j))^{\text{(2)}} = \sum_{K,L=1}^d \mathbf{f}_{KL}^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{\text{(1)}} \cdot (\mathbf{g}_j^L)^{\text{(1)}} + \sum_{K=1}^d \mathbf{f}_K^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{\text{(2)}}. \tag{2.17}$$

Como también sucedía en la sección anterior, el uso reiterado de la derivación pronto se complica enormemente.

De igual manera que habíamos considerado una familia de árboles ordenados monótonamente de un orden n para representar los sumandos de $(\mathbf{y}^J)^{\text{(n)}}$, en este caso podemos también relacionar el comportamiento de la Regla de la Cadena en la derivación sistemática de $\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j)$ con una familia

concreta de árboles.

En esta situación, sin embargo, no es necesario trabajar con la familia LT_n . Al derivar \mathbf{g}_j^K no se están considerando sus derivadas parciales, sino su derivada total, ya que se trata de una función real de variable real.

Con esta idea en mente, la familia de árboles buscada debe de seguir las siguientes reglas [5]: cada vez que se deriva, por la Regla de la Cadena debemos

- derivar el primer factor $\mathbf{f}_{KL\dots}^J$; lo que supone añadir una nueva rama a la raíz j ,
- aumentar el orden de derivación de cada término dependiente de \mathbf{g} ; lo que supone alargar la rama correspondiente. La longitud total de la rama indica el orden de derivación de la componente \mathbf{g}^K .

Veamos cómo se ilustra esta idea al calcular $(\mathbf{f}^J(\mathbf{g}))^{(3)}$. Aplicando de nuevo la Regla de la Cadena a (2.17) obtenemos

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j))^{(3)} &= \sum_{K,L,M=1}^q \mathbf{f}_{KLM}^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{(1)} \cdot (\mathbf{g}_j^L)^{(1)} \cdot (\mathbf{g}_j^M)^{(1)} \\
 &+ \sum_{K,L=1}^q \mathbf{f}_{KL}^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{(2)} \cdot (\mathbf{g}_j^L)^{(1)} + \sum_{K,L=1}^q \mathbf{f}_{KL}^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{(1)} \cdot (\mathbf{g}_j^L)^{(2)} \\
 &+ \sum_{K,M=1}^q \mathbf{f}_{KM}^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{(2)} \cdot (\mathbf{g}_j^M)^{(1)} + \sum_{K,M=1}^q \mathbf{f}_K^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^K)^{(3)}.
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

Si tenemos en cuenta las reglas anteriores, la construcción de la familia árboles de orden 3 se recoge en la Tabla 2.3.

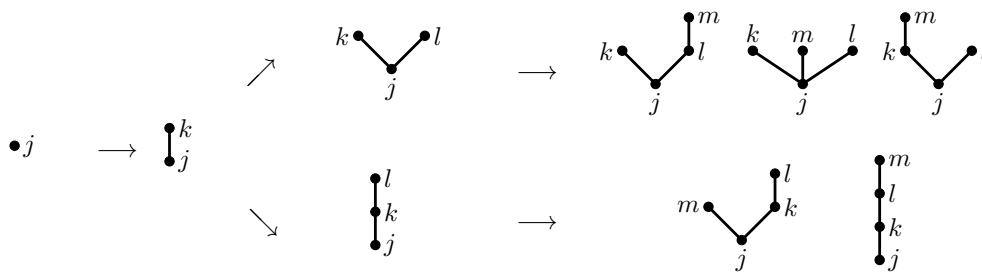



Tabla 2.3: Construcción de los sucesivos árboles especiales.

En cada etapa, se añade una nueva rama a la raíz o se prolonga una rama ya existente. Las únicas ramificaciones se encontrarían en la raíz. Esa es la razón de que falte el árbol , dado que su ramificación no está en la raíz. Así, podemos identificar cada uno de los cinco árboles que hemos deducido con un único sumando de (2.18). Por ejemplo,

$$\begin{array}{ccc}
\begin{array}{c} k \quad l \quad m \\ \diagdown \quad | \quad / \\ j \end{array} & \longrightarrow & \sum_{K,L,M=1}^d \mathbf{f}_{KLM}^J(\mathbf{g})(\mathbf{g}^K)^{(1)}(\mathbf{g}^L)^{(1)}(\mathbf{g}^M)^{(1)}. \\
\\
\begin{array}{c} l \\ | \\ k \quad m \\ \diagdown \quad / \\ j \end{array} & \longrightarrow & \sum_{K,M=1}^d \mathbf{f}_{KM}^J(\mathbf{g})(\mathbf{g}^K)^{(2)}(\mathbf{g}^M)^{(1)}.
\end{array}$$

Notemos que al interpretar una ramificación concreta de un árbol, solo nos resulta relevante su longitud (que indica el orden de derivación) y el primer índice que no sea la raíz (que indica qué componente \mathbf{g}^K es la que se deriva). El resto de índices de la rama resultarán irrelevantes.

Definición 2.4. Un árbol ordenado monótonamente se dice *especial* si no tiene ramificaciones excepto en la raíz. El conjunto de *árboles especiales ordenados monótonamente de orden n* se denota por LS_n .

Resulta evidente que $LS_n \subseteq LT_n$. Además, en vista de esta definición, para expresar los sumandos de $(\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j))^{(3)}$ hemos hecho uso de LS_3 . Esta idea, que ya se ha visto en la sección anterior para expresar el desarrollo en serie de \mathbf{y} , se adaptará para \mathbf{y}_1 .

Antes de abordar el problema de relacionar $(\mathbf{y}_1)^{(n)}$ con LT_n debemos introducir un resultado auxiliar, conocido como *Fórmula de Faà di Bruno*, que no es más que la generalización de la Regla de la Cadena para mayores órdenes de derivación.

Lema 2.4 (Fórmula de Faà di Bruno). *Para $n \in \mathbb{N}$ y las funciones \mathbf{u}, \mathbf{v} , se tiene que*

$$(\mathbf{u}^J(\mathbf{v}))^{(n-1)} = \sum_{u \in LS_n} \sum_{K_1, \dots, K_m=1}^d \mathbf{u}_{K_1 \dots K_m}^J(\mathbf{v}) \cdot (\mathbf{v}^{K_1})^{(\delta_1)} \dots \cdot (\mathbf{v}^{K_m})^{(\delta_m)}, \quad (2.19)$$

donde para cada árbol especial $u \in LS_n$, m es el número de ramas partiendo de la raíz y δ_i el número de nodos que tiene la rama i -ésima excluyendo la raíz. De tal manera, se cumple $n = 1 + \delta_1 + \dots + \delta_m$.

Demostración. Ver [5]. □

Los árboles ordenados monótonamente, de manera alternativa a como los hemos introducido en la sección anterior, también admiten una definición recursiva.

Si a un árbol $\tau \in LT_n$ se le elimina su raíz, entonces da lugar a varios árboles $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k$ no conectados llamados *árboles hijos de τ* . Recíprocamente, dados $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m$ no vacíos, se

puede construir un árbol τ de orden $\varrho(\tau) = 1 + \varrho(\tau_1) + \dots + \varrho(\tau_m)$ uniendo las respectivas raíces de τ_i con un nuevo nodo raíz. Además, esta representación es única salvo permutaciones de $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m$ [2]. En tal caso, se denota

$$\tau = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m]$$

y su construcción puede observarse en la Figura 2.1.

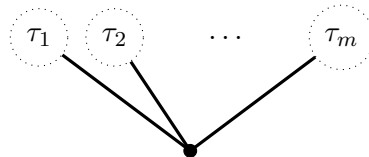
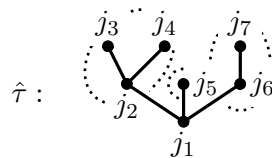


Figura 2.1: Árbol por recurrencia.

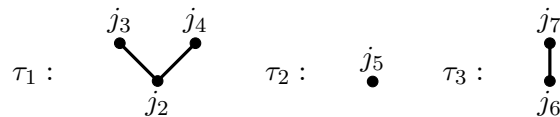
Como este proceso puede seguir haciéndose para los árboles hijos $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m$ hasta llegar a τ_0 , entonces todo árbol τ no vacío se puede expresar en términos de τ_0 .

También, resulta notable que esta definición de árboles ordenados se puede trasladar de igual manera a T_n , ya que la clase de equivalencia asociada a un árbol $\tau = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m] \in LT_n$ depende exclusivamente de las clases de equivalencia de los árboles hijos $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m$ [5].

Ejemplo 2.2 Si consideramos $\hat{\tau}$ el árbol ordenado monótonamente de orden 7



y eliminamos el nodo raíz, quedan tres árboles no conectados:



Con lo cual se tiene, aplicando este proceso inductivamente,

$$\hat{\tau} = [\tau_1, \tau_2, \tau_3] = [[\tau_0, \tau_0], \tau_0, [\tau_0]].$$

Definición 2.5. Dado $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_m] \in LT_n$ expresado según la definición recursiva de árbol, definimos la *densidad* o *producto de inundación* de τ , $\gamma(\tau)$, de manera recursiva como

$$\gamma(\tau_0) = 1, \quad \gamma(\tau) = \varrho(\tau) \prod_{i=1, \dots, m} \gamma(\tau_i). \quad (2.20)$$

En el Ejemplo 2.2, el producto de densidad del árbol estudiado resulta:

$$\gamma(\hat{\tau}) = \quad 7 \quad \quad \cdot 3 \cdot 1 \cdot 2 \quad \quad \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 = 42.$$

Definición 2.6. Dado $\tau \in LT_n$ de índices $A_n = \{j_1 < j_2 < \dots < j_n\}$, con j_1 la raíz del árbol, denotaremos

$$\Phi_{j_1}(\tau) = \sum_{j_2, \dots, j_n=1}^q a_{\tau(j_2), j_2} \dots a_{\tau(j_n), j_n}, \quad (2.21)$$

donde $a_{i,j}$ es el elemento en la fila i y columna j de la matriz A que define el RK (2.4).

Además, por convenio se considera $\Phi_{j_1}(\tau_0) = 1$.

La forma de trabajar con los árboles a partir de sus árboles hijos permite el cálculo recursivo de los diferenciales elementales y las expresiones $\Phi_j(\tau)$.

Proposición 2.5. Si $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_m] \in LT_n$ y k_i denota el índice raíz del árbol hijo τ_i , entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}) &= \sum_{K_1, \dots, K_m=1}^d \mathbf{f}_{K_1, \dots, K_m}^J(\mathbf{y}) \mathbf{F}^{K_1}(\tau_1)(\mathbf{y}) \dots \mathbf{F}^{K_m}(\tau_m)(\mathbf{y}) \\ &= \sum_{K_1, \dots, K_m=1}^d \mathbf{f}_{K_1, \dots, K_m}^J(\mathbf{y}) \prod_{i=1}^m \mathbf{F}^{K_i}(\tau_i)(\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Además,

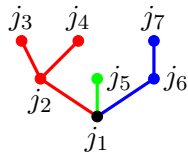
$$\Phi_j(\tau) = \sum_{k_1, \dots, k_m=1}^q a_{j, k_1} \dots a_{j, k_m} \Phi_{k_1}(\tau_1) \dots \Phi_{k_m}(\tau_m) = \sum_{k_1, \dots, k_m=1}^q \prod_{i=1}^m a_{j, k_i} \Phi_{k_i}(\tau_i). \quad (2.23)$$

Demostración. Los resultados se obtienen agrupando por subárboles en las fórmulas (2.7) y (2.21) respectivamente. \square

De igual manera que sucedía con los diferenciales elementales, las definiciones de la densidad

$\gamma(\tau)$ y de la expresión $\Phi_j(\tau)$ son independientes de los índices del árbol τ concretos, luego están igualmente definidos tanto en LT_n como en T_n .

Ejemplo 2.3 En el Ejemplo 2.2 hemos considerado el árbol $\hat{\tau}$ de orden 7



Podemos calcular $\Phi_{j_1}(\hat{\tau})$ de dos formas. Por un lado, aplicando directamente (2.21) obtenemos

$$\Phi_{j_1}(\hat{\tau}) = \sum_{j_2, \dots, j_7} a_{j_1, j_2} a_{j_2, j_3} a_{j_2, j_4} a_{j_1, j_5} a_{j_1, j_6} a_{j_6, j_7}.$$

Por otro lado, $\hat{\tau} = [\tau_1, \tau_2, \tau_3]$ y para los árboles hijos τ_1, τ_2, τ_3 se tiene

$$\Phi_{j_2}(\tau_1) = \sum_{j_3, j_4} a_{j_2, j_3} a_{j_2, j_4}, \quad \Phi_{j_5}(\tau_2) = 1, \quad \Phi_{j_6}(\tau_3) = \sum_{j_7} a_{j_6, j_7}.$$

Entonces, agrupando estos términos en $\Phi_{j_1}(\tau)$, se obtiene

$$\Phi_{j_1}(\hat{\tau}) = \sum_{j_2, j_5, j_6} a_{j_1, j_2} \Phi_{j_2}(\tau_1) a_{j_1, j_5} \Phi_{j_5}(\tau_2) a_{j_1, j_6} \Phi_{j_6}(\tau_3),$$

que no es más que la expresión alternativa (2.23).

Estamos en posición de abordar el resultado principal de esta sección, que establece una relación entre las derivadas n -ésimas de los términos \mathbf{g}_i del método RK y las de la solución numérica \mathbf{y}_1 con los diferenciales elementales asociados a LT_n .

Teorema 2.6. Para cualquier $n \in \mathbb{N}$ la derivada n -ésima de \mathbf{g}_i satisface

$$\mathbf{g}_i^{(n)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in LT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q a_{i,j} \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \quad (2.24)$$

y la solución numérica cumple

$$\mathbf{y}_1^{(n)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in LT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) = \sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0). \quad (2.25)$$

Demostración. Debido a la similitud entre las fórmulas de \mathbf{g}_i e \mathbf{y}_1 en (2.4), desarrollaremos la demostración exclusivamente para \mathbf{g}_i . Para \mathbf{y}_1 será análoga.

Aplicamos inducción sobre el orden n de derivación de la componente J -ésima \mathbf{g}_i^J para algún $i = 1, \dots, q$ fijado y $J = 1, \dots, d$ genérico.

Para $n = 1$ y 2 , basta observar los desarrollos (2.14) y (2.16) junto con la definición (2.21) de Φ . Teniendo en cuenta que los únicos árboles de órdenes 1 y 2 son respectivamente τ_0 y $[\tau_0]$, se verifican las fórmulas buscadas.

Supongamos que (2.24) sea cierta hasta el orden $n - 1$ y veamos que se cumple para orden n .

Por la Fórmula de Leibniz (2.12),

$$(\mathbf{g}_i^J)^{(n)} \Big|_{h=0} = n \sum_{j=1}^q a_{i,j} (\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j))^{(n-1)} \Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_0}.$$

A continuación, aplicando la Fórmula de Faà Di Bruno (2.19) obtenemos

$$(\mathbf{g}_i^J)^{(n)} \Big|_{h=0} = n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \left(\sum_{u \in LS_n} \sum_{K_1, \dots, K_w=1}^d \mathbf{f}_{K_1 \dots K_m}^J(\mathbf{g}_j) \cdot (\mathbf{g}_j^{K_1})^{(\delta_1)} \dots (\mathbf{g}_j^{K_m})^{(\delta_m)} \right) \Big|_{h=0}.$$

Dado que de la fórmula se tiene que $n - 1 = \delta_1 + \dots + \delta_m$, entonces $\delta_i \leq n - 1$ para $i = 1, \dots, m$ y podemos aplicar la hipótesis de inducción a cada uno de los términos:

$$\left(\mathbf{g}_j^{K_i} \right)^{(\delta_i)} \Big|_{h=0} = \sum_{t_i \in LT_{\delta_i}} \gamma(t_i) \sum_{k_i=1}^q a_{j,k_i} \Phi_{k_i}(t_i) \mathbf{F}^{K_i}(t_i)(\mathbf{y}_0), \quad i = 1, \dots, m.$$

Introduciendo cada una de estas derivadas en la expresión anterior de $(\mathbf{g}_i^J)^{(n)}$ y notando que $\mathbf{g}_i|_{h=0} = \mathbf{y}_0$, se llega a

$$(\mathbf{g}_i^J)^{(n)} \Big|_{h=0} = n \sum_{j=1}^q a_{i,j} \sum_{u \in LS_n} \sum_{K_1, \dots, K_m=1}^d \mathbf{f}_{K_1 \dots K_m}^J(\mathbf{y}_0) \prod_{i=1}^m \left(\sum_{t_i \in LT_{\delta_i}} \gamma(t_i) \sum_{k_i=1}^q a_{j,k_i} \Phi_{k_i}(t_i) \mathbf{F}^{K_i}(t_i)(\mathbf{y}_0) \right).$$

Ahora bien, teniendo en cuenta que los sumatorios están definidos sobre un número finito de índices, es posible permutarlos de manera adecuada. De tal forma, resulta

$$\begin{aligned} (\mathbf{g}_i^J)^{(n)} \Big|_{h=0} &= \sum_{u \in LS_n} \sum_{t_1 \in LT_{\delta_1}} \dots \sum_{t_m \in LT_{\delta_m}} \left(n \gamma(t_1) \dots \gamma(t_m) \right) \\ &\cdot \sum_{j=1}^q a_{i,j} \left(\sum_{k_1, \dots, k_m=1}^q a_{j,k_1} \Phi_{k_1}(t_1) \dots a_{j,k_m} \Phi_{k_m}(t_m) \right) \\ &\cdot \left(\sum_{K_1, \dots, K_m=1}^d \mathbf{f}_{K_1 \dots K_m}^J(\mathbf{y}_0) \mathbf{F}^{K_1}(t_1)(\mathbf{y}_0) \dots \mathbf{F}^{K_m}(t_m)(\mathbf{y}_0) \right). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Llegados a este punto, solo resta relacionar esta expresión con la fórmula buscada. Para ello,

resulta necesario justificar que, para cada tupla

$$(u, t_1, \dots, t_m), u \in LS_n, t_1 \in LT_{\delta_1}, \dots, t_m \in LT_{\delta_m}$$

exista un árbol $\tau \in LT_n$ tal que satisfaga

$$\begin{aligned} \gamma(\tau) &= n\gamma(t_1) \dots \gamma(t_m), \\ \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0) &= \sum_{K_1, \dots, K_m=1}^d \mathbf{f}_{K_1 \dots K_m}^J(\mathbf{y}_0) \mathbf{F}^{K_1}(t_1)(\mathbf{y}_0) \dots \mathbf{F}^{K_m}(t_m)(\mathbf{y}_0), \\ \Phi_j(\tau) &= \sum_{k_1, \dots, k_m=1}^q a_{j, k_1} \Phi_{k_1}(t_1) \dots a_{j, k_m} \Phi_{k_m}(t_m). \end{aligned} \tag{2.27}$$

El árbol τ buscado se puede obtener si las ramas del árbol especial u se reemplazan por los árboles t_1, \dots, t_m respectivamente (recordemos que m es el número de ramas de u y δ_i la longitud de la rama i -ésima). Los índices de este nuevo árbol se obtienen manteniendo el orden de las etiquetas en cada t_i .

Siguiendo la construcción por recurrencia de los árboles y los resultados (2.22) y (2.23), el árbol buscado no es más que

$$\tau = [t_1, t_2, \dots, t_m].$$

De esta manera, cada $\tau \in LT_n$ se puede construir mediante el proceso descrito y solo de una manera, luego aparece una única vez. Por tanto, esta construcción da lugar a una biyección

$$(u, t_1, \dots, t_m) \longleftrightarrow \tau = [t_1, \dots, t_m],$$

que se puede observar en la Tabla 2.4.

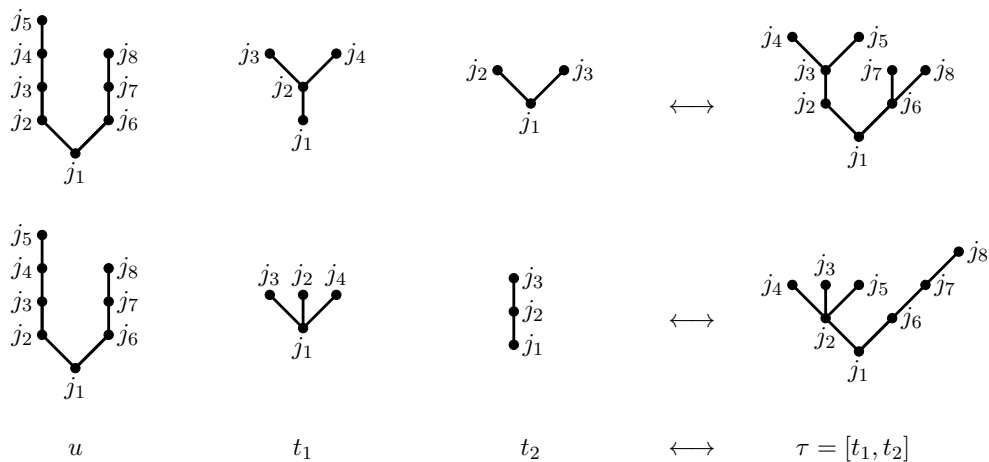


Tabla 2.4: Biyección $(u, t_1, \dots, t_m) \leftrightarrow \tau = [t_1, \dots, t_m]$.

Recordando (2.26) y (2.27), obtenemos la expresión buscada

$$(\mathbf{g}_i^J)^{(n)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in LT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q a_{i,j} \Phi_j(\tau) \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0),$$

con lo cual se ha completado el proceso de inducción.

Finalmente, para $\mathbf{y}_1^{(n)}$ el proceso es idéntico, pero sustituyendo a_{ij} por b_j . Para la segunda igualdad basta notar la expresión (2.9). \square

Estamos ahora en condiciones de desarrollar \mathbf{y}_1 es serie de potencias:

Corolario 2.7. *La serie de Taylor asociada a la solución numérica \mathbf{y}_1 proporcionada por el método RK (2.4) para el problema (2.2) se puede expresar, utilizando (2.25), como*

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1|_{h=0} &= \mathbf{y}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in LT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &= \mathbf{y}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.3. Condiciones de orden de un método RK

Una vez introducidos los teoremas (2.11) y (2.28), podemos establecer una caracterización del orden de consistencia p de un RK genérico en función de sus coeficientes.

Si \mathbf{f} es suficientemente regular, el error local asociado al método (2.3) en un instante t_0 con paso h verifica:

$$\begin{aligned} \varepsilon(t_0, h; \mathbf{y}) &= \mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_1 \\ &= \sum_{n=1}^p \left(\sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &\quad - \sum_{n=1}^p \left(\sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!} + \mathcal{O}(h^{p+1}) \\ &= \sum_{n=1}^p \left(\sum_{\tau \in T_n} \alpha(\tau) \left(1 - \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) \right) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0) \right) \frac{h^n}{n!} + \mathcal{O}(h^{p+1}). \end{aligned}$$

Identificando ahora los términos de las sucesivas potencias de h , obtenemos el teorema deseado.

Teorema 2.8 (Caracterización del orden de un RK). *El método RK (2.3) tiene orden p para*

cualquier problema del tipo (2.2) si y sólo si para cada $\tau \in T_n$ con $n \leq p$ se verifica

$$\sum_{j=1}^q b_j \Phi_j(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}. \quad (2.29)$$

Demostración. La condición es suficiente como consecuencia del desarrollo anterior. Además, es necesaria debido al hecho de que los diferenciales elementales asociados a árboles diferentes son *independientes*; es decir, no pueden coincidir para distintos árboles (ver [5]). \square









$\varrho(\tau)$	Árbol τ	$\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y})$	$\gamma(\tau)$	$\Phi_j(\tau)$
1	τ_0 	\mathbf{f}^J	1	1
2	$[\tau_0]$ 	$\sum_K \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}^K$	2	$\sum_k a_{j,k} = c_j$
3	$[\tau_0, \tau_0]$ 	$\sum_{K,L} \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L$	3	$\sum_{k,l} a_{j,k} a_{j,l} = c_j^2$
	$[[\tau_0]]$ 	$\sum_{K,L} \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}^L$	6	$\sum_{k,l} a_{j,k} a_{k,l} = \sum_k a_{j,k} c_k$
4	$[\tau_0, \tau_0, \tau_0]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KLM}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M$	4	$\sum_{k,l,m} a_{j,k} a_{j,l} a_{j,m} = c_j^3$
	$[[\tau_0, \tau_0]]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_{LM}^K \mathbf{f}^L \mathbf{f}^M$	12	$\sum_{k,l,m} a_{j,k} a_{k,l} a_{k,m} = \sum_k a_{j,k} c_k^2$
	$[\tau_0, [\tau_0]]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{f}^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M$	8	$\sum_{k,l,m} a_{j,k} a_{j,l} a_{l,m} = \sum_{k,l} c_k a_{j,l} c_l$
	$[[[\tau_0]]]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K \mathbf{f}_M^L \mathbf{f}^M$	24	$\sum_{k,l,m} a_{j,k} a_{k,l} a_{l,m} = \sum_{k,l} a_{j,k} a_{k,l} c_l$

Tabla 2.5: Árboles y parámetros involucrados en las condiciones de orden hasta orden 4. Se ha utilizado la condición (1.13).

Si ahora nos planteamos la construcción de un método RK de q etapas descrito como en (2.4) (cumpliendo (1.13) y (1.14)) que alcance orden 4, por (2.29) junto con los parámetros descritos en la Tabla 2.5, las condiciones a imponer se recogen en la Tabla 2.6. Se obtienen 8 condiciones no lineales que deben de verificar los coeficientes del método RK. En concreto, para obtener un método de orden 4, es posible partir de un RK explícito de $q = 4$ etapas. La determinación de sus coeficientes $\{a_{i,j}\}, \{b_i\}, \{c_j\}$ se hace parametrizándolos hasta llegar a un sistema compatible (ver [2]). Si se considerase de partida un método de $q > 4$ etapas, entonces se tendrían varios parámetros indeterminados a modificar libremente.

	Árbol	Condición
Orden 1:	τ_0	$\sum_j b_j = 1$
Orden 2:	$[\tau_0]$	$\sum_j b_j c_j = \frac{1}{2}$
Orden 3:	$[\tau_0, \tau_0]$	$\sum_j b_j c_j^2 = \frac{1}{3}$
	$[[\tau_0]]$	$\sum_{j,k} b_j a_{j,k} c_k = \frac{1}{6}$
Orden 4:	$[\tau_0, \tau_0, \tau_0]$	$\sum_j b_j c_j^3 = \frac{1}{4}$
	$[[\tau_0, \tau_0]]$	$\sum_{j,k} b_j a_{j,k} c_k = \frac{1}{12}$
	$[\tau_0, [\tau_0]]$	$\sum_{j,k,l} b_j a_{j,l} c_l c_k = \frac{1}{8}$
	$[[[\tau_0]]]$	$\sum_{j,k,l} b_j a_{j,k} a_{k,l} c_l = \frac{1}{24}$

Tabla 2.6: Condiciones de orden 4 para un RK.

La construcción de métodos de RK de orden superior a 4 resulta complicado incluso habiendo desarrollado esta teoría, debido que la cantidad de condiciones (no lineales) que debe de verificar crecen excesivamente (en específico, a la par que el número de árboles posibles en T_n). En la Tabla 2.7 se incluye el número de condiciones para alcanzar un cierto orden y el número mínimo de etapas para que se puedan cumplir tales condiciones.

Orden	Condiciones	Nº mínimo de etapas
1	1	1
2	2	2
3	4	3
4	8	4
5	17	6
6	37	7
7	85	9
8	200	11
9	486	≥ 12
10	1205	≥ 13

Tabla 2.7: Número de condiciones de orden en un RK y el número mínimo de etapas para que el orden sea alcanzable [2].

Capítulo 3

Análisis del orden de un método RKN

Como hemos comentado en el Capítulo 1, los métodos de Nyström surgen de la observación de que es posible disminuir el esfuerzo e cálculo que precisa un método de Runge-Kutta cuando se utiliza para resolver un sistema diferencial de segundo orden

$$\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}, \mathbf{y}') \quad (3.1)$$

con condiciones iniciales $\mathbf{y}(t_0) = \boldsymbol{\eta}$, $\mathbf{y}'(t_0) = \boldsymbol{\eta}'$.

El estudio del orden de los métodos de Nyström tiene algunas semejanzas con el de los métodos de Runge-Kutta (Capítulo 2), pero es más complejo. También aquí nuestra cita principal seguirá siendo el libro de Hairer, Nørsett y Wanner [5].

Definición 3.1. Un *método de Nyström* de q etapas para resolver numéricamente la ecuación (3.1) (junto con las condiciones iniciales) es un método de un paso que calcula una aproximación \mathbf{y}_1 de $\mathbf{y}(t_0 + h)$ a partir de las aproximaciones \mathbf{y}_0 e \mathbf{y}'_0 de $\mathbf{y}(t_0)$ e $\mathbf{y}'(t_0)$ respectivamente mediante el siguiente algoritmo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}'_i = \mathbf{f} \left(t_0 + c_i h, \mathbf{y}_0 + c_i h \mathbf{y}'_0 + h^2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{k}'_j, \mathbf{y}'_0 + h \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{k}'_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, q, \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \mathbf{y}'_0 + h^2 \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \mathbf{k}'_i, \\ \mathbf{y}'_1 = \mathbf{y}'_0 + h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{k}'_i. \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Los coeficientes $\{c_i\}$, $\{b_j\}$, $\{\bar{b}_j\}$, $\{a_{i,j}\}$ y $\{\bar{a}_{i,j}\}$ para $i, j = 1, 2, \dots, q$ caracterizan al método de

Nyström, y se pueden recoger en la tabla de Butcher

$$\begin{array}{c|cccc|cccc}
 c_1 & \bar{a}_{1,1} & \bar{a}_{1,2} & \dots & \bar{a}_{1,q} & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,q} \\
 c_2 & \bar{a}_{2,1} & \bar{a}_{2,2} & \dots & \bar{a}_{2,q} & a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,q} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 c_q & \bar{a}_{q,1} & \bar{a}_{q,2} & \dots & \bar{a}_{q,q} & a_{q,1} & a_{q,2} & \dots & a_{q,q} \\
 \hline
 & \bar{b}_1 & \bar{b}_2 & \dots & \bar{b}_q & b_1 & b_2 & \dots & b_q
 \end{array}
 \quad \text{o abreviadamente} \quad
 \frac{\mathbf{c} \mid \bar{A} \mid A}{\bar{\mathbf{b}}^t \mid \mathbf{b}^t}.$$

Si las matrices de coeficientes \bar{A} y A son triangulares inferiores estrictas, entonces los términos \mathbf{k}'_i están definidos explícitamente. En tales casos el método de Nyström se dice *explícito*; de no ser así, el método se dice *implícito*.

Con el cambio de variable $\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \end{pmatrix}$, el método RKN (3.2) se puede expresar como método de un paso

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}_0 + h\phi(t_0, \mathbf{Y}_0, h),$$

cuya función incremento es

$$\phi(t_0, \mathbf{Y}_0, h) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}'_0 + h \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \mathbf{k}'_i \\ \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{k}'_i \end{pmatrix}.$$

Vistos como tal, las caracterizaciones de consistencia, estabilidad y convergencia propias de los métodos de un paso son aplicables a los RKN [5].

Además, el error local asociado al método viene dado por

$$\varepsilon(t_0, h; \mathbf{Y}) = \mathbf{Y}(t_0 + h) - \mathbf{Y}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}'(t_0 + h) - \mathbf{y}'_1 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

donde \mathbf{Y}_1 es el valor aproximado que proporciona el método partiendo del valor exacto \mathbf{Y}_0 en el instante t_0 . Por lo tanto, un método RKN tiene *orden* p si $\varepsilon(t_0, h; \mathbf{z}) = \mathcal{O}(h^{p+1})$, lo que es equivalente a

$$\mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_1 = \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad \mathbf{y}'(t_0 + h) - \mathbf{y}'_1 = \mathcal{O}(h^{p+1}). \quad (3.4)$$

Las principales ventajas que reporta el uso de un método RKN respecto de un RK son principalmente dos:

- permite trabajar directamente con las variables originales del problema \mathbf{y} , \mathbf{y}' en vez de considerar un cambio de variable que suponga un aumento del coste computacional,
- los coeficientes $\{\bar{a}_{i,j}\}$ y $\{\bar{b}_i\}$ pueden elegirse sin necesidad de que se verifiquen las condicio-

nes (1.15) y (1.18). Es decir

$$\bar{a}_{i,j} = \sum_{k=1}^q a_{i,k} a_{k,j}, \quad \bar{b}_i = \sum_{j=1}^q b_j a_{j,i}, \quad (3.5)$$

para $i, j = 1, \dots, q$, con lo que se obtiene mayor grado de libertad para satisfacer las condiciones de orden

Ejemplo 3.1 Un método RKN que no cumple con las condiciones (3.5) viene dado por la tabla de Butcher [3]

0									
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{8}$				$\frac{1}{2}$				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{8}$	0			0	$\frac{1}{2}$			
1	0	0	$\frac{1}{2}$		0	0	1		
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$	

Se trata de un método explícito de orden 4 cuyas aproximaciones vienen dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}'_1 = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \\ \mathbf{k}'_2 = \mathbf{f}\left(t_0 + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_0 + \frac{1}{2}h\mathbf{y}'_0 + h^2\frac{1}{8}\mathbf{k}'_1, \mathbf{y}'_0 + h\frac{1}{2}\mathbf{k}'_1\right) \\ \mathbf{k}'_3 = \mathbf{f}\left(t_0 + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_0 + \frac{1}{2}h\mathbf{y}'_0 + h^2\frac{1}{8}\mathbf{k}'_1, \mathbf{y}'_0 + h\frac{1}{2}\mathbf{k}'_2\right) \\ \mathbf{k}'_4 = \mathbf{f}\left(t_0 + h, \mathbf{y}_0 + h\mathbf{y}'_0 + h^2\frac{1}{2}\mathbf{k}'_3, \mathbf{y}'_0 + h\mathbf{k}'_3\right) \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\mathbf{y}'_0 + h^2\left(\frac{\mathbf{k}'_1}{6} + \frac{\mathbf{k}'_2}{6} + \frac{\mathbf{k}'_3}{6}\right) \\ \mathbf{y}'_1 = \mathbf{y}'_0 + h\left(\frac{\mathbf{k}'_1}{6} + \frac{\mathbf{k}'_2}{3} + \frac{\mathbf{k}'_3}{3} + \frac{\mathbf{k}'_4}{6}\right). \end{array} \right.$$

3.1. Desarrollo en serie de la solución exacta

De igual manera que en el Capítulo 2, sin pérdida de generalidad¹ podemos restringirnos al estudio de ecuaciones diferenciales autónomas de la forma

$$\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{y}'), \quad (3.6)$$

¹Basta considerar el cambio de variable $\mathbf{z} = (t, \mathbf{y})^T$, $\mathbf{z}' = (1, \mathbf{y}')^T$ y notar que, dado que $t'' = 0$, la ecuación diferencial (3.1) es equivalente a $\mathbf{z}'' = \mathbf{F}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') = (0, \mathbf{f}(\mathbf{z}, \mathbf{z}'))^T$.

con $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$. Como hicimos anteriormente, la coordenada J de un vector se denota con un superíndice J . Así:

$$(\mathbf{y}^J)'' = \mathbf{f}^J(\mathbf{y}^1, \dots, \mathbf{y}^d, \mathbf{y}'^1, \dots, \mathbf{y}'^d).$$

Derivando sucesivamente esta expresión y utilizando (3.6) obtenemos:

$$(\mathbf{y}^J)''' = \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{y}'^K + \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \mathbf{f}^K \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{y}^J)^{(4)} &= \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^K \mathbf{y}'^L + \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}'^L} \mathbf{y}'^K \mathbf{f}^L \\ &\quad + \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{f}^K \\ &\quad + \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{f}^K \mathbf{y}'^L + \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K \partial \mathbf{y}'^L} \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L \\ &\quad + \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \frac{\partial \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^L + \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \frac{\partial \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}'^L} \mathbf{f}^L \end{aligned} \quad (3.8)$$

Este proceso se vuelve rápidamente complicado debido a que resulta necesario, a diferencia de como sucedía para ecuaciones diferenciales de primer orden, distinguir entre \mathbf{y} e \mathbf{y}' a la hora de considerar las derivadas parciales de $\mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{y}')$, lo que da lugar a términos que son un producto de funciones de naturaleza distinta.

Será útil reproducir el comportamiento de este fenómeno gráficamente, mediante una familia de árboles adecuados [5]. Para distinguir las derivadas respecto de \mathbf{y} e \mathbf{y}' en los nodos de esos árboles, tendremos que considerar dos tipos de nodos, que denotaremos ‘flacos’ y ‘gordos’. A este tipo de árboles se les denominará N -árboles, en honor a Nyström. Un N -árbol de orden n es un grafo de n vértices (que pueden ser ‘flacos’ o ‘gordos’) y un cierto número de arcos conectando cada nodo (nodo hijo) a un único nodo en un nivel inferior (nodo padre), de manera que en el nivel más bajo solo haya un nodo gordo (raíz) y que cada nodo ‘flaco’ tenga a lo sumo un hijo y este sea ‘gordo’ [3].

Definición 3.2. Un N -árbol monótonamente ordenado de orden n es un par (τ, τ') , donde τ es un árbol monótonamente ordenado (ver Definición 2.1)

$$\tau : A_n \setminus \{j_1\} \rightarrow A_n$$

con $A_n = \{j_1 < j_2 < \dots < j_n\}$ y τ' es una aplicación

$$\tau' : A_n \rightarrow \{\text{‘flaco’}, \text{‘gordo’}\}$$

que satisface:

- $\tau'(j_1) = \text{'gordo'}$. Es decir, la raíz del árbol es un nodo gordo,
- un nodo flaco tiene a lo sumo un único nodo hijo y este debe de ser gordo.

El motivo para considerar la segunda condición es que todas las derivadas de \mathbf{y} se pueden expresar, a excepción de la primera, en función de \mathbf{f} . Por tanto, no es necesario realizar la distinción entre todas las derivadas de \mathbf{y} e \mathbf{y}' , sino solo en los términos de primer orden.

En un abuso de notación, al N-árbol monótonamente ordenado (τ, τ') se le denotará sencillamente por τ . Además, denotamos al conjunto de todos los N-árboles de orden n como LNT_n y, dado un N-árbol monótonamente ordenado $\hat{\tau} \equiv (\hat{\tau}, \hat{\tau}')$, se denota por $\varrho(\hat{\tau})$ a su orden.

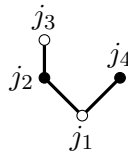
Llamaremos *nodos hoja* a los nodos sin hijos del N-árbol.

De igual manera que con los árboles ordenados monótonamente, los N-árboles ordenados monótonamente se pueden asociar con una familia de grafos. Para distinguir entre nodos gordos y flacos, representaremos los nodos gordos como nodos sin relleno (\circ), mientras que los flacos serán nodos con relleno (\bullet).

Ejemplo 3.2 El N-árbol ordenado monótonamente de 4^o orden dado por las aplicaciones

$$\begin{array}{ll}
 \hat{\tau} : \{j_2, j_3, j_4\} \rightarrow \{j_1, j_2, j_3, j_4\} & \hat{\tau}' : \{j_1, j_2, j_3, j_4\} \rightarrow \{\text{'flaco'}, \text{'gordo'}\} \\
 j_2 \rightarrow j_1 & j_1 \rightarrow \text{'gordo'} \\
 j_3 \rightarrow j_2 & j_2 \rightarrow \text{'flaco'} \\
 j_4 \rightarrow j_1 & j_3 \rightarrow \text{'gordo'} \\
 & j_4 \rightarrow \text{'flaco'}
 \end{array}$$

se puede representar mediante el grafo



Observación 3.1. Resulta conveniente considerar al N-árbol vacío \emptyset como el único N-árbol ordenado monótonamente de orden 0 y a $\tau_0 : \overset{j}{\circ}$ como el único de orden 1.

Análogamente al concepto de diferencial elemental (2.7) definido en LT_n , podemos identificar los N-árboles de orden n con los términos presentes en la derivada n -ésima de la solución exacta \mathbf{y} de (3.6).

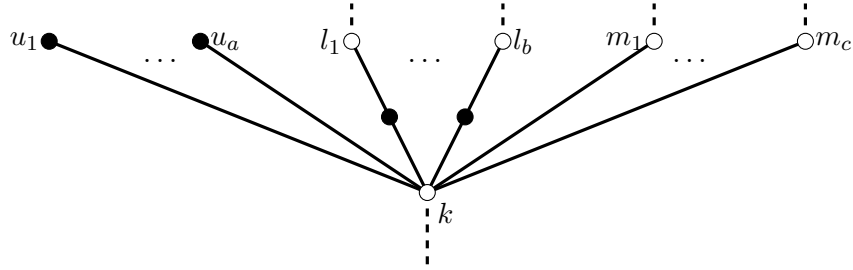
Definición 3.3. Dado un N-árbol $\tau \in LTN_n$, se dice *diferencial elemental de \mathbf{f}^J asociado a τ en $(\mathbf{y}, \mathbf{y}')$* y se denota por

$$\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}') \quad (3.9)$$

a la expresión dada por la suma sobre los índices asociados a los nodos gordos de τ (excluyendo el nodo raíz) y a los nodos flacos finales de τ del producto de términos:

$$(i) \quad \frac{\partial^{a+b+c} \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^{U_1} \dots \partial \mathbf{y}^{U_a} \partial \mathbf{y}^{L_1} \dots \partial \mathbf{y}^{L_b} \partial \mathbf{y}'^{M_1} \dots \partial \mathbf{y}'^{M_c}}(\mathbf{y}, \mathbf{y}') \quad \circ \quad (ii) \quad \mathbf{y}'^K$$

Los términos de tipo (i) aparecen si un nodo gordo k está conectado con a nodos flacos hoja u_1, \dots, u_a , con b nodos gordos l_1, \dots, l_b a través de un nodo flaco, y directamente con c nodos gordos m_1, \dots, m_c . Es decir, se tiene un nodo de la forma



donde no se han incluido los índices asociados a los nodos flacos no finales porque no son relevantes para el cálculo.

Además, si $a = b = c = 0$, es decir, el nodo gordo concreto es un nodo hoja



entonces se considera el término \mathbf{f}^K .

Un término de tipo (ii) aparece si el nodo flaco k es un nodo final, es decir, se tiene un nodo de la forma



Notemos que, si bien se consideran en la definición de LTN_n los índices asociados a nodos flacos no-hoja para continuar con la notación estándar de árbol ordenado monótonamente, estos no serán relevantes a nivel práctico.

Además, al vector

$$\mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}') = \left(\mathbf{F}^1(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}'), \dots, \mathbf{F}^d(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}') \right)^T$$

se le llama sencillamente *diferencial elemental de \mathbf{f} asociado a τ* .

Por convenio se consideran

$$\mathbf{F}^J(\emptyset)(\mathbf{y}, \mathbf{y}') = 1 \quad \text{y} \quad \mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}, \mathbf{y}') = \mathbf{f}^J.$$

Ejemplo 3.3 El diferencial elemental asociado al N-árbol $\hat{\tau}$ introducido en el Ejemplo 3.2 resulta

$$\rightarrow \mathbf{F}^J(\hat{\tau})(\mathbf{y}, \mathbf{y}') = \sum_{L,M=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^L \partial \mathbf{y}^M} \mathbf{f}^L \mathbf{y}'^M.$$

Como se comentaba en la definición previa, el índice k no está implicado por ser un nodo flaco no-hoja.

En la Tabla 3.1 se incluyen las primeras tres familias de N-árboles monótonamente ordenados junto con las expresiones analíticas de las primeras derivadas de la solución \mathbf{y} de (3.6).

Considerando los diferenciales elementales (3.9) asociadas a los árboles de LTN_1 , LTN_2 y LTN_3 en la Tabla 3.1, podemos identificar cada sumando de $(\mathbf{y}^J)^{(n)}$ con un único diferencial elemental asociado a un N-árbol de LTN_{n-1} .

Observación 3.2. Igual que en la Definición 2.3, si en LTN_3 consideramos los siguientes N-árboles monótonamente ordenados



entonces sus respectivos diferenciales elementales vienen dados por

$$\sum_{J_2, J_3=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^{J_1}}{\partial \mathbf{y}'^{J_2} \partial \mathbf{y}^{J_3}} \mathbf{f}^{J_2} \mathbf{y}'^{J_3} \quad \sum_{J_2, J_3=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^{J_1}}{\partial \mathbf{y}^{J_2} \partial \mathbf{y}'^{J_3}} \mathbf{y}'^{J_2} \mathbf{f}^{J_3}.$$

Si \mathbf{f} es suficientemente regular, tales expresiones coinciden por la igualdad en las derivadas cruzadas (Teorema de Schwratz). Además, ambos N-árboles coinciden si eliminamos los índices asociados a cada nodo.

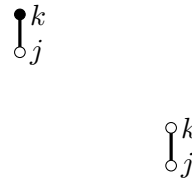
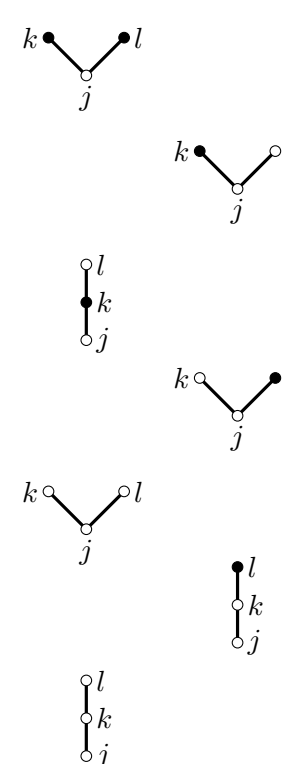
Orden n	Derivada	N-Árboles Ordenados Monótonamente de orden $n - 1$
2	$(\mathbf{y}^J)^{(2)} = \mathbf{f}^J$	\circ_j
3	$(\mathbf{y}^J)^{(3)} = \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{y}'^K$ $+ \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \mathbf{f}^K$	
4	$(\mathbf{y}^J)^{(4)} = \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^K \mathbf{y}'^L$ $+ \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}'^L} \mathbf{y}'^K \mathbf{f}^L$ $+ \sum_{L=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^L} \mathbf{f}^L$ $+ \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{f}^K \mathbf{y}'^L$ $+ \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K \partial \mathbf{y}'^L} \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L$ $+ \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \frac{\partial \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^L$ $+ \sum_{K,L=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \frac{\partial \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}'^L} \mathbf{f}^L$	

Tabla 3.1: Correspondencia entre los N-árboles ordenados monótonamente y las derivadas de ordenes 2 a 4 de \mathbf{y}^J .

Surge así el siguiente concepto [5]:

Definición 3.4. Dados dos N-árboles monótonamente ordenados $(\tau_1, \tau'_1), (\tau_2, \tau'_2)$, se dicen *equi-*

valentes si solo difieren en cuanto a la permutación de sus índices, es decir, si tienen mismo orden n y existe una biyección

$$\sigma : A_n \rightarrow A_n$$

con $\sigma(j_1) = j_1$ cumpliendo

$$\tau_1 \circ \sigma = \sigma \circ \tau_2 \quad \text{y} \quad \tau'_1 \circ \sigma = \tau'_2.$$

Dicho de otra forma, existe una permutación de los índices de τ_1 respetando la asignación gordo-flaco de sus nodos tal que resulta τ_2 (y viceversa).

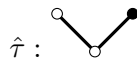
En la Observación 3.2 bastaría tomar σ dado por



$$\sigma(j_1) = j_1, \quad \sigma(j_2) = j_3 \quad \text{y} \quad \sigma(j_3) = j_2.$$

De nuevo, la relación “ser equivalente” define una relación de equivalencia sobre LNT_n . A una clase de equivalencia se le llama sencillamente *N-árbol de orden n* y se denota como la estructura del grafo asociado al N-árbol monótonamente ordenado sin índices. Al conjunto de todas esas clases de equivalencia se le denota por NT_n .

Siguiendo la línea del Capítulo 2, denotaremos idénticamente a un N-árbol monótonamente ordenado y a su clase de equivalencia. Además, dado $\tau \in NT_n$, se denota por $\alpha(\tau)$ al número de elementos de la clase de equivalencia τ , que no es más que el número de posibles etiquetados diferentes que se le pueden asignar en LNT_n .

En la Observación 3.2, su clase de equivalencia viene dada por el grafo



Se tiene $\alpha(\hat{\tau}) = 2$, ya que resulta indistinguible considerar  que . El resto de elementos de LNT_3 conforman su propia clase de equivalencia de cardinalidad 1.

Si $\tau_1, \tau_2 \in LNT_n$ son dos N-árboles equivalentes, entonces coinciden sus diferenciales elementales

$$\mathbf{F}^J(\tau_1) = \mathbf{F}^J(\tau_2).$$

Sea ahora $\tau \in NT_n$, en un abuso de notación, se denota

$$\mathbf{F}^J(\tau) = \mathbf{F}^J(\hat{\tau}),$$

donde $\hat{\tau} \in \tau$ es cualquier representante de la clase de equivalencia de τ .

Se cumple, en definitiva, la siguiente propiedad:

$$\sum_{\hat{\tau} \in \tau} \mathbf{F}^J(\hat{\tau}) = \alpha(\tau) \mathbf{F}^J(\tau). \quad (3.10)$$

Podemos entonces enunciar el resultado principal de esta sección.

Teorema 3.1. *La solución exacta \mathbf{y} de (3.6) satisface, para cualquier $n \geq 2$,*

$$(\mathbf{y})^{(n)} = \sum_{\tau \in LNT_{n-1}} \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}') = \sum_{\tau \in NT_{n-1}} \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}'). \quad (3.11)$$

Demostración. Apliquemos inducción sobre el orden n de derivación. Basta probar la primera igualdad para la J -ésima componente de \mathbf{y} con $J = 1, \dots, d$ genérico. La segunda se deduce a partir de la primera gracias a (3.10).

Para $n = 2, 3$ y 4 se cumple el resultado buscado, basta volver a ver la Tabla 3.1.

Supongamos que (3.11) sea cierto hasta orden $n - 1$ y probemos que es cierto para orden n :

Por hipótesis de inducción tenemos

$$(\mathbf{y}^J)^{(n)} = \frac{d}{dt} \left((\mathbf{y}^J)^{(n-1)} \right) = \sum_{\tau \in LNT_{n-2}} \frac{d}{dt} (\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}')).$$

Ahora bien, derivar $\mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}')$ con respecto de t se traduce, por la Regla de Producto y de la Cadena, y atendiendo a la definición de diferencial elemental, en derivar un producto de términos de tipo (i) y (ii). Esto da lugar a una suma de las derivadas de cada uno de estos términos:

- Si se deriva un término de tipo (i), entonces se tiene la suma

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}^{U_{a+1}}} \frac{\partial^{a+b+c} \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^{U_1} \dots \partial \mathbf{y}^{U_a} \partial \mathbf{y}^{L_1} \dots \partial \mathbf{y}^{L_b} \partial \mathbf{y}'^{M_1} \dots \partial \mathbf{y}'^{M_c}} \cdot \mathbf{y}'^{U_{a+1}} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}'^{M_{c+1}}} \frac{\partial^{a+b+c} \mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^{U_1} \dots \partial \mathbf{y}^{U_a} \partial \mathbf{y}^{L_1} \dots \partial \mathbf{y}^{L_b} \partial \mathbf{y}'^{M_1} \dots \partial \mathbf{y}'^{M_c}} \cdot \mathbf{f}^{M_{c+1}} \end{aligned}$$

multiplicada por el resto de términos del producto original.

Esto es gráficamente equivalente a considerar la suma de los diferenciales elementales asociados a los dos árboles resultantes de añadir a τ en k un nuevo nodo flaco y un nuevo nodo gordo respectivamente.

- Si se deriva un término de tipo (ii), entonces la expresión resultante es idéntica, a excepción de que el término \mathbf{y}'^K se sustituye, dada la ecuación diferencial (3.6), por \mathbf{f}^K .

Gráficamente esto es equivalente a considerar el diferencial elemental asociado a τ añadiendo un nodo gordo al nodo flaco k . Esta idea se ilustra en la Tabla 3.2.

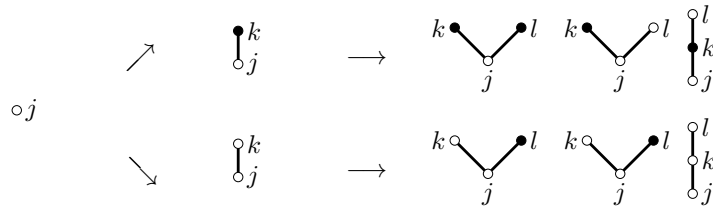


Tabla 3.2: Visualización de la derivación en los N-árboles.

Los árboles construidos en este proceso son todos de un orden superior a τ , es decir, de orden $n - 1$ y atendiendo a la definición de LNT_{n-1} , son cada uno de los árboles de orden $n - 1$ que se pueden construir a partir de τ . Además, cada uno de ellos aparece una única vez.

De esta manera, el resultado de derivar $\sum_{\tau \in LNT_{n-2}} \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}')$ es la suma de los diferenciales elementales asociados a todos los elementos de LNT_{n-1} . Es decir:

$$(\mathbf{y}^J)^{(n)} = \sum_{\tau \in LNT_{n-1}} \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}'),$$

que es el resultado buscado y con el que queda completo el proceso de inducción. □

Corolario 3.2. *La serie de Taylor asociada a una solución \mathbf{y} de la ecuación diferencial del problema (3.6) se puede expresar, utilizando (3.11), como*

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_0 + h) &= \mathbf{y}_0 + \mathbf{y}'_0 h + \sum_{n=2}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in LNT_{n-1}} \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &= \mathbf{y}_0 + \mathbf{y}'_0 h + \sum_{n=2}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in NT_{n-1}} \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!}. \end{aligned} \tag{3.12}$$

De igual manera, para \mathbf{y}' se obtiene

$$\mathbf{y}'(t_0 + h) = \mathbf{y}'_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in LNT_n} \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} = \mathbf{y}'_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in NT_n} \alpha(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!}. \tag{3.13}$$

3.2. Desarrollo en serie de la solución numérica

En esta sección se busca obtener un desarrollo en serie de la solución numérica \mathbf{y}_1 (3.1) en términos de los sucesivos diferenciales elementales dados por (3.9). Para el problema autónomo

(3.6), el método se puede reescribir de forma análoga a (2.4):

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{g}_i = \mathbf{y}_0 + c_i h \mathbf{y}'_0 + \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} h^2 \mathbf{f}(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j), \quad i = 1, 2, \dots, q \\ \mathbf{g}'_i = \mathbf{y}'_0 + \sum_{j=1}^q a_{i,j} h \mathbf{f}(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j), \quad i = 1, 2, \dots, q \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \mathbf{y}'_0 + \sum_{i=1}^q \bar{b}_i h^2 \mathbf{f}(\mathbf{g}_i, \mathbf{g}'_i), \\ \mathbf{y}'_1 = \mathbf{y}'_0 + \sum_{i=1}^q b_i h \mathbf{f}(\mathbf{g}_i, \mathbf{g}'_i). \end{array} \right. \quad (3.14)$$

De nuevo, los términos $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}'_1, \mathbf{g}_i$ y \mathbf{g}'_i son funciones del paso h de integración del RKN, pero para simplificar la notación, se indicarán sus evaluaciones y las de sus sucesivas derivadas en $h = 0$ como $(\mathbf{y}'_1)|_{h=0}$, como ya hicimos en el Capítulo 2 (véase la Observación 2.3).

Además de la fórmula (2.12) obtenida en el capítulo anterior, también será de utilidad el siguiente resultado, que se deduce de la Regla de Leibniz para $\mathbf{v}(h) = h^2$:

$$(h^2 \mathbf{u}(h))^{(n)} \Big|_{h=0} = n(n-1) (\mathbf{u}(h))^{(n-2)} \Big|_{h=0}. \quad (3.15)$$

Veamos ahora la naturaleza de las primeras derivadas de los términos \mathbf{g}_i y \mathbf{g}'_i .

Para $n = 0$ basta evaluar las expresiones (3.14)

$$\begin{aligned} (\mathbf{g}_i^J)^{(0)} \Big|_{h=0} &= \mathbf{y}_0^J, \\ (\mathbf{g}'_i^J)^{(0)} \Big|_{h=0} &= \mathbf{y}'_0^J. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Para $n = 1$ notamos que, por ser \mathbf{y}_0^J e \mathbf{y}'_0^J constantes y por (2.12), entonces

$$\begin{aligned} (\mathbf{g}_i^J)^{(1)} \Big|_{h=0} &= c_i \mathbf{y}'_0^J, \\ (\mathbf{g}'_i^J)^{(1)} \Big|_{h=0} &= \left(\sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j) \right) \Big|_{h=0} = \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Para $n = 2$, utilizando (3.15), (3.17) y dado que se tiene

$$(\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j))^{(1)} = \frac{d}{dt} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j) = \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} (\mathbf{g}_j^K)^{(1)} + \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} (\mathbf{g}'_j^K)^{(1)},$$

entonces obtenemos

$$\begin{aligned}
(\mathbf{g}_i^J)^{(2)}\Big|_{h=0} &= \left(h^2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j) \right) \Big|_{h=0}^{(2)} = 2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0), \\
(\mathbf{g}'_i^J)^{(2)}\Big|_{h=0} &= \left(h \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j) \right) \Big|_{h=0}^{(2)} \\
&= 2 \sum_{j=1}^q a_{i,j} \left(\sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} (\mathbf{g}_j^K)^{(1)} + \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} (\mathbf{g}'_j^K)^{(1)} \right) \Big|_{h=0} \\
&= 2 \sum_{j=1}^q a_{i,j} c_j \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{y}'^K \Big|_{h=0} + 2 \sum_{j,k=1}^q a_{i,j} a_{j,k} \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \mathbf{f}^K(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0).
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Para $(\mathbf{g}_j^J)^{(3)}$ se procede como en la última expresión:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{g}_i^J)^{(3)}\Big|_{h=0} &= \left(h^2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j) \right) \Big|_{h=0}^{(3)} \\
&= 6 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} c_j \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{y}'^K \Big|_{h=0} + 6 \sum_{j,k=1}^q \bar{a}_{i,j} a_{j,k} \sum_{K=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}'^K} \mathbf{f}^K(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Resulta necesario en este punto establecer una construcción recursiva de los N-árboles. Si bien en [6] se indica una posibilidad para esta idea, se ha considerado más adecuado adoptar una notación distinta.

Definición 3.5. Sean $m, k, w \in \mathbb{N}$ con $0 \leq m \leq k \leq w$ y sean $\tau_{m+1}, \tau_{m+2}, \dots, \tau_w$ N-árboles monótonamente ordenados no vacíos. Entonces denotamos por

$$[m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w] \tag{3.20}$$

al N-árbol monótonamente ordenado obtenido como sigue:

- se considera un nodo raíz gordo,
- de la raíz salen m nodos flacos hoja,
- los árboles $\tau_{m+1}, \dots, \tau_k$ se conectan con la raíz mediante un nodo flaco,
- los árboles $\tau_{k+1}, \dots, \tau_w$ se conectan directamente a la raíz.

Los índices del nuevo árbol se le asignan siguiendo el orden en que se añade cada elemento y, dentro de cada uno de estos, según el orden de los índices del árbol τ_i .

De tal manera, se tiene un árbol como el representado en la Figura 3.1.

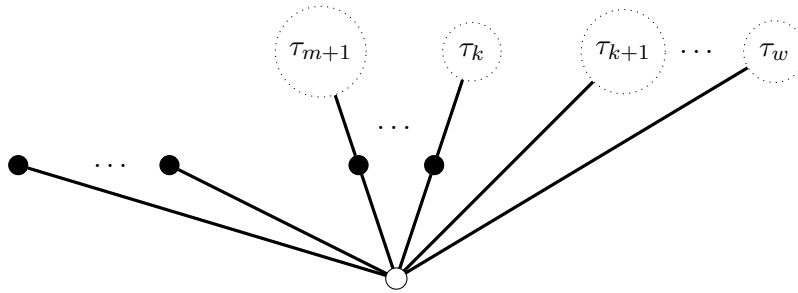


Figura 3.1: N-Árbol por recurrencia.

De nuevo, a los árboles $\tau_{m+1}, \tau_{m+2}, \dots, \tau_w$ se les denominará *N-árboles hijos*.

Notemos que esta construcción se puede considerar idénticamente tanto en LNT_n como en NT_n , ya que la clase de equivalencia de $[m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$ depende exclusivamente de las clases de $\tau_{m+1}, \dots, \tau_w$.

Observación 3.3. Siguiendo esta notación, todo N-árbol τ de orden $\varrho(\tau) \geq 1$ se puede expresar por recurrencia y tal representación es única salvo permutaciones de sus N-árboles hijos.

A diferencia de cómo se comentaba en el Capítulo 2, al eliminar la raíz de un N-árbol definido por recurrencia, no se obtienen necesariamente w N-árboles, ya que en concreto las primeras k ramas contradirían la definición de N-árbol (pues el nodo raíz sería flaco).

Además, dado el árbol $\tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$, denotaremos por comodidad (y siempre que se trabaje en LNT_n) a la raíz de τ por j , a los m nodos flacos hoja por j_1, \dots, j_m y a las raíces de τ_i por j_i para $i = m + 1, \dots, w$.

Los índices asociados a los nodos flacos que conectan la raíz con $\tau_{m+1}, \dots, \tau_k$ no toman ningún rol en el cómputo del diferencial elemental asociado. Por tanto, aunque desde un punto de vista teórico es necesario asignarles un índice, estos no serán relevantes en lo que sigue.

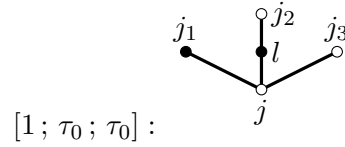
Proposición 3.3. El N-árbol $\tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$ tiene orden

$$\varrho(\tau) = m + 1 + \sum_{i=m+1}^k (\varrho(\tau_i) + 1) + \sum_{i=k+1}^w \varrho(\tau_i) = m + k + 1 + \sum_{i=m+1}^w \varrho(\tau_i).$$

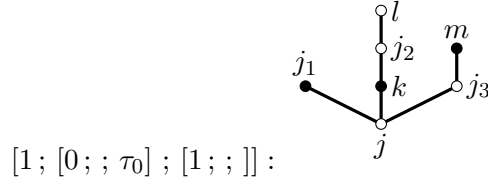
Notemos que, considerando la definición por recurrencia de los N-árboles, todos ellos se pueden expresar en términos de τ_0 anidando la notación descrita.

Ejemplo 3.4 Varios N-árboles expresados como en (3.20) son:

$$[0; ;] = \tau_0 : \begin{array}{c} j \\ \circ \end{array} \quad [1; ;] : \begin{array}{c} j_1 \\ | \\ \circ \\ | \\ j \end{array} \quad [0; ; \tau_0] : \begin{array}{c} j_1 \\ | \\ \circ \\ | \\ j \end{array}$$



La notación recursiva se puede anidar para representar N-árboles más complejos:



Igualmente a como sucedía en el Capítulo 2, gracias a la notación (3.20) podemos expresar los distintos parámetros asociados a los N-árboles en función de sus N-árboles hijos, lo que será de mucha utilidad.

Proposición 3.4. Dado el N-árbol $\tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$, entonces se tiene

$$\mathbf{F}^J(\tau) = \sum_{J_1, \dots, J_w=1}^d \frac{\partial^w \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}^{J_m} \partial \mathbf{y}^{J_{m+1}} \dots \partial \mathbf{y}^{J_k} \partial \mathbf{y}^{J_{k+1}} \dots \partial \mathbf{y}^{J_w}} \prod_{i=1}^m \mathbf{y}'^{J_i} \prod_{i=m+1}^w \mathbf{F}^{J_i}(\tau_i). \quad (3.21)$$

Demostración. Basta identificar en la fórmula de los diferenciales elementales (3.9) los términos asociados a los árboles hijos.

Notemos que w es el número de ramas saliendo del nodo raíz de τ . Las derivadas parciales $\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}^{J_m}$ están asociadas a los nodos flacos hoja conectados con j , $\partial \mathbf{y}^{J_{m+1}} \dots \partial \mathbf{y}^{J_k}$ con los árboles conectados a través de un nodo flaco con j y $\partial \mathbf{y}^{J_{k+1}} \dots \partial \mathbf{y}^{J_w}$ con los árboles conectados directamente. El término $\prod_{i=1}^m \mathbf{y}'^{J_i}$ proviene también de los nodos flacos hoja y $\prod_{i=m+1}^w \mathbf{F}^{J_i}(\tau_i)$ del resto de ramificaciones de j (recordemos que los nodos flacos que unen j con $\tau_{m+1}, \dots, \tau_k$ no se consideran en el diferencial elemental de τ). \square

Consideramos ahora dos parámetros más asociados a los N-árboles: la densidad y el parámetro Φ , que de nuevo se verán involucrados en el desarrollo en serie de \mathbf{y}_1 e \mathbf{y}'_1 .

Definición 3.6. Dado $(\tau, \tau') \in LNT_n$, definimos la *densidad de* (τ, τ') como la densidad del árbol monótonamente ordenado asociado

$$\gamma((\tau, \tau')) := \gamma(\tau). \quad (3.22)$$

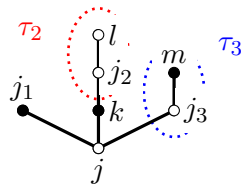
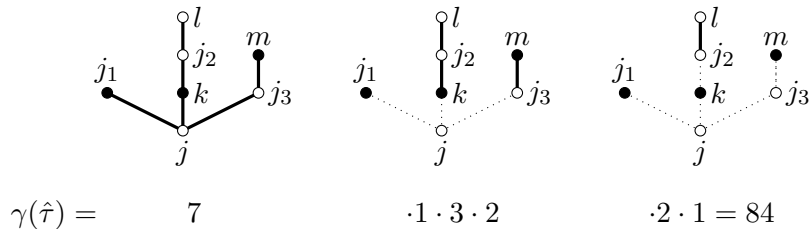
Además, en un abuso de notación, indicaremos sencillamente $\gamma(\tau)$ como la densidad asociada al N-árbol.

Proposición 3.5. Dado el N-árbol $\tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$, entonces su densidad puede expresarse recurrentemente como

$$\gamma(\tau_0) = 1, \quad \gamma(\tau) = \varrho(\tau) \prod_{i=m+1}^k (\varrho(\tau_i) + 1) \gamma(\tau_i) \prod_{i=k+1}^w \gamma(\tau_i). \quad (3.23)$$

Demostración. Basta recordar la definición (2.20) de densidad de un árbol y tener en cuenta la definición por recurrencia de N-árbol, ilustrada en la Figura 3.1. En particular, para $i = m + 1, \dots, k$, el término asociado a τ_i es $(\varrho(\tau_i) + 1) \gamma(\tau_i)$ porque que hay un nodo flaco que lo une con la raíz de τ ; para $i = k + 1, \dots, w$, el término es $\gamma(\tau_i)$, ya que los árboles τ_i están directamente conectados con la raíz. \square

Para ilustrar este concepto, veamos la densidad del N-árbol $\hat{\tau} = [1; \tau_2 = [0; ; \tau_0]; \tau_3 = [1; ;]]$ que considerábamos antes. Veamos el cálculo tradicional y comparémoslo con (3.23):



Ahora, dado que $\gamma(\tau_2) = \gamma(\tau_3) = 2$, entonces se tiene

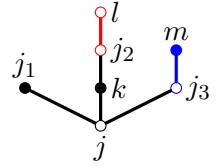
$$\gamma(\hat{\tau}) = \varrho(\hat{\tau})(\varrho(\tau_2) + 1)\gamma(\tau_2)\gamma(\tau_3) = 7 \cdot (2 + 1) \cdot 2 \cdot 2 = 84.$$

Definición 3.7. Dado un N-árbol $\tau \in LNT_n$ de índice raíz j , denotamos por $\Phi_j(\tau)$ a la suma sobre los índices de los nodos gordos de τ (excepto su raíz) del producto de términos:

- $a_{k,l}$ si el nodo gordo k tiene un hijo gordo l ,
- $\bar{a}_{k,l}$ si el nodo gordo k está conectado a través de un nodo flaco con el nodo gordo l ,
- $(c_k)^m$ si el nodo gordo k tiene m nodos hijos flacos hoja,

donde los coeficientes a_{kl}, \bar{a}_{kl} y c_k son los coeficientes en (3.2) que definen el RKN.

Por ejemplo, para el árbol $\hat{\tau} = [1; \tau_2 = [0; ; \tau_0]; \tau_3 = [1; ;]]$, se tiene



$$\Phi_j(\hat{\tau}) = \sum_{j_2, l, j_3=1}^q c_j \bar{a}_{j, j_2} a_{j, j_3} \cdot a_{j_2, l} \cdot c_{j_3}.$$

Pero es que, si notamos que los términos en rojo están asociados al N-árbol hijo τ_2 y los azules a τ_3 , entonces surge la siguiente propiedad:

Proposición 3.6. *Dado el N-árbol $\tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$ de nodo raíz j , entonces se tiene*

$$\Phi_j(\tau) = \sum_{j_{m+1}, \dots, j_w} (c_j)^m \prod_{i=m+1}^k \bar{a}_{j, j_i} \Phi_{j_i}(\tau_i) \prod_{i=k+1}^w a_{j, j_i} \Phi_{j_i}(\tau_i). \quad (3.24)$$

Demostración. De nuevo, basta tener en cuenta la Definición 3.7 del parámetro Φ y asociar términos en función de los N-árboles hijos de τ . \square

Debemos ahora adaptar la Fórmula de Faá Di Bruno (2.19) para la situación en que se tenga $\mathbf{u}(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2)$. En este caso, y dado que en la fórmula original \mathbf{v} representa una función vectorial, puede tomar el rol $\mathbf{v} = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2)^T$. Ahora bien, será necesario distinguir en (2.19) si se está considerando la derivada parcial respecto de la componente \mathbf{w}_1 o respecto de \mathbf{w}_2 .

En la fórmula de Faá Di Bruno se consideraba la familia de árboles especiales LS_n . Cada uno de ellos representaba un sumando de la derivada de $\mathbf{u}(\mathbf{v})$ y en concreto cada rama indicaba el orden de derivación total de una componente de \mathbf{v} . Es decir, el hecho de que un árbol especial tuviese una rama de longitud m e índice inicial k se reflejaba en el término $(\mathbf{v}^K)^{(m)}$.

Reproduciremos esta idea en una familia concreta de N-árboles gracias a la cual podremos distinguir la componente y el orden de derivación de los términos \mathbf{w}_1 y \mathbf{w}_2 .

Definición 3.8. Un N-árbol τ se dice *especial* si:


- no tiene ramificaciones más que en la raíz,
- solo el nodo raíz puede tener hijos flacos.

La segunda condición se considera precisamente con la finalidad de distinguir con los nodos flacos los términos asociados a \mathbf{w}_1 y con los nodos gordos las derivadas de \mathbf{w}_2 .

Al conjunto de los *N-árboles especiales monótonamente ordenados de orden n* lo denotaremos por $LNTS_n$.

Por ejemplo, el primer orden en el que se diferencian $LNTS_n$ y LNT_n es para $n = 3$.

$$LNTS_3 = \left\{ \begin{array}{c} \begin{array}{c} \circ l \\ | \\ \circ k \\ | \\ \circ j \end{array}, \begin{array}{c} \circ l \\ | \\ \bullet k \\ | \\ \circ j \end{array}, \begin{array}{c} \circ l \quad \circ k \\ \diagdown \quad / \\ \circ j \end{array}, \begin{array}{c} \circ l \quad \bullet k \\ \diagdown \quad / \\ \circ j \end{array}, \begin{array}{c} \bullet l \quad \bullet k \\ \diagdown \quad / \\ \circ j \end{array} \end{array} \right\} \neq LNT_3$$

ya que el N-árbol  no cumple la segunda condición.

En definitiva, se tiene el resultado:

Lema 3.7 (Fórmula de Faà di Bruno Adaptada). *Para $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 1$ y las funciones $\mathbf{u}, \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2$, se tiene que*

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}^J(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2))^{(n-1)} = \\ \sum_{u \in LNTS_n} \sum_{J_1, \dots, J_w=1}^d \frac{\partial^w \mathbf{u}^J}{\partial \mathbf{w}_1^{J_1} \dots \partial \mathbf{w}_1^{J_k} \partial \mathbf{w}_2^{J_{k+1}} \dots \partial \mathbf{w}_2^{J_w}}(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) \prod_{i=1}^k (\mathbf{w}_1^{J_i})^{(\delta_i+1)} \prod_{i=k+1}^w (\mathbf{w}_2^{J_i})^{(\delta_i)}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde para cada $u \in LNTS_n$, w es el número de ramas partiendo de la raíz, δ_i el número de nodos gordos que tiene la rama i -ésima excluyendo la raíz y k el número de ramas que empiezan con nodo flaco. Notemos que puede ser $\delta_i = 0$ para $i = 1, \dots, k$ en el caso en que se tenga un término $(\mathbf{w}_1^{J_i})^{(1)}$.

De tal manera, se cumple $n = 1 + (\delta_1 + 1) + \dots + (\delta_k + 1) + \delta_{k+1} + \dots + \delta_w$.

Demostración. Basta tener en cuenta el desarrollo visto para la fórmula original (2.19). \square

En concreto, nos interesa particularizar la fórmula (3.25) para $\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_i, \mathbf{g}'_i)$ y expresar los N-árboles especiales de manera recursiva:

$$\begin{aligned} (\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_i, \mathbf{g}'_i))^{(n-1)} = \\ \sum_{u \in LNTS_n} \sum_{J_1, \dots, J_w=1}^d \frac{\partial^w \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}^{J_m} \partial \mathbf{y}^{J_{m+1}} \dots \partial \mathbf{y}^{J_k} \partial \mathbf{y}'^{J_{k+1}} \dots \partial \mathbf{y}'^{J_w}}(\mathbf{g}_i, \mathbf{g}'_i) \\ \cdot \prod_{l=1}^m (\mathbf{g}_i^{J_l})^{(1)} \prod_{l=m+1}^k (\mathbf{g}_i^{J_l})^{(\delta_l+1)} \prod_{l=k+1}^w (\mathbf{g}'_i^{J_l})^{(\delta_l)}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde para cada $u \in LNTS_n$ se tiene $u = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$ y $\delta_i \neq 0$ es la cantidad de nodos gordos que tiene su rama i -ésima.

Una vez introducidos los resultados anteriores y habiendo considerado la definición de N-árboles por recurrencia, podemos abordar el resultado principal de esta sección. Se puede establecer la siguiente relación entre las sucesivas derivadas $(\mathbf{g}_i)^{(n+1)}$ y $(\mathbf{g}'_i)^{(n)}$ de la definición (3.14) de un

método RKN con la familia de N-árboles LNT_n como sigue:

Teorema 3.8. *Dado $n \in \mathbb{N}$, la derivada $(n+1)$ -ésima de \mathbf{g}_i y la n -ésima de \mathbf{g}'_i satisfacen:*

$$\begin{aligned} (\mathbf{g}_i)^{(n+1)} \Big|_{h=0} &= (n+1) \sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0), \\ (\mathbf{g}'_i)^{(n)} \Big|_{h=0} &= \sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q a_{i,j} \Phi_j(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Demostración. Basta probar las relaciones (3.27) para las componentes J -ésimas \mathbf{g}_i^J y \mathbf{g}'_i^J para un $J = 1, \dots, q$ genérico.

Aplicamos inducción sobre el orden n de derivación.

Para $n = 1$, el único elemento de LNT_1 es $\tau_0 : \begin{smallmatrix} j \\ \circ \end{smallmatrix}$, de parámetros

$$\mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) = \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0), \quad \Phi_j(\tau_0) = 1, \quad \gamma(\tau_0) = 1.$$

Luego de (3.17) y (3.18) se tiene que

$$\begin{aligned} (\mathbf{g}_i^J)^{(2)} \Big|_{h=0} &= 2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) = (1+1) \gamma(\tau_0) \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \Phi_j(\tau_0) \mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0), \\ (\mathbf{g}'_i^J)^{(1)} \Big|_{h=0} &= \sum_{j=1}^q a_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) = \gamma(\tau_0) \sum_{j=1}^q a_{i,j} \Phi_j(\tau_0) \mathbf{F}^J(\tau_0)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0). \end{aligned}$$

Para $n = 2$ basta realizar las mismas comprobaciones en (3.18) y (3.19) con la familia LNT_2 .

Supongamos ahora que la hipótesis de inducción sea cierta hasta orden $n-1$ y veamos que entonces se cumple para orden n .

Dado que $n > 2$, entonces de (3.14) y la Fórmula de Leibniz (3.15) se tiene

$$(\mathbf{g}_i)^{(n+1)} \Big|_{h=0} = \left(h^2 \sum_j \bar{a}_{i,j} \mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j) \right) \Big|_{h=0}^{(n+1)} = (n+1) n \sum_j \bar{a}_{i,j} (\mathbf{f}^J(\mathbf{g}_j, \mathbf{g}'_j))^{(n-1)} \Big|_{h=0}.$$

Aplicando (3.26), el término de la derecha resulta

$$(n+1) n \sum_j \bar{a}_{i,j} \sum_{u \in LNTS_n} \sum_{J_1, \dots, J_w} \frac{\partial^w \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}^{J_w}} \prod_{l=1}^m (\mathbf{g}_j^{J_l})^{(1)} \prod_{l=m+1}^k (\mathbf{g}_j^{J_l})^{(\delta_l+1)} \prod_{l=k+1}^w (\mathbf{g}_j^{J_l})^{(\delta_l)} \Big|_{h=0}.$$

Ahora bien, dado que se tiene $\delta_l \leq n-2$ para $l = m+1, \dots, k$ y $\delta_l \leq n-1$ para $l = k+1, \dots, w$, podemos aplicar la hipótesis de inducción en los dos últimos productos de la expresión anterior

y se puede aplicar (3.17) en el primero. Resulta así

$$\begin{aligned}
& (n+1)n \sum_j \bar{a}_{i,j} \sum_{u \in LNTS_n} \sum_{J_1, \dots, J_w} \frac{\partial^w \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}'^{J_w}} \prod_{l=1}^m c_j \mathbf{y}_0'^{J_l} \\
& \cdot \prod_{l=m+1}^k (\delta_l + 1) \sum_{\tau_l \in LNT_{\delta_l}} \gamma(\tau_l) \sum_{j_l} \bar{a}_{j,l} \Phi_{j_l}(\tau_l) \mathbf{F}^{J_l}(\tau_l)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \\
& \cdot \prod_{l=k+1}^w \sum_{\tau_l \in LNT_{\delta_l}} \gamma(\tau_l) \sum_{j_l} a_{j,l} \Phi_{j_l}(\tau_l) \mathbf{F}^{J_l}(\tau_l)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0).
\end{aligned}$$

Dado que los sumatorios son finitos, podemos reordenarlos coherentemente y resulta

$$\begin{aligned}
& (n+1) \sum_{u \in LNTS_n} \sum_{\tau_{m+1} \in LNT_{\delta_{m+1}}} \dots \sum_{\tau_w \in LNT_{\delta_w}} \left(n \prod_{l=m+1}^k (\delta_l + 1) \prod_{l=m+1}^w \gamma(\tau_l) \right) \\
& \cdot \sum_j \bar{a}_{i,j} \left(\sum_{j_{m+1}, \dots, j_w} c_j^m \prod_{l=m+1}^k \bar{a}_{j,l} \Phi_{j_l}(\tau_l) \prod_{l=k+1}^w a_{j,l} \Phi_{j_l}(\tau_l) \right) \\
& \cdot \left(\sum_{J_1, \dots, J_w} \frac{\partial^w \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}'^{J_w}} \prod_{l=1}^m \mathbf{y}_0'^{J_l} \prod_{l=m+1}^w \mathbf{F}^{J_l}(\tau_l)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right).
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Buscamos, de igual manera que en la demostración del Teorema 2.6, un N-árbol $\tau \in LNT_n$ constituido a partir de $\tau_{m+1}, \dots, \tau_w$ tal que satisfaga

$$\begin{aligned}
\gamma(\tau) &= n \prod_{l=m+1}^k (\delta_l + 1) \prod_{l=m+1}^w \gamma(\tau_l) \\
\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) &= \sum_{J_1, \dots, J_w} \frac{\partial^w \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^{J_1} \dots \partial \mathbf{y}'^{J_w}} \prod_{l=1}^m \mathbf{y}_0'^{J_l} \prod_{l=m+1}^w \mathbf{F}^{J_l}(\tau_l)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \\
\Phi_j(\tau) &= \sum_{j_{m+1}, \dots, j_w} c_j^m \prod_{l=m+1}^k \bar{a}_{j,l} \Phi_{j_l}(\tau_l) \prod_{l=k+1}^w a_{j,l} \Phi_{j_l}(\tau_l).
\end{aligned} \tag{3.29}$$

El N-árbol buscado se puede obtener si en $u \in LNTS_n$ se tiene en cuenta lo siguiente:

- las ramas constituidas exclusivamente por un nodos flaco hoja no se modifican,
- en las ramas con primer elemento flaco y con algún nodo gordo se sustituyen los nodos gordos por $\tau_{m+1}, \dots, \tau_k$ (notemos que, según la fórmula de Faá di Bruno adaptada (3.26), hay $k - m$ ramas de estas características y longitud $\delta_l = \varrho(\tau_l)$),
- las ramas con primer elemento gordo se sustituyen enteramente por $\tau_{k+1}, \dots, \tau_w$ (que también deben de casar por construcción).

Los índices del nuevo N-árbol se obtienen manteniendo el orden de los índices de u en cada τ_l .

Considerando la construcción por recurrencia (3.20) de los N-árboles, el árbol buscado es

$$\tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w] \in LNT_n.$$

Recordando los resultados (3.21), (3.22) y (3.24), el N-árbol τ cumple (3.29). Con lo cual, por la arbitrariedad de $u \in LNTS_n$ y $\tau_l \in LNT_{\delta_l}$ para $l = m + 1, \dots, w$, al considerar las sucesivas construcciones de τ se está recorriendo todo LNT_n y cada uno de estos N-árboles aparece una única vez. Se tiene pues la biyección

$$(u, t_{m+1}, \dots, t_w) \longleftrightarrow \tau = [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w],$$

que se puede observar en la Tabla 3.3.

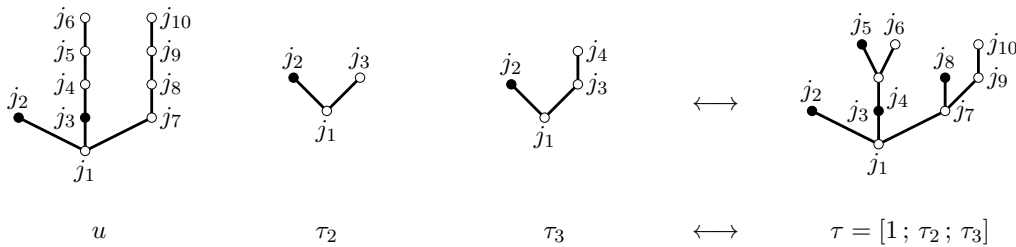


Tabla 3.3: Biyección $(u, t_{m+1}, \dots, t_w) \leftrightarrow [m; \tau_{m+1}, \dots, \tau_k; \tau_{k+1}, \dots, \tau_w]$.

Retomando (3.28), por lo apenas notado tenemos la expresión buscada

$$(\mathbf{g}_i^J)^{(n+1)} \Big|_{h=0} = (n+1) \sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \Phi_j(\tau) \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0).$$

Para $(\mathbf{g}'_i^J)^{(n)}$ el procedimiento es idéntico, solo habría que aplicar (2.12) en vez de (3.15) en un primer paso. Por lo tanto, se obtiene también

$$(\mathbf{g}'_i^J)^{(n)} \Big|_{h=0} = \sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{j=1}^q a_{i,j} \Phi_j(\tau) \mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0),$$

con lo que queda completo el proceso inductivo. \square

Dada ahora la similitud entre las fórmulas (3.14) de \mathbf{y}_1 con \mathbf{g}_i e \mathbf{y}'_1 con \mathbf{g}'_i , entonces se tiene la siguiente consecuencia del Teorema 3.8:

Corolario 3.9. Las aproximaciones numéricas \mathbf{y}_1 e \mathbf{y}'_1 proporcionadas por el RKN (3.14) sa-

tisfacen para cualquier $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1^{(n+1)} \Big|_{h=0} &= (n+1) \sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0), \\ \mathbf{y}_1'^{(n)} \Big|_{h=0} &= \sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Corolario 3.10. Las serie de Taylor asociadas a las aproximaciones numéricas $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}'_1$ del problema (3.6) obtenidas mediante un método RKN (3.14) se pueden expresar, utilizando (3.30), como

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + \mathbf{y}'_0 h + \sum_{n=2}^{\infty} \left(n \sum_{\tau \in LNT_{n-1}} \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &= \mathbf{y}_0 + \mathbf{y}'_0 h + \sum_{n=2}^{\infty} \left(n \sum_{\tau \in NT_{n-1}} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{y}'_1 \Big|_{h=0} &= \mathbf{y}'_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in LNT_n} \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &= \mathbf{y}'_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in NT_n} \alpha(\tau) \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

3.3. Condiciones de orden de un método RKN

Utilizando los resultados desarrollados en este capítulo podemos caracterizar el orden de un método RKN en función de los coeficientes que lo definen.

Si \mathbf{f} es suficientemente regular, de (3.12) y (3.31) obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_1 &= \sum_{n=2}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in NT_{n-1}} \alpha(\tau) \left[1 - n \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) \right] \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &= \sum_{n=1}^{p-1} \left(\sum_{\tau \in NT_n} \alpha(\tau) \left[1 - (\varrho(\tau) + 1) \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) \right] \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} \\ &\quad + \mathcal{O}(h^{p+1}). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Por otra parte, de (3.12) y (3.32) se tiene

$$\begin{aligned} \mathbf{y}'(t_0 + h) - \mathbf{y}'_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\tau \in NT_n} \alpha(\tau) \left[1 - \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) \right] \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &= \sum_{n=1}^p \left(\sum_{\tau \in NT_n} \alpha(\tau) \left[1 - \gamma(\tau) \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) \right] \mathbf{F}(\tau)(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}'_0) \right) \frac{h^n}{n!} \\ &\quad + \mathcal{O}(h^{p+1}). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Por lo tanto, de la expresión (3.3) del error local y de la caracterización (3.4) del orden, podemos establecer el siguiente resultado, en virtud de (3.33) y en (3.34):

Teorema 3.11 (Caracterización del orden de un RKN). *El método (3.1) tiene orden p para cualquier problema del tipo (3.6) si y sólo si para cada $\tau \in NT_n$, con $n \leq p - 1$, se verifica*

$$\sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) = \frac{1}{(\varrho(\tau) + 1) \gamma(\tau)}, \quad (3.35)$$

y para cada $\tau \in NT_n$, con $n \leq p$, se cumple

$$\sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}. \quad (3.36)$$

Demostración. Tal y como se argumentaba en el Teorema 2.8, las condiciones (3.35) y (3.36) son condiciones suficientes. Además, son condiciones necesarias debido a que los diferenciales elementales asociados a N-árboles diferentes son *independientes*. \square

En la Tabla 3.4 se incluyen las tres primeras familias de N-árboles.

Por ejemplo, para construir un método RKN de q etapas (3.2) que alcance orden 3, por el Teorema 3.11 y los parámetros de la Tabla 3.4, basta imponer las condiciones se recogen en la Tabla 3.5. Así pues, obtenemos 12 condiciones (no lineales) a imponer sobre los coeficientes del método para que sea de orden 3.

Como se observa en la Tabla 3.5, realmente los métodos RKN no aportan una gran ventaja frente a los métodos RK cuando se trata de resolver ecuaciones de segundo orden del tipo $\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}, \mathbf{y}')$, porque son más difíciles de diseñar: para alcanzar un cierto orden, los coeficientes del método no solo deben satisfacer las ecuaciones propias del método RK asociado (3.36), sino que además hay que exigir condiciones adicionales (3.35) en las que también intervienen los coeficientes $\{\bar{a}_{i,j}\}$ y $\{\bar{b}_i\}$. Sin embargo, para algunos tipos de ecuaciones, los métodos de Nystrom sí resultan ventajosos; de eso trata la sección siguiente [5].










$\varrho(\tau)$	N-Árbol τ	$\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}')$	$\gamma(\tau)$	$\Phi_j(\tau)$
1	τ_0 	\mathbf{f}^J	1	1
2	$[1; ;]$ 	$\sum_K \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{y}'^K$	2	c_j
	$[0; ; \tau_0]$ 	$\sum_K \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{f}^K$	2	$\sum_k a_{j,k}$
3	$[2; ;]$ 	$\sum_{K,L} \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^K \mathbf{y}'^L$	3	c_j^2
	$[1; ; \tau_0]$ 	$\sum_{K,L} \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^K \mathbf{f}^L$	3	$\sum_l c_j a_{j,l}$
	$[0; ; \tau_0, \tau_0]$ 	$\sum_{K,L} \frac{\partial \mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K \partial \mathbf{y}^L} \mathbf{f}^K \mathbf{f}^L$	3	$\sum_{k,l} a_{j,k} a_{j,l}$
	$[0; \tau_0;]$ 	$\sum_{K,L} \frac{\mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \mathbf{f}^K$	6	$\sum_k \bar{a}_{j,k}$
	$[0; ; [1; ;]]$ 	$\sum_{K,L} \frac{\mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \frac{\mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^L} \mathbf{y}'^L$	6	$\sum_k a_{j,k} c_k$
	$[0; ; [0; ; \tau_0]]$ 	$\sum_{K,L} \frac{\mathbf{f}^J}{\partial \mathbf{y}^K} \frac{\mathbf{f}^K}{\partial \mathbf{y}^L} \mathbf{f}^L$	6	$\sum_{k,l} a_{j,k} a_{k,l}$

Tabla 3.4: N-Árboles y parámetros involucrados en las condiciones de orden hasta orden 3.

	N-árbol	Condición (3.35)	Condición (3.36)
Orden 1:	τ_0	$\sum_j \bar{b}_j = \frac{1}{2}$	$\sum_j b_j = 1$
Orden 2:	$[1; ;]$	$\sum_j \bar{b}_j c_j = \frac{1}{6}$	$\sum_j b_j c_j = \frac{1}{2}$
	$[0; ; \tau_0]$	$\sum_{j,k} \bar{b}_j a_{j,k} = \frac{1}{6}$	$\sum_j b_j a_{j,k} = \frac{1}{2}$
Orden 3:	$[2; ;]$		$\sum_j b_j c_j^2 = \frac{1}{3}$
	$[1; ; \tau_0]$		$\sum_{j,k} b_j c_j a_{j,k} = \frac{1}{3}$
	$[0; ; \tau_0, \tau_0]$		$\sum_{j,k,l} b_j a_{j,k} a_{j,l} = \frac{1}{3}$
	$[0; \tau_0;]$		$\sum_{j,k} b_j \bar{a}_{j,k} = \frac{1}{6}$
	$[0; ; [1; ;]]$		$\sum_{j,k} b_j a_{j,k} c_k = \frac{1}{6}$
	$[0; ; [0; ; \tau_0]]$		$\sum_{j,k,l} b_j a_{j,k} a_{k,l} = \frac{1}{6}$

Tabla 3.5: Condiciones de orden 3 para un RKN.

3.4. Métodos de Nyström para ecuaciones $\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$

En el *caso especial* en que la ecuación diferencial del problema (3.1) no dependa de \mathbf{y}' , es decir, se tiene una ecuación diferencial de la forma

$$\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad (3.37)$$

entonces el método RKN (3.2) resulta:

$$\begin{cases} \mathbf{k}'_i = \mathbf{f} \left(t_0 + c_i h, \mathbf{y}_0 + c_i h \mathbf{y}'_0 + h^2 \sum_{j=1}^q \bar{a}_{i,j} \mathbf{k}'_j \right), & i = 1, 2, \dots, q, \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \mathbf{y}'_0 + h^2 \sum_{i=1}^q \bar{b}_i \mathbf{k}'_i, \\ \mathbf{y}'_1 = \mathbf{y}'_0 + h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{k}'_i. \end{cases} \quad (3.38)$$

Se dice que un problema de la forma (3.37) es un *problema especial* y asimismo, a los métodos como (3.38) se les llama *métodos de Nyström especiales*. Este tipo de ecuaciones es habitual en problemas en los que la aceleración de un cuerpo dependa de su posición exclusivamente, como en el *problema de los tres cuerpos* de la Mecánica Celeste, o al modelar el movimiento de dos péndulos aparejados no lineales [5].

Los coeficientes $\{a_{ij}\}$ ya no toman partido en el método, por lo que pueden ser obviados. El resto de coeficientes que definen al RKN se recogen en la Tabla de Butcher simplificada [3]

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

Como \mathbf{f} es independiente de \mathbf{y}' , sus derivadas con respecto de \mathbf{y}' se anulan. En concreto, derivar con respecto de \mathbf{y}' se representa en el N-árbol como que aparezcan dos nodos gordos conectados, luego podremos obviar todos aquellos N-árboles que presenten tal situación, ya que los diferenciales elementales (3.9) a los que están asociados se anulan. Con lo cual, no es necesario considerar las familias NT_n en su totalidad, sino que nos podemos restringir a un subconjunto de estas [3].

Definición 3.9. Decimos que un N-árbol es un *árbol de Nyström especial* (abreviadamente *SN-árbol*) si sus nodos gordos solo tienen hijos flacos. El conjunto de todos los SN-árboles de orden n se denota por SNT_n .

De esta manera, como para la ecuación diferencial (3.37) se anulan los diferenciales elementales asociados a $\tau \in NT_n \setminus SNT_n$, las condiciones de orden (3.35), (3.35) se simplifican como sigue:

Teorema 3.12 (Caracterización del orden de un RKN especial). *El método (3.1) aplicado a (3.37) tiene orden p para cualquier problema del tipo (3.37) si y sólo si para cada $\tau \in SNT_n$, con $n \leq p - 1$, se verifica*

$$\sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) = \frac{1}{(\varrho(\tau) + 1) \gamma(\tau)}, \quad (3.39)$$

y para cada $\tau \in SNT_n$, con $n \leq p$, se cumple

$$\sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}. \quad (3.40)$$

Demostración. Basta tener en cuenta los comentarios precedentes y el Teorema 3.11. □

En la Tabla 3.6 se incluyen los SN-árboles hasta orden 4. Notemos que, dado que \mathbf{f} no depende de \mathbf{y}' , se puede adoptar la notación (2.5) del Capítulo 2 para los diferenciales elementales.






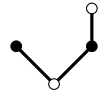

$\varrho(\tau)$	SN-Árbol τ	$\mathbf{F}^J(\tau)(\mathbf{y}, \mathbf{y}')$	$\gamma(\tau)$	$\Phi_j(\tau)$
1	τ_0 	\mathbf{f}^J	1	1
2	$[1; ;]$ 	$\sum_K \mathbf{f}_K^J \mathbf{y}'^K$	2	c_j
3	$[2; ;]$ 	$\sum_{K,L} \mathbf{f}_{KL}^J \mathbf{y}'^K \mathbf{y}'^L$	3	c_j^2
	$[0; \tau_0;]$ 	$\sum_{K,L} \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_L^K$	6	$\sum_k \bar{a}_{j,k}$
4	$[3; ;]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KLM}^J \mathbf{y}'^K \mathbf{y}'^L \mathbf{y}'^M$	4	c_j^3
	$[1; \tau_0;]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_{KM}^J \mathbf{y}'^K \mathbf{f}_L^M$	8	$\sum_l c_j \bar{a}_{j,l}$
	$[0; [1; ;];]$ 	$\sum_{K,L,M} \mathbf{f}_K^J \mathbf{f}_M^L \mathbf{y}'^M$	24	$\sum_l \bar{a}_{j,l} c_l$

Tabla 3.6: SN-Árboles y parámetros involucrados en las condiciones de orden hasta orden 4 para problemas $\mathbf{y}'' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$.

La cantidad de condiciones a imponer para poder asegurar orden p es notablemente inferior al considerar (3.37) con respecto a un PVI genérico, debido a que las familias SNT_n (a partir de orden 2) tienen muchos menos elementos que NT_n [3].

Si nos planteamos esta vez la construcción de un método RKN especial de q etapas descrito como en (3.38) que alcance orden 3, las condiciones a imponer se recogen en la Tabla 3.7. En

este caso, el número de condiciones a imponer se reduce de 12 condiciones en un RKN genérico a 6 condiciones para el RKN especial.

	N-árbol	Condición (3.39)	Condición (3.40)
Orden 1:	τ_0	$\sum_j \bar{b}_j = \frac{1}{2}$	$\sum_j b_j = 1$
Orden 2:	$[1; ;]$	$\sum_j \bar{b}_j c_j = \frac{1}{6}$	$\sum_j b_j c_j = \frac{1}{2}$
Orden 3:	$[2; ;]$ $[0; \tau_0;]$		$\sum_j b_j c_j^2 = \frac{1}{3}$ $\sum_{j,k} b_j \bar{a}_{j,k} = \frac{1}{6}$

Tabla 3.7: Condiciones de orden 3 para un RKN Especial.

Se pueden reducir aún más si consideramos la siguiente *hipótesis simplificadora*.

Lema 3.13. *Bajo la hipótesis*

$$\bar{b}_i = b_i(1 - c_i), \quad i = 1, \dots, q, \quad (3.41)$$

la condición (3.40) implica (3.39).

Demostración. Sean τ un SN-árbol de orden $\varrho(\tau) \leq p - 1$ y u el SN-árbol obtenido añadiendo un nuevo nodo flaco a la raíz de τ .

Por (3.24) se tiene $\Phi_i(u) = c_i \Phi_i(\tau)$, luego por (3.41)

$$\bar{b}_i \Phi_i(\tau) = \frac{\bar{b}_i}{c_i} \Phi_i(u) = \frac{b_i}{c_i} \Phi_i(u) - b_i \Phi_i(u) = b_i \Phi_i(\tau) - b_i \Phi_i(u).$$

Además, de (3.22) y notando que los N-árboles hijos de u y τ coinciden, pero u tiene un nodo flaco hoja más en la raíz (luego $\varrho(u) = \varrho(\tau) + 1$), se obtiene $\gamma(u) = \frac{\varrho(\tau)+1}{\varrho(\tau)} \gamma(\tau)$.

En suma, si partimos de (3.40) se satisface la condición (3.39):

$$\sum_{i=1}^q \bar{b}_i \Phi_i(\tau) = \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(\tau) - \sum_{i=1}^q b_i \Phi_i(u) = \frac{1}{\gamma(\tau)} - \frac{1}{\gamma(u)} = \frac{1}{(\varrho(\tau) + 1)\gamma(\tau)}. \quad \square$$

Se pueden considerar más hipótesis simplificadoras (ver [5]), pero no se incluyen aquí porque exceden de los propósitos de este trabajo.

Las condiciones a imponer para que un método RKN especial (3.38) cumpliendo la hipótesis simplificadora (3.41) alcance orden 3 se recogen en la Tabla 3.8.

	N-árbol	Condición (3.40)
Orden 1:	τ_0	$\sum_j b_j = 1$
Orden 2:	$[1; ;]$	$\sum_j b_j c_j = \frac{1}{2}$
Orden 3:	$[2; ;]$	$\sum_j b_j c_j^2 = \frac{1}{3}$
	$[0; \tau_0;]$	$\sum_{j,k} b_j \bar{a}_{j,k} = \frac{1}{6}$

Tabla 3.8: Condiciones de orden 3 para un RKN Especial satisfaciendo (3.41).

En este caso, el número de condiciones se reduce a 4, lo que supone una importante relajación respecto del caso general.

Capítulo 4

Construcción de un método RKN y experimentos numéricos

En este capítulo se hace uso de los resultados teóricos desarrollados en el Capítulo 3 para construir un método de Nyström especial que sea explícito, de 2 etapas y de tercer orden. Posteriormente, se implementa el método en MatLab y se realizan varios experimentos numéricos para evaluar su comportamiento y compararlo con otros métodos de integración numérica.

4.1. Construcción de un método RKN especial

Consideramos un método RKN especial (3.38) explícito de $q = 2$ etapas. Además, supondremos a priori (3.41). Tal método viene descrito por la tabla de Butcher

$$\begin{array}{c|cc} c_1 & 0 & \\ c_2 & \bar{a}_{21} & 0 \\ \hline & b_1(1-c_1) & b_2(1-c_2) \\ \hline & b_1 & b_2 \end{array}. \quad (4.1)$$

Imponiendo para este método las condiciones de la Tabla 3.8, obtenemos el siguiente sistema de cuatro ecuaciones no lineales con incógnitas $c_1, c_2, \bar{a}_{21}, b_1$ y b_2 :

$$b_1 + b_2 = 1, \quad b_1 c_1 + b_2 c_2 = \frac{1}{2}, \quad b_1 c_1^2 + b_2 c_2^2 = \frac{1}{3}, \quad b_2 \bar{a}_{2,1} = \frac{1}{6}.$$

De aquí se obtiene una familia uniparamétrica de métodos, con coeficientes

$$b_1 = \frac{1}{12(c_1^2 - c_1 + \frac{1}{3})}, \quad b_2 = 1 - b_1, \quad c_2 = \frac{\frac{1}{2} - b_1 c_1}{(1 - b_1)}, \quad \bar{a}_{2,1} = \frac{1}{6(1 - b_1)},$$

donde $c_1 \neq \frac{1}{2}$ (para que $b_1 \neq 1$). La familia de tales métodos viene descrita por la tabla simplificada de Butcher:

$$\begin{array}{c|cc}
 c_1 & 0 & \\
 \frac{\frac{1}{2}-b_1c_1}{(1-b_1)} & \frac{1}{6(1-b_1)} & 0 \\
 \hline
 & b_1(1-c_1) & (1-b_1)\left(1-\frac{\frac{1}{2}-b_1c_1}{(1-b_1)}\right) \\
 \hline
 & b_1 & (1-b_1)
 \end{array} \quad (4.2)$$

En estos casos, es usual imponer $c_1 = 0$. Así, el método (4.1) resulta

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & 0 & \\
 \frac{2}{3} & \frac{2}{9} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}
 \end{array} \quad \left\{ \begin{array}{l}
 \mathbf{k}'_1 = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0), \\
 \mathbf{k}'_2 = \mathbf{f}\left(t_0 + \frac{2}{3}h, \mathbf{y}_0 + \frac{2}{3}h\mathbf{y}'_0 + \frac{2}{9}h^2\mathbf{k}'_1\right), \\
 \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\mathbf{y}'_0 + h^2\left(\frac{1}{4}\mathbf{k}'_1 + \frac{1}{4}\mathbf{k}'_2\right), \\
 \mathbf{y}'_1 = \mathbf{y}'_0 + h\left(\frac{1}{4}\mathbf{k}'_1 + \frac{3}{4}\mathbf{k}'_2\right).
 \end{array} \right. \quad (4.3)$$

4.2. Experimentos numéricos

En esta sección se compara el rendimiento de cuatro métodos de integración numérica para un problema especial. Consideremos los siguientes métodos:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c|cc}
 0 & 0 & \\
 \frac{2}{3} & \frac{2}{9} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}
 \end{array} \\
 \text{RKN especial} \\
 q = 2, \text{ orden} = 3
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{c|cc|cc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{2}{3} & -\frac{1}{9} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\
 \hline
 & \frac{2}{9} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4}
 \end{array} \\
 \text{RKN general} \\
 q = 3, \text{ orden} = 3
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{c|cc}
 0 & 0 & \\
 \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\
 \hline
 & \frac{2}{3} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4}
 \end{array} \\
 \text{RK Heun} \\
 q = 3, \text{ orden} = 3
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{c|cc|cc}
 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\
 \hline
 & \frac{2}{9} & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\
 \hline
 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4}
 \end{array} \\
 \text{RKN Heun} \\
 q = 3, \text{ orden} = 3
 \end{array}
 \end{array}$$

El primero es el método (4.3) de RKN especial que acabamos de construir; el segundo es un método RKN estándar de $q = 3$ etapas y tercer orden, obtenido de [4]; el tercero es el método de Heun, que es un RK de $q = 3$ etapas y tercer orden [9]; el cuarto es el mismo método de Heun pero implementado como un método de Nyström (observemos (1.16), (1.17) y (1.12)).

Para evaluar estos métodos se considera el PVI especial dado por

$$\left\{ \begin{array}{l}
 y'' = (\cos^2 t - \sin t)y, \quad \text{para } t \in [0, 1], \\
 y(t_0) = 1, \\
 y'(t_0) = 1,
 \end{array} \right. \quad (4.4)$$

cuya solución analítica es

$$y(t) = e^{\sin t}, \quad t \in [0, 1].$$

Los resultados se recogen en la Tabla 4.1.

En ella, N denota el número de subintervalos de la partición de $[0, 1]$; h es el paso, que es constante; $Neval$ es el número de evaluaciones de la función \mathbf{f} realizadas por el algoritmo; $\text{máx } |e_n|$ es el máximo de los errores globales asociados a la solución \mathbf{y} del problema y $\text{máx } |e'_n|$ es el máximo de los errores globales asociados a la primera derivada \mathbf{y}' de la solución.

		RKN Especial				
N	h	$Neval$	$\text{máx } e_n $	$\text{máx } e'_n $	$\text{máx } e_n /h^3$	$\text{máx } e'_n /h^3$
20	$5.000 \cdot 10^{-2}$	40	$5.950 \cdot 10^{-6}$	$2.548 \cdot 10^{-6}$	$4.759 \cdot 10^{-2}$	$2.039 \cdot 10^{-2}$
80	$1.250 \cdot 10^{-2}$	160	$9.186 \cdot 10^{-8}$	$3.849 \cdot 10^{-8}$	$4.703 \cdot 10^{-2}$	$1.971 \cdot 10^{-2}$
320	$3.125 \cdot 10^{-3}$	640	$1.431 \cdot 10^{-9}$	$6.052 \cdot 10^{-10}$	$4.690 \cdot 10^{-2}$	$1.983 \cdot 10^{-2}$
1280	$7.813 \cdot 10^{-4}$	2560	$2.235 \cdot 10^{-11}$	$9.471 \cdot 10^{-12}$	$4.686 \cdot 10^{-2}$	$1.986 \cdot 10^{-2}$
		RKN General				
N	h	$Neval$	$\text{máx } e_n $	$\text{máx } e'_n $	$\text{máx } e_n /h^3$	$\text{máx } e'_n /h^3$
20	$5.000 \cdot 10^{-2}$	60	$5.950 \cdot 10^{-6}$	$2.548 \cdot 10^{-6}$	$4.759 \cdot 10^{-2}$	$2.039 \cdot 10^{-2}$
80	$1.250 \cdot 10^{-2}$	240	$9.186 \cdot 10^{-8}$	$3.849 \cdot 10^{-8}$	$4.703 \cdot 10^{-2}$	$1.971 \cdot 10^{-2}$
320	$3.125 \cdot 10^{-3}$	960	$1.431 \cdot 10^{-9}$	$6.052 \cdot 10^{-10}$	$4.690 \cdot 10^{-2}$	$1.983 \cdot 10^{-2}$
1280	$7.813 \cdot 10^{-4}$	3840	$2.235 \cdot 10^{-11}$	$9.471 \cdot 10^{-12}$	$4.686 \cdot 10^{-2}$	$1.986 \cdot 10^{-2}$
		RK Heun				
N	h	$Neval$	$\text{máx } e_n $	$\text{máx } e'_n $	$\text{máx } e_n /h^3$	$\text{máx } e'_n /h^3$
20	$5.000 \cdot 10^{-2}$	120	$7.525 \cdot 10^{-6}$	$3.182 \cdot 10^{-6}$	$6.020 \cdot 10^{-2}$	$2.546 \cdot 10^{-2}$
80	$1.250 \cdot 10^{-2}$	480	$1.193 \cdot 10^{-7}$	$5.246 \cdot 10^{-8}$	$6.109 \cdot 10^{-2}$	$2.686 \cdot 10^{-2}$
320	$3.125 \cdot 10^{-3}$	1920	$1.871 \cdot 10^{-9}$	$8.302 \cdot 10^{-10}$	$6.131 \cdot 10^{-2}$	$2.720 \cdot 10^{-2}$
1280	$7.813 \cdot 10^{-4}$	7680	$2.926 \cdot 10^{-11}$	$1.301 \cdot 10^{-11}$	$6.136 \cdot 10^{-2}$	$2.729 \cdot 10^{-2}$
		RKN Heun				
N	h	$Neval$	$\text{máx } e_n $	$\text{máx } e'_n $	$\text{máx } e_n /h^3$	$\text{máx } e'_n /h^3$
20	$5.000 \cdot 10^{-2}$	60	$7.525 \cdot 10^{-6}$	$3.182 \cdot 10^{-6}$	$6.020 \cdot 10^{-2}$	$2.546 \cdot 10^{-2}$
80	$1.250 \cdot 10^{-2}$	240	$1.193 \cdot 10^{-7}$	$5.246 \cdot 10^{-8}$	$6.109 \cdot 10^{-2}$	$2.686 \cdot 10^{-2}$
320	$3.125 \cdot 10^{-3}$	960	$1.871 \cdot 10^{-9}$	$8.302 \cdot 10^{-10}$	$6.131 \cdot 10^{-2}$	$2.720 \cdot 10^{-2}$
1280	$7.813 \cdot 10^{-4}$	3840	$2.926 \cdot 10^{-11}$	$1.301 \cdot 10^{-11}$	$6.136 \cdot 10^{-2}$	$2.729 \cdot 10^{-2}$

Tabla 4.1: Resultados numéricos de los algoritmos.

La base teórica presentada en este trabajo nos asegura a priori el orden 3 de cada uno de los

cuatro métodos considerados (basta comprobar las condiciones de orden pertinentes para cada uno de ellos). La comprobación de que, de acuerdo al Teorema 1.1, los métodos estudiados son convergentes de orden 3 se puede corroborar en las columnas $\max |e_n|/h^3$ y $\max |e'_n|/h^3$ de la Tabla 4.1, que parecen estabilizarse y alcanzar un límite finito y no nulo en cada uno de los métodos.

Dado que los métodos implementados son los cuatro de tercer orden, nos interesa valorar la eficiencia de cada uno de ellos, ya que el error global decrecerá a un ritmo parecido a medida que se refine la partición. Por ello compararemos el error global máximo en el que incurre cada método con el número de evaluaciones de la función en (4.4) requeridas para alcanzar tal error. El gráfico de los errores absolutos cometidos por cada método respecto del número de evaluaciones se incluye en la Figura 4.1.

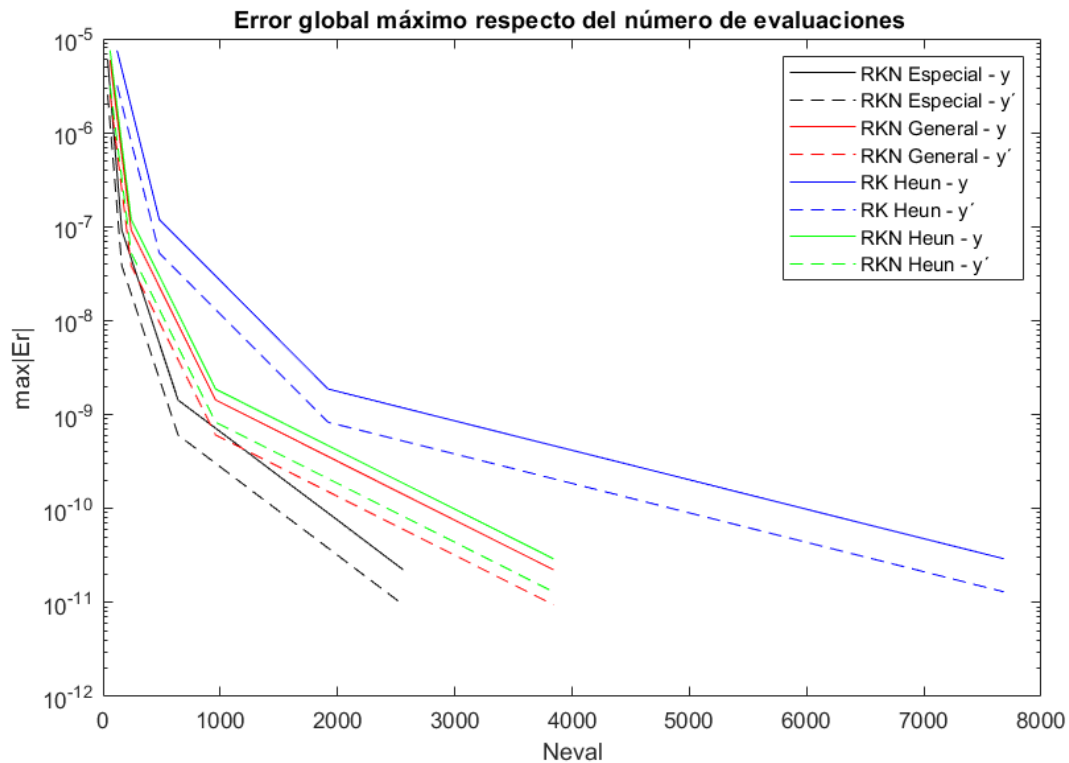


Figura 4.1: Gráfico de la evolución del error máximo respecto del número de evaluaciones de la función para cada método.

En la Figura 4.1 se puede observar que el método RKN especial es significativamente más eficiente que el RKN general y que el Método de Heun (visto como RK y RKN). Esto es debido a que gracias a la teoría desarrollada, y particularizando el problema estudiado a un problema especial, hemos podido construir un método de orden 3 con solo 2 etapas, lo que es imposible de alcanzar en condiciones generales, tanto para métodos de RK como RKN. En contraste con el RKN

especial, los otros tres métodos son de 3 etapas, lo que los hace menos eficientes; cuestión lógica, ya que tal método está construido exclusivamente para problemas del tipo (3.37), mientras que el resto son métodos que se pueden utilizar para cualquier tipo de problema.

Por otra parte, el método RKN general es a su vez más eficiente que el Método de Heun (visto como RK y RKN). Esta diferencia es sobre todo notable en el RK porque, tal y cómo se comentaba en el Capítulo 1, en el método RK es necesario doblar las dimensiones del problema para poder operar con el PVI de 2º orden, mientras que en los RKN esto no es necesario. Precisamente el aumento de las dimensiones del problema se refleja en que, utilizando directamente el método de Heun, resulta necesario hacer el doble de evaluaciones de \mathbf{f} . Notemos no obstante que si consideramos el método de Heun como un RKN, entonces este problema no se da, y utilizar el RKN genérico no supone ventaja notable con respecto al método de Heun implementado como RKN. De hecho, ambos tienen un comportamiento muy similar y prácticamente se solapan en la gráfica.

Resulta reseñable que, casualmente, los errores globales del RKN especial y del RKN estándar coinciden, lo que sugiere que, aunque el primero sea más eficiente, ambos métodos se comportan de igual manera. Y es que, el método RKN general que hemos considerado, aplicado a un problema especial, resulta:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}'_1 = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0), \\ \mathbf{k}'_2 = \mathbf{f}\left(t_0 + \frac{2}{3}h, \mathbf{y}_0 + \frac{2}{3}h\mathbf{y}'_0 - \frac{1}{9}h^2\mathbf{k}'_1\right), \\ \mathbf{k}'_3 = \mathbf{f}\left(t_0 + \frac{2}{3}h, \mathbf{y}_0 + \frac{2}{3}h\mathbf{y}'_0 + \frac{2}{9}h^2\mathbf{k}'_1\right), \\ \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h\mathbf{y}'_0 + h^2\left(\frac{1}{4}\mathbf{k}'_1 + \frac{1}{4}\mathbf{k}'_3\right), \\ \mathbf{y}'_1 = \mathbf{y}'_0 + h\left(\frac{1}{4}\mathbf{k}'_1 + \frac{3}{4}\mathbf{k}'_3\right). \end{array} \right.$$

Las aproximaciones \mathbf{y}_1 e \mathbf{y}'_1 coinciden con las proporcionadas por el RKN especial (4.3), aunque el método calcula (a pesar de no utilizarse para problemas especiales) la etapa \mathbf{k}_2 .

Por otra parte, los errores asociados al método de Heun visto como RK y RKN coinciden, ya que sencillamente son reformulaciones de un mismo método numérico.

Bibliografía

- [1] Butcher, J.C. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons, 3ª edición, 2016.
- [2] Calvo, M., Montijano, J.I. y Rández, L. *Curso de análisis numérico: métodos de Runge-Kutta para la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias*. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Zaragoza, 1990.
- [3] Calvo, M.P. Nyström methods. En *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, págs. 1080–1087. Springer, 2015.
- [4] Chawla, M.M. y Sharma, S.R. Families of three-stage third order Runge-Kutta-Nyström methods for $y'' = f(x, y, y')$. *Journal of Australian Mathematical Society*, págs. 375–386, 1985.
- [5] Hairer, E., Nørsett, S.P., y Wanner, G. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*. Número 8 en Springer Series in Computational Mechanics. Springer, 2ª edición, 1993.
- [6] Hairer, E. y Wanner, G. A theory for Nyström methods. *Numerische Mathematik*, 25:383–400, 1976.
- [7] Lambert, J. *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems*. John Wiley & Sons, 1991.
- [8] Nyström, E.J. *Ueber die numerische integration von Differentialgleichungen*. Acta Societatis scientiarum Fennicae. Druck der Finnischen literaturgesellschaft, 1925.
- [9] Pérez, P. Notas sobre la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias. Publicado en formato PDF, Oviedo, 2020.
- [10] Rabiei, F., Ismail, F., Norazak, S. y Emadi, S. Numerical solution of second-order ordinary differential equations by improved Runge-Kutta Nyström method. *International Journal of Mathematical and Computational Sciences*, 6(9):1372–1375, 2012.
- [11] Ross, K.A. *Elementary Analysis: The Theory of Calculus*. Springer, 2ª edición, 2013.