



UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE MATEMÁTICA

Árboles, ecuaciones diferenciales ordinarias y el método autónomo de Runge-Kutta.

Trabajo Especial de Grado presentado ante la ilustre Universidad Central de Venezuela por el **Br. Nicolás Boaventura** para optar al título de Licenciado en Matemática.

Tutor: Liendo Jean Carlos.

Caracas, Venezuela
Octubre del 2015

Nosotros, los abajo firmantes, designados por la Universidad Central de Venezuela como integrantes del Jurado Examinador del Trabajo Especial de Grado titulado “**Árboles, ecuaciones diferenciales ordinarias y el método autónomo de Runge-Kutta.**”, presentado por el **Br. Nicolas Boaventura**, titular de la Cédula de Identidad **18.368.155**, certificamos que este trabajo cumple con los requisitos exigidos por nuestra Magna Casa de Estudios para optar al título de **Licenciado en Matemática**.



Jean Carlos Liendo
Tutor



Juan Guevara
Jurado



Miguel Mendez
Jurado

Agradecimientos

A mis padres por apoyarme desde el inicio.

A Maikel y Vanessa por acompañarme durante toda la carrera.

A Sebastian y Diana por su amistad.

Al profesor Jean Carlos por su invaluable ayuda.

Y a todas las personas que de una manera u otra me brindaron su apoyo.

Resumen

Este trabajo presenta una interpretación alternativa de lo publicado por John Butcher en [3]. En dicha publicación Butcher reseña el rol que cumplen los árboles en la teoría de los métodos de Runge-Kutta al resolver la ecuación implícita $g = y_0 + hL(f \circ g)$. En este trabajo resolvemos dicha ecuación usando la teoría de series formales presentada por Miguel Méndez en [8] la cual nos permite expresar su solución en términos de árboles con cierta configuración. Esta interpretación da paso a la obtención de la serie de Taylor de la solución de un problema de valor inicial autónomo y la serie de Taylor de un paso para un método de Runge-Kutta. Posteriormente, al comparar ambas series se obtienen las condiciones de orden para el método de Runge-Kutta en términos de árboles.

Introducción

Las ecuaciones diferenciales son un área de particular interés en el estudio del cálculo debido a su amplia utilidad en la resolución de problemas en las áreas de ingeniería y física. Sin embargo, muchas de las ecuaciones diferenciales de importancia práctica no pueden ser resueltas usando métodos analíticos del cálculo, haciendo vital el desarrollo de métodos alternativos que permitan obtener soluciones para estos problemas.

Estos métodos se basan sobre la consideración de que un problema de valor inicial

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

tiene por solución a la función y , la cual puede ser aproximada alrededor de x_0 usando su desarrollo en serie de Taylor

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k$$

El primero de estos métodos fue desarrollado por Euler y a pesar de ser un método sencillo de aplicar sufre de ser muy poco preciso al obtener varias aproximaciones sucesivas. El método de Euler fue mejorado por Heun, y posteriormente Runge (1895) y Kutta (1901) idearon un método mucho más preciso para aproximar la solución de una ecuación diferencial ordinaria con valor inicial. Desde entonces los métodos explícitos de Runge-Kutta han sido ampliamente utilizados para la resolución de estos problemas.

En el estudio de estos métodos aparece un conjunto de condiciones algebraicas que debe satisfacer para ser de un orden determinado. Estas condiciones algebraicas pueden ser escritas como un conjunto de ecuaciones en donde el lado izquierdo son ciertos polinomios en los coeficientes del método y el lado derecho son ciertos números racionales.

Es posible interpretar las ecuaciones diferenciales desde un contexto combinatorio, los grafos permiten representar conexiones entre diversos objetos de manera arbitraria. Entre ellos aparecen los árboles como un tipo especial de grafo que permite jerarquizar las conexiones entre objetos de manera recursiva. Arthur Cayley en [10] utiliza la estructura de árboles crecientes para hallar las derivadas de composición de funciones. Otros

investigadores han trabajado usando el mismo principio de Cayley, entre ellos A. Joyal, F. Bergeron y G. Labelle en los años 80 introducen en varios trabajos una técnica combinatoria de la derivada para la comprensión de las operaciones conjuntísticas o combinatorias que están detrás de las operaciones usuales entre series formales. Posteriormente, Leroux y Viennot dieron una interpretación combinatoria general a la solución de una ecuación diferencial autónoma en términos de árboles crecientes. M. Méndez en [8] hace un refinamiento de varios de estos trabajos que conciernen al cálculo diferencial y a la resolución de ecuaciones diferenciales. Usando estas herramientas obtenemos los coeficientes de la serie de Taylor de la solución de problemas autónomos y no autónomos.

J. Butcher es un matemático neozelandés que se especializa en métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales, en [3] reseña el rol que cumplen los árboles en la teoría de los métodos de Runge-Kutta. En este trabajo, se presentan las ideas de Butcher en dicha publicación, es decir, cómo utilizar la teoría de árboles para obtener las condiciones de orden para los métodos de Runge-Kutta y posteriormente se presentan ejemplos de cuarto y quinto orden.

En el primer capítulo se cubren los aspectos preliminares hablando de manera resumida sobre el teorema de Taylor en una y dos variables, así como también la teoría de ecuaciones diferenciales y los métodos numéricos más comunes que permiten hallar aproximaciones a sus soluciones. En el segundo capítulo se introduce la teoría de grafos, haciendo énfasis en los árboles como un tipo particular de grafo de especial importancia, así como varios resultados vitales para obtener los resultados importantes de este trabajo. En el tercer capítulo se presenta la teoría de series formales usando la interpretación dada por Méndez en [8], esta interpretación no funtorial permite entender las operaciones entre series formales desde un punto de vista combinatorio, es decir, como conjuntos con ciertas configuraciones. En el cuarto capítulo usamos la ecuación implícita presentada por J. Butcher en [3]:

$$g = y_0 + hL(f \circ g)$$

en donde g es una función de variable real continua en $[0, 1]$, f es una función a variable real que satisface la condición de Lipschitz, L es un operador lineal definido sobre el espacio de las funciones continuas cuyo dominio es $[0, 1]$ y $h \in (0, 1)$. Nuestra técnica consiste en reescribir y resolver esta ecuación considerando la serie de Taylor de f y expandiendo a g como una serie formal con parámetro h . Utilizando los resultados de los capítulos 2 y 3 demostramos que los coeficientes de g pueden escribirse en términos de árboles con cierta configuración. Como caso particular, se pueden obtener simultáneamente la serie de Taylor de la solución de un problema autónomo y la serie de Taylor de un paso para un método de Runge-Kutta. Comparando ambas series se determinan las condiciones de orden sobre los coeficientes de un método de Runge-Kutta, las cuales están totalmente caracterizadas por la estructura de los árboles.

Contenido

1. Preliminares	9
1.1. Teorema de Taylor	9
1.1.1. Teorema de Taylor en una variable	11
1.1.2. Teorema de Taylor en dos variables	14
1.2. Ecuaciones diferenciales	17
1.2.1. Problema de valor inicial	20
1.2.2. Existencia y unicidad	21
1.3. Métodos numéricos	25
1.3.1. Método de Euler	25
1.3.2. Error en los métodos numéricos	28
1.3.3. Método de Euler mejorado	30
1.3.4. Métodos de Runge-Kutta	32
1.3.5. Método de Runge-Kutta de cuarto orden	36
2. Árboles	39
2.1. Grafos	39
2.2. Árboles	41
2.3. Reetiquetamiento de árboles	44
3. Series formales	56
3.1. Series formales en una variable	56
3.1.1. Operaciones fundamentales con series formales	58
3.1.2. Interpretación combinatoria de las series formales en una variable	59
3.1.3. Topología de las series formales	62
3.1.4. Substitución y exponencial	64
3.2. Series formales en dos variables	67
4. Condiciones de orden para el método de Runge-Kutta	77
4.1. Solución analítica de un PVI	77
4.1.1. El caso univariado	83
4.1.2. El caso no autónomo	91
4.2. El método autónomo de Runge-Kutta de s etapas	94
4.3. Interpretación arbórea de $\Phi_i(t)$	98

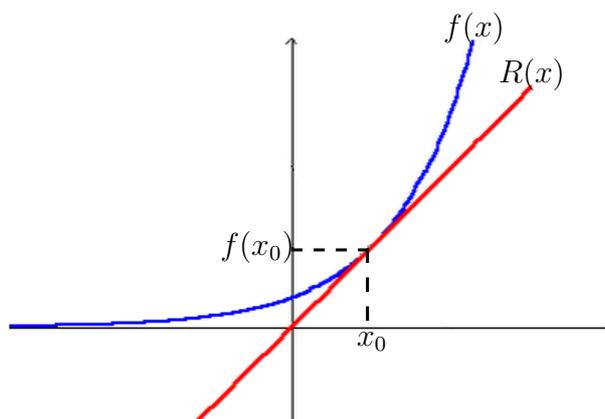
4.4. Método explícito de Runge-Kutta autónomo	102
4.5. Métodos explícitos de cuarto y quinto orden	105
4.5.1. Métodos de cuarto orden	105
4.5.2. Un método de orden 5	107
Bibliografía	108

Capítulo 1

Preliminares

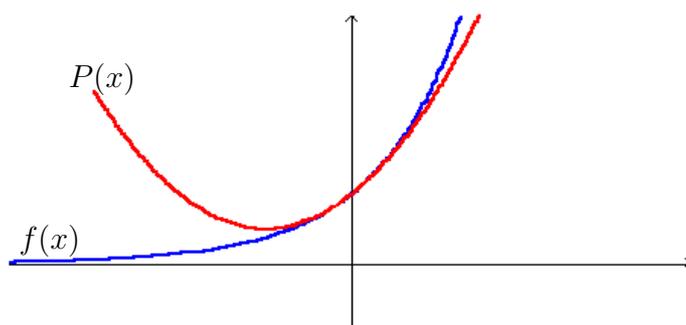
1.1. Teorema de Taylor

Sabemos que la recta tangente, como la mejor aproximación lineal a la gráfica de f en las cercanías del punto de tangencia $(x_0, f(x_0))$, es aquella recta que pasa por el mencionado punto y tiene la misma pendiente que la curva en ese punto, lo que hace que la recta tangente y la curva sean prácticamente indistinguibles en las cercanías del punto de tangencia. Gráficamente podemos observar que la curva se acerca “suavemente” a la recta en este entorno, de tal manera que “de todas las rectas que pasan por el punto, es esta recta la que más se parece a la curva cerca del punto”.



Como observamos en la figura anterior, si x se encuentra “lejos” de x_0 , la recta tangente ya no funciona como aproximador. Parece pues natural preguntarnos por otra función (no lineal) que sirva a nuestros propósitos. La recta tangente es un polinomio de grado 1, el más sencillo tipo de función que podemos encontrar, por lo que podemos tratar de ver si es posible encontrar un polinomio de grado dos que nos sirva para aproximar nuestra función en un rango más grande que la recta tangente.

Veamos que sucede si en lugar de aproximarnos con una recta tratamos de hacerlo con una parábola, es decir tratemos de encontrar de todas las parábolas que pasan por $(x_0, f(x_0))$, la que mejor aproxima a la curva, es decir tratemos de encontrar “la parábola tangente”.



Naturalmente a esta parábola $P(x) = a + b(x - x_0) + c(x - x_0)^2$ debemos pedirle que pase por el punto, que tenga la misma inclinación (primera derivada) y la misma concavidad que la parábola (segunda derivada), es decir debemos pedirle:

$$\begin{aligned} P(x_0) &= f(x_0) \\ P'(x_0) &= f'(x_0) \\ P''(x_0) &= f''(x_0) \end{aligned}$$

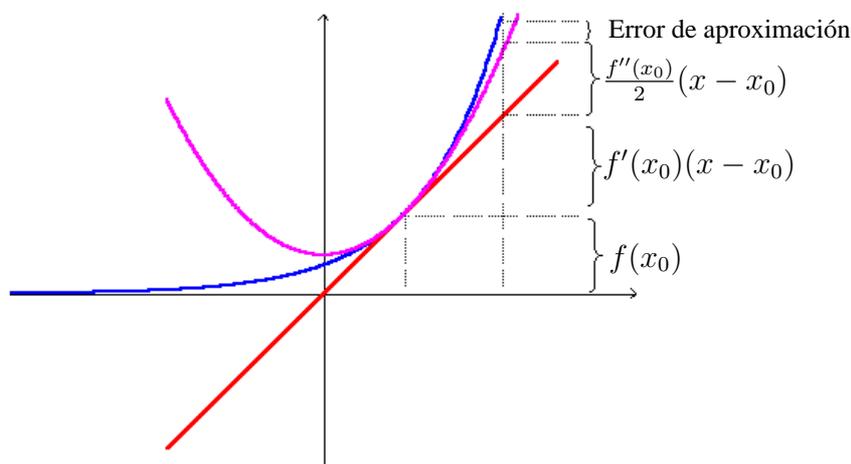
Como $P(x_0) = a$, $P'(x_0) = b$, $P''(x_0) = 2c$, concluimos que:

$$a = f(x_0) \quad , \quad b = f'(x_0) \quad , \quad c = \frac{1}{2}f''(x_0)$$

quedando la ecuación de la parábola que mejor aproxima a la curva en las cercanías de $(x_0, f(x_0))$, como:

$$P(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2$$

En la figura que sigue, observamos gráficamente los tres sumandos de la expresión de la parábola tangente. Los dos primeros nos dan la altura sobre la recta tangente y añadiéndole el tercero nos da la altura sobre la parábola tangente.



El Teorema de Taylor permite obtener aproximaciones de una función k veces diferenciable en un entorno de cierto punto a través de un polinomio de Taylor de grado k , además el teorema permite acotar el error obtenido en dicha estimación.

1.1.1. Teorema de Taylor en una variable

La versión del Teorema de Taylor en una variable que se presentará a continuación fue obtenida de la guía de cálculo diferencial escrita por los profesores Bruzual y Domínguez para la Facultad de Ciencias de la Universidad Central de Venezuela [6].

Teorema 1.1. *Teorema de Taylor en una variable*

Sea $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función tal que las primeras n derivadas $f, f', \dots, f^{(n)}$ están definidas en $[a, b]$ (n un entero positivo).

Sean x_0 y x distintos puntos del intervalo $[a, b]$ y sea

$$P(t) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (t - x_0)^k$$

Entonces existe un punto c entre x_0 y x tal que

$$f(x) = P(x) + \frac{f^{(n)}(c)}{n!} (x - x_0)^n \quad (1.1)$$

Demostración.

Es fácil comprobar que $P^{(k)}(x_0) = f^{(k)}(x_0)$ para $k = 0, 1, \dots, n - 1$. Consideremos a x como un punto fijo de \mathbb{R} .

Sea $M \in \mathbb{R}$ dado por:

$$M = \frac{f(x) - P(x)}{(x - x_0)^n}$$

Sea g la función de variable t definida por:

$$g(t) = f(t) - P(t) - M(t - x_0)^n$$

Derivando g con respecto a t se tiene:

$$g'(t) = f'(t) - P'(t) - nM(t - x_0)^{n-1}$$

Como $P'(x_0) = f'(x_0)$ obtenemos que $g'(x_0) = 0$. Si seguimos derivando g obtenemos:

$$g^{(k)}(t) = f^{(k)}(t) - P^{(k)}(t) - n(n-1)\dots(n-k+1)M(t-x_0)^{n-k}$$

Usando que $P^{(k)}(x_0) = f^{(k)}(x_0)$ para $k = 0, 1, \dots, n - 1$ conseguimos:

$$g(x_0) = g'(x_0) = \dots = g^{(n-1)}(x_0) = 0$$

Por la forma en que se escogió M se tiene que $g(x) = 0$, del teorema de Rolle se obtiene que existe x_1 entre x_0 y x tal que:

$$g'(x_1) = 0$$

Como $g'(x_0) = 0$ entonces por teorema de Rolle existe x_2 entre x_0 y x_1 tal que:

$$g''(x_2) = 0$$

Así sucesivamente, después de n pasos concluiremos que:

$$g^{(n)}(x_n) = 0$$

para algún x_n entre x_0 y x_{n-1} . Pero x_n también está entre x_0 y x . Tomemos $c = x_n$, para $a < t < b$ tenemos:

$$P^{(n)}(t) = 0$$

y por lo tanto:

$$g^{(n)}(t) = f^{(n)}(t) - n!M$$

Luego:

$$f^{(n)}(c) - n!M = 0$$

De donde:

$$M = \frac{f^{(n)}(c)}{n!}$$

El polinomio

$$P_N(x) = \sum_{k=0}^N \frac{f^{(k)}}{k!} (x - x_0)^k$$

se conoce como polinomio de Taylor de grado N de f alrededor de x_0 . □

Definición 1.1. Sea $[a, b]$ un entorno de $x_0 \in \mathbb{R}$ y sea $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una función infinitamente diferenciable en $[a, b]$, la serie de potencias:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

es conocida como la expansión en serie de Taylor de la función f alrededor de x_0 .

Ejemplo 1.1. Aproximación de funciones utilizando el teorema de Taylor

Usando el teorema de Taylor calcule una aproximación de cuarto grado de la función seno alrededor del origen.

Solución:

Sabiendo que $f(x) = \text{sen}(x)$ solo es necesario emplear la expresión (1.1) para obtener la aproximación deseada. Como se quiere una aproximación de cuarto orden tomamos $n = 5$. Ahora bien:

$$\begin{aligned} f'(x) &= \cos(x) \quad , \quad f''(x) = -\text{sen}(x) \\ f'''(x) &= -\cos(x) \quad , \quad f^{(4)}(x) = \text{sen}(x) \\ f^{(5)}(x) &= \cos(x) \end{aligned}$$

De donde:

$$\begin{aligned} P(x) &= \text{sen}(x_0) + \frac{\cos(x_0)}{1!} (x - x_0)^1 - \frac{\text{sen}(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 \\ &\quad - \frac{\cos(x_0)}{3!} (x - x_0)^3 + \frac{\text{sen}(x_0)}{4!} (x - x_0)^4 \end{aligned}$$

donde $x_0 = 0$ pues la aproximación deseada es alrededor del origen.

Así:

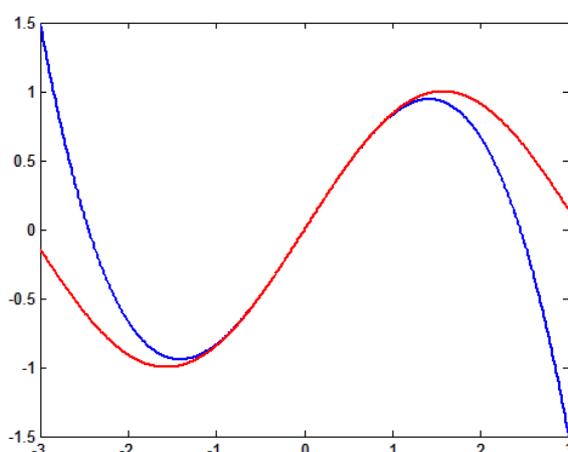
$$P(x) = x - \frac{1}{6}x^3$$

Y finalmente:

$$\text{sen}(x) = x - \frac{1}{6}x^3 + \frac{\cos(c)}{5!}x^5$$

El polinomio $P(x)$ corresponde al polinomio de Taylor de cuarto grado que aproxima a la función seno alrededor del origen, mientras que el último término de la ecuación anterior corresponde al error de aproximación, donde c es un valor entre 0 y x .

En la próxima figura se puede apreciar en color rojo la gráfica de $\sin(x)$ y en color azul su aproximación alrededor del origen $P(x)$ que obtuvimos utilizando el teorema de Taylor.



1.1.2. Teorema de Taylor en dos variables

La versión del Teorema de Taylor en dos variables que se presentará a continuación fue obtenida de la guía de cálculo diferencial en varias variables escrita por los profesores Bruzual y Domínguez para la Facultad de Ciencias de la Universidad Central de Venezuela [7].

En el caso de dos variables, sea $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ y $r > 0$, supongamos que tenemos una función de clase \mathcal{C}^2 :

$$f : B((x_0, y_0), r) \rightarrow \mathbb{R}$$

Sea $(h_1, h_2) \in \mathbb{R}^2$ tal que $\|(h_1, h_2)\| < r$ y, para $t \in [0, 1]$ sea:

$$\varphi(t) = f((x_0, y_0) + t(h_1, h_2))$$

Entonces φ es una función de clase \mathcal{C}^2 , ahora bien, por regla de la cadena tenemos:

$$\begin{aligned} \varphi'(t) &= h_1 \frac{\partial f}{\partial x}((x_0, y_0) + t(h_1, h_2)) + h_2 \frac{\partial f}{\partial y}((x_0, y_0) + t(h_1, h_2)) \\ \varphi''(t) &= h_1^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}((x_0, y_0) + t(h_1, h_2)) + 2h_1 h_2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}((x_0, y_0) + t(h_1, h_2)) \\ &\quad + h_2^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}((x_0, y_0) + t(h_1, h_2)) \end{aligned}$$

para todo $t \in [0, 1]$.

Aplicando el teorema de Taylor en el caso $n = 2$ a φ obtenemos que existe $\xi \in [0, 1]$ tal que:

$$\varphi(1) = \varphi(0) + \varphi'(0) + \frac{1}{2}\varphi''(\xi) \quad (1.2)$$

Si $(c, d) = (x_0, y_0) + \xi(h_1, h_2)$ tenemos que $(c, d) \in B((x_0, y_0), r)$ y de (1.2) obtenemos:

$$\begin{aligned} f(x_0 + h_1, y_0 + h_2) = & f(x_0, y_0) + h_1 \frac{\partial f}{\partial x}((x_0, y_0)) + h_2 \frac{\partial f}{\partial y}((x_0, y_0)) \\ & + \frac{1}{2} \left(h_1^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(c, d) + 2h_1 h_2 \frac{\partial f}{\partial x \partial y}(c, d) + h_2^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(c, d) \right) \end{aligned} \quad (1.3)$$

Si suponemos que f es de clase \mathcal{C}^n , obtenemos que φ es también de clase \mathcal{C}^n , por lo tanto podemos considerar los análogos de (1.2) y (1.3) pero derivando hasta el orden n . Esto nos lleva a una generalización del teorema de Taylor para funciones de dos variables. Esta generalización la vamos a describir a continuación sin demostraciones rigurosas.

Sea f una función de clase \mathcal{C}^n , notemos que las derivadas parciales de orden k ($k < n$) son de la forma:

$$f_{x^j y^{k-j}} = \frac{\partial^k f}{\partial y^{k-j} \partial x^j} = \frac{\partial^{k-j}}{\partial y^{k-j}} \frac{\partial^j f}{\partial x^j}$$

como f es de clase \mathcal{C}^n entonces el orden de derivación es irrelevante y es posible agrupar las derivadas de manera conveniente.

Definición 1.2. Sean $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ y $D \subset \mathbb{R}^2$ un entorno de (x_0, y_0) , sea $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función de clase \mathcal{C}^n en D , el polinomio de Taylor en dos variables de f de grado N alrededor de (x_0, y_0) es el polinomio:

$$\begin{aligned} P_N(x, y) = & f(x_0, y_0) + \frac{1}{1!} \left((x - x_0) f_x(x_0, y_0) + (y - y_0) f_y(x_0, y_0) \right) \\ & + \frac{1}{2!} \left((x - x_0)^2 f_{xx}(x_0, y_0) + 2(x - x_0)(y - y_0) f_{xy} + (y - y_0)^2 f_{yy}(x_0, y_0) \right) \\ & + \dots \\ & + \frac{1}{N!} \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (x - x_0)^k (y - y_0)^{N-k} f_{x^k y^{N-k}}(x_0, y_0) \end{aligned}$$

Teorema 1.2. *Teorema de Taylor en dos variables*

Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un abierto y sea $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función de clase \mathcal{C}^{N+1} , sean $(x_0, y_0), (x, y) \in \mathbb{R}^2$ tales que el segmento que los une esta contenido en D . Entonces existe un punto $(c, d) \in D$ tal que:

$$f(x, y) = P_N(x, y) + \frac{1}{(N+1)!} \sum_{k=0}^{N+1} \binom{N+1}{k} (x-x_0)^k (y-y_0)^{N+1-k} f_{x^k y^{N+1-k}}(c, d)$$

Ejemplo 1.2. *Polinomio de Taylor en dos variables*

Sea $f(x, y) = \sqrt{1+x^2+y^2}$ calcularemos el polinomio de Taylor de grado 2 alrededor de $(0,0)$.

Solución:

Tenemos que:

$$\begin{aligned} f_x(x, y) &= \frac{x}{\sqrt{1+x^2+y^2}} \\ f_y(x, y) &= \frac{y}{\sqrt{1+x^2+y^2}} \\ f_{xx}(x, y) &= \frac{\sqrt{1+x^2+y^2} - x^2(1+x^2+y^2)^{-\frac{1}{2}}}{1+x^2+y^2} \\ f_{xy}(x, y) &= -xy(1+x^2+y^2)^{-\frac{3}{2}} \\ f_{yy}(x, y) &= \frac{\sqrt{1+x^2+y^2} - y^2(1+x^2+y^2)^{-\frac{1}{2}}}{1+x^2+y^2} \end{aligned}$$

Luego:

$$\begin{aligned} f(0, 0) &= 1 \\ f_x(0, 0) &= 0, \quad f_y(0, 0) = 0 \\ f_{xx}(0, 0) &= 1, \quad f_{xy}(0, 0) = 0, \quad f_{yy}(0, 0) = 1 \end{aligned}$$

De donde:

$$P_2(x, y) = 1 + \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$$

1.2. Ecuaciones diferenciales

El término ecuación diferencial nos hace pensar en la solución de una ecuación que contenga derivadas. Así como en el álgebra se busca resolver ecuaciones como $x^2 + 5x + 1 = 0$ con la variable x , también es importante resolver ecuaciones diferenciales como $y'' + 2y' + y = 0$ para hallar la función y .

En el cálculo se aprende que la derivada de la función $y(x)$ es otra función que se determina siguiendo las reglas apropiadas. En las ecuaciones diferenciales el problema es “dada la ecuación diferencial $\frac{dy}{dx} = 2xy$ ¿hay algún método por el cual podamos hallar cuál es la función $y(x)$? ”

La teoría de ecuaciones diferenciales que será presentada a continuación fue obtenida de la bibliografía publicada por Dennis G. Zill [1] y Boyce - DiPrima [2].

Definición 1.3. *Una ecuación que contiene las derivadas de una o más variables dependientes con respecto a una o más variables independientes se conoce como una ecuación diferencial.*

Definición 1.4. *Cuando una función Φ definida en algún intervalo I , se sustituye en una ecuación diferencial y transforma dicha ecuación en una identidad, se dice entonces que Φ es una solución de la ecuación en el intervalo I .*

Ejemplo 1.3. *Comprobación de una solución*

Comprobar que $y = \frac{x^4}{16}$ es solución de la ecuación diferencial.

$$\frac{dy}{dx} = xy^{\frac{1}{2}}$$

Solución:

Para comprobar la solución basta con reescribir:

$$\frac{dy}{dx} - xy^{\frac{1}{2}} = 0$$

y comprobar si al sustituir $\frac{dy}{dx}$ y y la suma en efecto es cero.

Si calculamos la derivada de y tenemos:

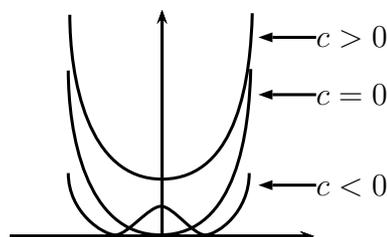
$$\frac{dy}{dx} = 4 \frac{x^3}{16} = \frac{x^3}{4}$$

Sustituyendo en la ecuación dada obtenemos:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dx} - xy^{\frac{1}{2}} &= \frac{x^3}{4} - x \left(\frac{x^4}{16} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{x^3}{4} - x \frac{x^2}{4} \\ &= \frac{x^3}{4} - \frac{x^3}{4} \\ &= 0\end{aligned}$$

Así, hemos obtenido que $y = \frac{x^4}{16}$ es solución de la ecuación diferencial.

El estudio de las ecuaciones diferenciales es similar al cálculo integral. En el cálculo integral al evaluar una integral indefinida se emplea una constante c de integración, de la misma manera, al resolver una ecuación diferencial de primer orden por lo general se obtiene una constante arbitraria c . Si $y(x)$ es una solución de una ecuación diferencial, entonces para cualquier constante c , $y(x) + c$ es también una solución de la ecuación diferencial. Una solución con una constante arbitraria representa un conjunto de soluciones que se conoce como *familia monoparamétrica de soluciones*. Esto quiere decir que una ecuación diferencial puede tener una cantidad infinita de soluciones que corresponden a las elecciones ilimitadas del parámetro c . Una solución de una ecuación diferencial que no tiene parámetro arbitrario se llama solución particular. Por ejemplo, por sustitución directa se puede observar que toda función de la familia $y = \left(\frac{x^2}{4} + c \right)^2$ satisface la ecuación del ejemplo 1.3. La solución particular $y = \frac{x^4}{16}$ corresponde a $c = 0$, la siguiente figura muestra algunas de las curvas solución de esta familia.



Si toda solución de una ecuación diferencial en un intervalo I se puede obtener partiendo de una familia monoparamétrica, se dice entonces que la familia es la solución general de la ecuación.

Antes de proceder con un análisis más detallado de las ecuaciones diferenciales es importante destacar que un punto de vista geométrico es útil para estudiar las ecuaciones

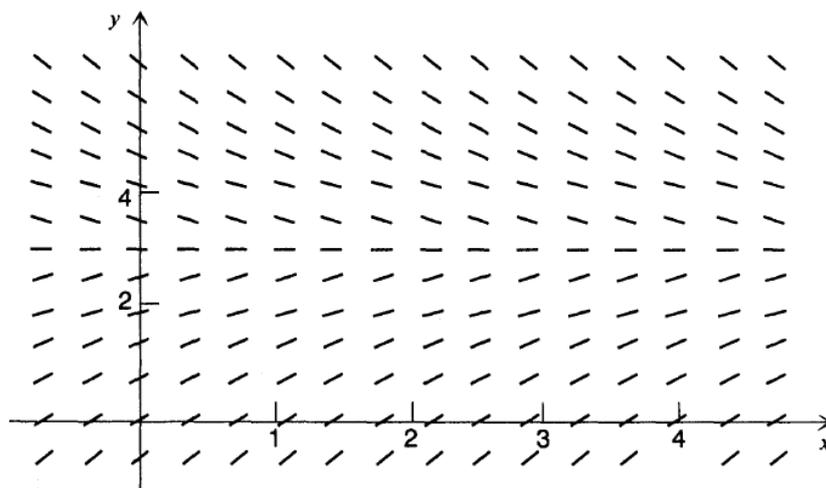
diferenciales de la forma:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (1.4)$$

Como la solución de la ecuación (1.4) es una función $y = \Phi(x)$ la representación geométrica de una solución es la gráfica de una función. Se puede observar que en la ecuación (1.4), desde el punto de vista geométrico, se está afirmando que en cualquier punto (x_0, y_0) la pendiente de la solución en ese punto está dada por $f(x_0, y_0)$. Esto puede indicarse si se traza un pequeño segmento recto que pase por (x_0, y_0) con pendiente $f(x_0, y_0)$. La colección de todos esos segmentos rectos se conoce como *campo direccional* de la ecuación diferencial (1.4), el cual se puede observar si se trazan los segmentos en algún conjunto representativo de puntos del plano. Hacer esto de manera manual es tedioso, pero la tarea es sencilla para una computadora ya que solo se requiere la evaluación repetida de $f(x, y)$ para diferentes valores de x y y . Por lo general se elige una rejilla rectangular de puntos. Una vez que se tiene un esquema del campo direccional es posible observar el comportamiento cualitativo de las soluciones, u observar regiones del plano que tengan interés particular.

Por ejemplo, en la siguiente figura se observa el campo direccional de la ecuación

$$\frac{dy}{dx} = \frac{3 - y}{2}$$



Cualquier solución de la ecuación tiene la propiedad de que, en todo punto, su gráfica es tangente al segmento del campo direccional en ese punto. Así, el campo direccional nos proporciona información cualitativa sobre las soluciones. Por ejemplo, en la figura anterior se puede apreciar que las soluciones son funciones decrecientes cuando $y > 3$, que son crecientes cuando $y < 3$ y que tienden a 3 cuando $x \rightarrow \infty$.

1.2.1. Problema de valor inicial

A menudo es de interés resolver una ecuación diferencial sujeta a condiciones prescritas que se le imponen a $y(x)$ o a sus derivadas. En algún intervalo que contenga a x_0 .

Definición 1.5. *El problema de valor inicial, denotado por sus siglas PVI, es:*

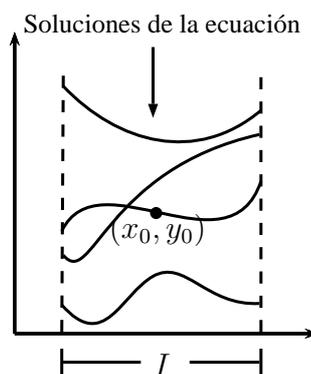
$$\text{PVI} = \begin{cases} \frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \\ y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y_1, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1} \end{cases} \quad (1.5)$$

en donde y_0, y_1, \dots, y_{n-1} son contantes reales, se llama problema de valor inicial. Los valores dados de la función desconocida $y(x)$ y de sus primeras $n - 1$ derivadas en el punto x_0 se llaman condiciones iniciales.

El problema (1.5) se denomina problema de valor inicial de n -ésimo orden, por lo que un PVI de primer orden es, en general:

$$\text{PVI} = \begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (1.6)$$

en el problema (1.6) se busca una solución, en un intervalo I que contenga al punto (x_0, y_0) .



En general, la solución de un PVI de orden n requiere la aplicación de una familia n -paramétrica de soluciones de la ecuación diferencial dada para determinar n constantes específicas, de modo que la solución particular satisfaga las n condiciones iniciales dadas.

Ejemplo 1.4. PVI de primer orden

Se puede comprobar fácilmente que $y = ce^x$ es una familia monoparamétrica de soluciones de la ecuación diferencial $y' = y$, en el intervalo $(-\infty, \infty)$. Si especificamos una

condición inicial, por ejemplo, $y(0) = 3$, al sustituir $x = 0$ y $y = 3$ en la familia se determina la constante $3 = ce^0 = c$. Así, la función $y = 3e^x$ es la solución del PVI,

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = y \\ y(0) = 3 \end{cases}$$

Ahora bien, si se quiere una solución de la ecuación diferencial que pase por el punto $(1, -2)$ y no por el punto $(0, 3)$, entonces la condición inicial $y(1) = -2$ dará como resultado $-2 = ce$, es decir, $c = -2e^{-1}$. Así, la función $y = -2e^{x-1}$ es la solución del PVI,

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = y \\ y(1) = -2 \end{cases}$$

1.2.2. Existencia y unicidad

Al momento de resolver un PVI surgen dos preguntas fundamentales: ¿Existe una solución al problema? y si la hay, ¿es única?

Por ejemplo, para el problema (1.6) surgirían las interrogantes: ¿La ecuación diferencial $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ tiene solución?, ¿Alguna de estas curvas pasa por el punto (x_0, y_0) ?, ¿Cuándo podemos estar seguros de que hay exactamente una curva solución que pasa por dicho punto?.

Ejemplo 1.5. Un PVI con dos soluciones

Las funciones $y = 0$ y $y = \frac{x^4}{16}$ son soluciones de la ecuación diferencial $\frac{dy}{dx} = xy^{\frac{1}{2}}$ y ambas soluciones pasan por el punto $(0, 0)$, de modo que el PVI:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = xy^{\frac{1}{2}} \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

tiene al menos dos soluciones.

Todo esto da origen al siguiente teorema.

Teorema 1.3. Teorema de existencia y unicidad

Sea R una región rectangular del plano definida por $a \leq x \leq b$; $c \leq y \leq d$ que contiene al punto (x_0, y_0) en su interior. Si $f(x, y)$ y $\frac{\partial f}{\partial y}$ son continuas en R , entonces existe un intervalo I centrado en x_0 y una única función $y(x)$ definida en I que satisface el problema de valor inicial (1.6).

Para demostrar este teorema es necesario transformar el problema de valor inicial (1.6) de una manera más conveniente. Si suponemos que existe una función $y = \Phi(x)$ que satisface el problema con valor inicial, entonces $f(x, \Phi(x))$ es una función continua solo de x . De donde es posible integrar la ecuación diferencial en (1.6) desde el punto inicial $x = x_0$ hasta un valor arbitrario de x , obteniendo:

$$\Phi(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, \Phi(t)) dt \quad (1.7)$$

en donde se utilizó la condición inicial $y(x_0) = y_0$.

Dado que la ecuación (1.7) contiene una integral de la función desconocida Φ , se denomina *ecuación integral*. Esta ecuación proporciona otra relación que satisface cualquier solución del PVI (1.6). Recíprocamente, suponga que existe una función continua $y = \Phi(x)$ que satisface la ecuación integral (1.7), entonces esta función también satisface el PVI (1.6). Para demostrar esto, primero se sustituye x por x_0 en (1.7), con lo que se obtiene $y(x_0) = y_0$. Además dado que el integrando de la ecuación integral (1.7) es continuo, por el teorema fundamental del cálculo se deduce que $\Phi'(x) = f(x, \Phi(x))$. Por lo tanto, el problema de valor inicial y la ecuación integral son equivalentes en el sentido que cualquier solución de uno de ellos también es una solución del otro. Es más conveniente demostrar que existe una solución única de la ecuación integral en cierto intervalo $a \leq x \leq b$. Entonces la misma conclusión se cumplirá para el problema de valor inicial.

Un método para demostrar que la ecuación integral tiene una solución única se conoce como el *método de aproximaciones sucesivas* o *método de iteración de Picard*. Al emplear este método se empieza por elegir una función inicial Φ_0 arbitrariamente o aproximando de alguna manera la solución del problema con valor inicial. La selección más sencilla es:

$$\Phi_0(x) = y_0$$

entonces Φ_0 satisface por lo menos la condición inicial $y(x_0) = y_0$, aunque quizás no la ecuación diferencial $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$. La siguiente aproximación Φ_1 se obtiene al sustituir $\Phi_0(t)$ por $\Phi(t)$ en el segundo miembro de la ecuación (1.7) y al nombrar como $\Phi_1(x)$ al resultado de esta operación. Por tanto:

$$\Phi_1(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, \Phi_0(t)) dt$$

De manera semejante, Φ_2 se obtiene a partir de Φ_1 :

$$\Phi_2(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, \Phi_1(t)) dt$$

y en general:

$$\Phi_{n+1}(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, \Phi_n(t)) dt$$

Como f es continua y la integral de una función continua es continua, entonces cada Φ_n es continua. Ahora tenemos una sucesión de funciones continuas $\{\Phi_n\}_{n>0}$ que satisfacen la condición inicial, pero en general ninguna de estas satisface la ecuación diferencial. Sin embargo, si en alguna etapa, por ejemplo para $n = k$ se obtiene que

$$\Phi_k = \Phi_{k+1} = \Phi_{k+2} = \Phi_{k+3} = \dots$$

entonces se concluye que Φ_k es una solución de la ecuación integral (1.7). De donde Φ_k también es una solución del problema con valor inicial (1.6) y en este punto se termina la sucesión.

Como $f(x, y)$ y $\frac{\partial f}{\partial y}$ son continuas en R , entonces estas alcanzan su máximo en R , por lo tanto existen las constantes $M = \max_R |f(x, y)|$ y $L = \max_R \left| \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) \right|$. Por el teorema del valor medio existe c entre y_1 y y_2 tal que $f(x, y_1) - f(x, y_2) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, c)(y_2 - y_1)$ y por lo tanto $\left| \frac{\partial f}{\partial y}(x, y_2) - \frac{\partial f}{\partial y}(x, y_1) \right| \leq L(y_2 - y_1)$ (*condición de Lipschitz*).

Si $L = 0$ tendríamos que $f(x, y)$ sólo depende de la variable x y en consecuencia Φ_1 sería la solución requerida. En caso contrario, como el punto (x_0, y_0) está en el interior del rectángulo R , entonces existe $0 < \epsilon < 1$ tal que $I = [x_0 - \frac{\epsilon}{L}, x_0 + \frac{\epsilon}{L}] \subset [a, b]$. Sea $\mathcal{C}(I)$ el espacio de las funciones continuas en I , luego para cada $n > 0$, $\Phi_n \in \mathcal{C}(I)$. Sabemos que $\mathcal{C}(I)$ con la norma

$$\|g\| = \max_{x \in I} |g(x)|$$

es un espacio de Banach, por lo que es suficiente demostrar que la sucesión $\{\Phi_n\}_{n>0}$ es de Cauchy. En efecto, para $x \in I$ tenemos

$$\begin{aligned} |\Phi_1(x) - \Phi_0(x)| &= \left| \int_{x_0}^x f(t, \Phi_0(t)) dt \right| \\ &\leq \int_{x_0}^x |f(t, \Phi_0(t))| dt \\ &\leq M \frac{\epsilon}{L} \end{aligned}$$

obteniéndose entonces que

$$\|\Phi_1 - \Phi_0\| \leq M \frac{\epsilon}{L}$$

Ahora bien:

$$\begin{aligned} |\Phi_2(x) - \Phi_1(x)| &= \left| \int_{x_0}^x f(t, \Phi_1(t)) - f(t, \Phi_0(t)) dt \right| \\ &\leq \int_{x_0}^x |f(t, \Phi_1(t)) - f(t, \Phi_0(t))| dt \\ &\leq \frac{\epsilon}{L} L \|\Phi_1 - \Phi_0\| \\ &\leq \epsilon \cdot M \frac{\epsilon}{L} = \frac{M}{L} \epsilon^2 \end{aligned}$$

Por lo tanto $\|\Phi_2 - \Phi_1\| \leq \frac{M}{L}\epsilon^2$, y de manera análoga podemos ver que:

$$\begin{aligned} |\Phi_3(x) - \Phi_2(x)| &\leq \frac{\epsilon}{L}L\|\Phi_2 - \Phi_1\| \\ &= \epsilon\|\Phi_2 - \Phi_1\| \\ &\leq \frac{M}{L}\epsilon^3 \end{aligned}$$

En general:

$$\|\Phi_k - \Phi_{k-1}\| \leq \frac{M}{L}\epsilon^k$$

Así pues:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \|\Phi_k - \Phi_{k-1}\| &\leq \frac{M}{L} \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^k \\ &= \frac{M}{L} \cdot \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \end{aligned} \tag{1.8}$$

Es decir, la serie $\sum_{k=1}^{\infty} \|\Phi_k - \Phi_{k-1}\|$ es una serie de términos positivos que converge, por lo tanto la cola de la sucesión se hace cero, es decir:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\Phi_k - \Phi_{k-1}\| = 0$$

Finalmente la sucesión $\{\Phi_n\}_{n>0}$ es una sucesión de Cauchy, y en consecuencia, convergente.

Ejemplo 1.6. *Otro vistazo al ejemplo 1.5*

Ya observamos que la ecuación $\frac{dy}{dx} = xy^{\frac{1}{2}}$ tiene al menos dos soluciones cuyas gráficas pasan por el punto $(0, 0)$. Si examinamos las funciones:

$$f(x, y) = xy^{\frac{1}{2}} \quad \text{y} \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{x}{2y^{\frac{1}{2}}}$$

se puede notar que son continuas en el semiplano definido por $y > 0$, por lo tanto, el teorema de existencia y unicidad nos permite asegurar que para cada punto (x_0, y_0) tal que $y_0 > 0$, hay un intervalo centrado en x_0 en el cual la ecuación diferencial tiene solución única. Así, por ejemplo, sin necesidad de resolver la ecuación podemos asegurar que existe un intervalo centrado en 2 en el cual el PVI

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = xy^{\frac{1}{2}} \\ y(2) = 1 \end{cases}$$

tiene solución única, pues el punto $(2, 1)$ pertenece al semiplano mencionado.

1.3. Métodos numéricos

Definición 1.6. *Una ecuación diferencial del tipo:*

$$\frac{dy}{dx} = f(y)$$

se conoce como ecuación autónoma pues la función f no depende de la variable independiente x .

Estas ecuaciones son de variables separables. Existe un método para resolverlas, aunque esto no siempre será posible pues puede que las integrales que aparezcan no se puedan calcular. Veamos un ejemplo de esto.

Al intentar resolver el problema con valor inicial autónomo:

$$\text{PVI} = \begin{cases} \frac{dy}{dx} = e^{-x^2} \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Como la ecuación diferencial es de variables separables entonces basta hacer:

$$dy = e^{-x^2} dx$$

Al integrar en ambos lados de la ecuación, del lado derecho nos quedará la integral:

$$\int e^{-x^2} dx$$

Como esta integral no se puede resolver por los métodos tradicionales de cálculo de integrales se hace necesario entonces un método alternativo que nos permita resolver la ecuación diferencial dada. En muchos casos tendrá que bastar una aproximación.

Esto motiva el estudio de los métodos numéricos, los cuales consisten en encontrar una sucesión de puntos distintos cuyas coordenadas se aproximen a las coordenadas de los puntos de la curva solución real.

Entre los más conocidos se encuentran:

1.3.1. Método de Euler

Es un método numérico iterativo que se emplea para calcular aproximaciones de soluciones de ecuaciones diferenciales con valor inicial dado, es decir, un problema de la forma:

$$\text{PVI} = \begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Como el PVI establece el valor de la derivada de la solución en (x_0, y_0) entonces la pendiente de la recta tangente a la curva solución en ese punto es $f(x_0, y_0)$.

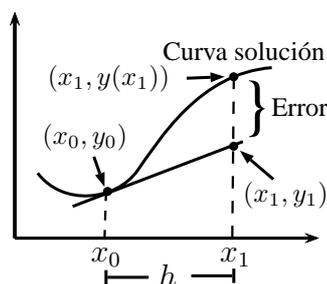
Si recorriéramos una distancia corta sobre la recta tangente entonces obtendríamos un punto aproximado a la curva solución.

Para hallar estos aproximados usamos la ecuación de la recta $L(x) = y'(x_0)(x - x_0) + y_0$ y nos trasladamos sobre el eje x una distancia h a partir del punto x_0 para obtener así el punto y_1 aproximado a la curva solución. Es decir:

$$y_1 = y'(x_0)(x_0 + h - x_0) + y_0 = hf'(x_0) + y_0$$

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

El punto (x_1, y_1) (donde $x_1 = x_0 + h$) es una aproximación al punto $(x_1, y(x_1))$ de la curva solución.



Si queremos hallar el valor y_2 , se procede de manera análoga, pero esta vez el punto de partida es (x_1, y_1) , así:

$$y_2 = y'(x_1)(x_1 + h - x_1) + y_1 = hf'(x_1) + y_1$$

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$$

Si se prosigue con este procedimiento obtendríamos que $y_3 = y_2 + hf(x_2, y_2)$.

En general se tiene que $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$, la distancia h se fija previamente y mientras más pequeña sea entonces más precisa será la aproximación.

Ejemplo 1.7. Uso del método de Euler

Para el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = \frac{1}{5}xy \\ y(1) = 1 \end{cases}$$

utilice el método de Euler a fin de obtener una aproximación de $y(1,5)$ con $h = 0,1$ primero y $h = 0,05$ después.

Solución:

Primero, se debe notar que $f(x, y) = \frac{1}{5}xy$ de esta manera, la ecuación del método de Euler es:

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{1}{5} x_n y_n$$

Así, cuando $h = 0,1$ tenemos:

$$y_1 = y_0 + 0,1 \left(\frac{1}{5} x_0 y_0 \right) = 1 + 0,1 \left(\frac{1}{5} (1)(1) \right) = 1,02$$

$$y_2 = y_1 + 0,1 \left(\frac{1}{5} x_1 y_1 \right) = 1,02 + 0,1 \left(\frac{1}{5} (1,1)(1,02) \right) = 1,0424$$

$$y_3 = y_2 + 0,1 \left(\frac{1}{5} x_2 y_2 \right) = 1,0424 + 0,1 \left(\frac{1}{5} (1,2)(1,0424) \right) = 1,0675$$

Que son estimaciones de los valores $y(1,1)$, $y(1,2)$ y $y(1,3)$ respectivamente.

Si $h = 0,05$, entonces:

$$y_1 = y_0 + 0,05 \left(\frac{1}{5} x_0 y_0 \right) = 1 + 0,05 \left(\frac{1}{5} (1)(1) \right) = 1,01$$

$$y_2 = y_1 + 0,05 \left(\frac{1}{5} x_1 y_1 \right) = 1,01 + 0,05 \left(\frac{1}{5} (1,05)(1,01) \right) = 1,0206$$

$$y_3 = y_2 + 0,05 \left(\frac{1}{5} x_2 y_2 \right) = 1,0206 + 0,05 \left(\frac{1}{5} (1,1)(1,0206) \right) = 1,0318$$

$$y_4 = y_3 + 0,05 \left(\frac{1}{5} x_3 y_3 \right) = 1,0318 + 0,05 \left(\frac{1}{5} (1,15)(1,0318) \right) = 1,0437$$

En este caso, los valores y_2 y y_4 son aproximaciones de $y(1,1)$ y $y(1,2)$ respectivamente, se puede observar una pequeña diferencia en las aproximaciones obtenidas para cada valor de h utilizado.

A continuación se presentan los resultados de los cálculos que se obtienen empleando este método para los diferentes casos de h . Nótese que la solución de la ecuación diferencial dada es $e^{0,1(x^2-1)}$, con la cual es posible calcular la solución exacta para cada uno de los casos de x_n .

Caso $h = 0,1$

x_n	y_n	Valor exacto
1	1	1
1.10	1.02	1.0212
1.20	1.0424	1.0450
1.30	1.0675	1.0714
1.40	1.0952	1.1008
1.50	1.1259	1.1331

Caso $h = 0,05$

x_n	y_n	Valor exacto
1	1	1
1.05	1.01	1.0103
1.10	1.0206	1.0212
1.15	1.0318	1.0328
1.20	1.0437	1.0450
1.25	1.0562	1.0579
1.30	1.0694	1.0714
1.35	1.0833	1.0857
1.40	1.0980	1.1008
1.45	1.1133	1.1166
1.50	1.1295	1.1331

1.3.2. Error en los métodos numéricos

Al momento de usar métodos numéricos para estimar soluciones de los PVI, se pueden producir errores por diferentes motivos.

Uno de estos errores es el error de redondeo, el cual se produce pues una computadora o calculadora solo puede representar una cantidad limitada de cifras decimales. Este error es impredecible y la única manera de evitarlo es reducir la cantidad de operaciones que se realizan. Nos enfocaremos entonces en los errores que se pueden medir, como lo son el error local de truncamiento y el error global de truncamiento.

Definición 1.7. *Al iterar en el método de Euler, en general, el valor y_1 no coincidirá con el valor exacto $y(x_1)$ debido a que el algoritmo proporciona solo una aproximación a la solución. La diferencia entre el valor exacto y el aproximado se conoce como error local de truncamiento, esto es, si suponemos que y_n es exacto entonces y_{n+1} tendrá un error de truncamiento.*

Para obtenerlo se hace uso de una serie de Taylor con residuo. Si una función $y(x)$ tiene $k + 1$ derivadas continuas en un intervalo abierto que contiene a a y a x entonces:

$$y(x) = y(a) + y'(a) \frac{(x-a)}{1!} + \dots + y^{(k)}(a) \frac{(x-a)^k}{k!} + y^{(k+1)}(c) \frac{(x-a)^{k+1}}{(k+1)!}$$

donde c es un punto entre a y x .

Si tomamos $k = 1$, $a = x_n$ y $x = x_{n+1} = x_n + h$ obtenemos entonces:

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) &= y(x_n) + y'(x_n)\frac{h}{1!} + y''(c)\frac{h^2}{2!} \\ &= y_n + hf(x_n, y_n) + y''(c)\frac{h^2}{2} \end{aligned}$$

El método de Euler es esta fórmula sin el último término, por lo que el error local de truncamiento es $y''(c)\frac{h^2}{2}$ con $x_n < c < x_{n+1}$.

Por lo tanto, el error local de truncamiento para el método de Euler es proporcional al cuadrado del tamaño del paso h y a la segunda derivada de y . Como por lo general se desconoce el valor de c no es posible calcular el error, no obstante, es posible dar una cota superior para el mismo la cual es $M\frac{h^2}{2}$ donde $M = \max_{x_n < c < x_{n+1}} |f''(x)|$

En este caso, como el error depende del cuadrado del paso h se dice que el error local de truncamiento es de segundo orden y se denota $O(h^2)$.

Es importante notar que si se reduce h en un factor de $\frac{1}{2}$ entonces se reduce la cota del error en un factor de $\frac{1}{4}$ y si se reduce h en un factor de $\frac{1}{10}$ se reduce la cota del error en un factor de $\frac{1}{100}$.

En el análisis anterior partimos de suponer que el valor de y_n es exacto, pero este no lo es ya que contiene los errores locales de truncamiento de los pasos anteriores. El error total en y_{n+1} es una acumulación de los errores en cada uno de los pasos anteriores. A este error total se le llama *error global de truncamiento*. El análisis para estimar el error global de truncamiento es más difícil que para el local, sin embargo, se puede hacer la siguiente estimación intuitiva.

Usando el método de Euler, supóngase que se requieren n pasos para ir de x_0 a $x_n = x_0 + nh$, en cada paso, el error es como máximo $M\frac{h^2}{2}$, por lo tanto, el error en n pasos es como máximo $nM\frac{h^2}{2}$. Notando que $n = \frac{x_n - x_0}{h}$ obtenemos que el error global de truncamiento al ir de x_0 a x_n , está acotado por $(x_n - x_0)\frac{Mh}{2}$.

De este modo, como el error global de truncamiento depende directamente de h decimos entonces que este error es de primer orden y denotamos $O(h)$.

En general, decimos que el *orden de un método numérico* es n si polinomio de Taylor de grado n del método numérico en un paso es igual al polinomio de Taylor de grado n de la solución.

Ejemplo 1.8. *Cálculo de cotas de error.*

Calcule una cota para los errores locales de truncamiento para el método de Euler cuando se aplica al ejemplo anterior, con $h = 0,1$.

Solución:

Sabiendo que la solución analítica del problema es $e^{0,1(x^2-1)}$ y que el error local de truncamiento es:

$$y''(c) \frac{h^2}{2} = (0,4c + 0,2)e^{0,1(c^2-1)} \frac{h^2}{2}$$

donde $x_n < c < x_{n+1}$, entonces como $y''(c)$ es una función creciente basta tomar $c = x_{n+1}$ para obtener la cota del error local de truncamiento. Así:

$$\begin{aligned} y''(1,1) \frac{h^2}{2} &= ((0,4)(1,1) + 0,2)e^{0,1(1,1^2-1)} = 0,6535 \\ y''(1,2) \frac{h^2}{2} &= ((0,4)(1,2) + 0,2)e^{0,1(1,2^2-1)} = 0,7105 \\ y''(1,3) \frac{h^2}{2} &= ((0,4)(1,3) + 0,2)e^{0,1(1,3^2-1)} = 0,7714 \end{aligned}$$

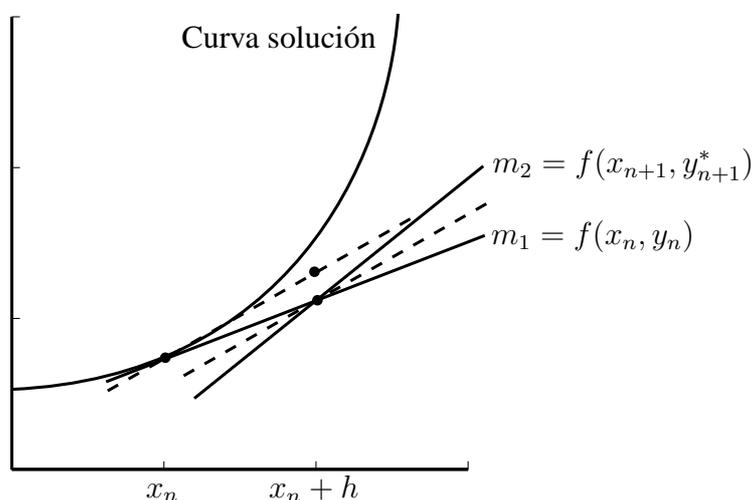
Es decir, al aplicar el primer paso del método de Euler para aproximar $y(1,1)$ tenemos que la máxima diferencia entre el valor real y el valor aproximado es de 0.6535, en el ejemplo anterior se puede observar que el error es de 0.0012, valor menor que la cota calculada. De manera análoga se puede observar que el error en las aproximaciones de $y(1,2)$ y de $y(1,3)$ son menores que las cotas que se acaban de calcular.

1.3.3. Método de Euler mejorado

Este método se origina debido a lo poco preciso del método de Euler, en este, para obtener una mayor precisión se define:

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)}{2}$$

donde $y_{n+1}^* = y_n + hf(x_n, y_n)$



Esta fórmula se conoce como fórmula de Euler mejorada o fórmula de Heun. Los valores $f(x_n, y_n)$ y $f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)$ son aproximaciones de la pendiente de la curva solución en los puntos $(x_n, y(x_n))$ y $(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$ respectivamente, por lo tanto, el valor $\frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)}{2}$ es la pendiente promedio en el intervalo que va de x_n a x_{n+1} , esta pendiente es la que le corresponde a las rectas punteadas en la figura anterior.

En la figura anterior podemos observar también, que de los dos puntos gruesos sobre la vertical $x_n + h$ uno está más cercano a la curva solución, este punto es la aproximación que se obtiene empleando el método de Euler mejorado, mientras que el más alejado es el que se obtiene empleando el método usual. Así pues, se puede observar gráficamente la mayor exactitud del método de Euler mejorado.

Ejemplo 1.9. Uso del método de Euler mejorado

Para el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = \frac{1}{5}xy \\ y(1) = 1 \end{cases}$$

utilice el método de Euler mejorado a fin de obtener una aproximación de $y(1,5)$ con $h = 0,1$ y compare el resultado con el obtenido usando el método de Euler.

Solución:

Sabiendo que $y_{n+1} = y_n + h \frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)}{2}$ entonces:

$$y_1^* = y_0 + hf(x_0, y_0) = 1 + 0,1 \left(\frac{1}{5}(1)(1) \right) = 1,02$$

$$y_1 = y_0 + h \frac{f(x_0, y_0) + f(x_1, y_1^*)}{2} \\ = 1 + 0,1 \left(\frac{\frac{1}{5}(1)(1) + \frac{1}{5}(1,1)(1,02)}{2} \right) = 1,0212$$

$$y_2^* = y_1 + hf(x_1, y_1) = 1,0212 + 0,1 \left(\frac{1}{5}(1,1)(1,0212) \right) = 1,0436$$

$$y_2 = y_1 + h \frac{f(x_1, y_1) + f(x_2, y_2^*)}{2} \\ = 1,0212 + 0,1 \left(\frac{\frac{1}{5}(1,1)(1,0212) + \frac{1}{5}(1,2)(1,0436)}{2} \right) = 1,0449$$

Así, si seguimos con el procedimiento obtenemos:

x_n	Método de Euler	Euler Mejorado	Valor exacto
1.10	1.02	1.0212	1.0212
1.20	1.0424	1.0449	1.0450
1.30	1.0675	1.0713	1.0714
1.40	1.0952	1.1006	1.1008
1.50	1.1259	1.1329	1.1331

Se puede observar que el método de Euler mejorado es más preciso que el método de Euler.

1.3.4. Métodos de Runge-Kutta

Es probable que uno de los métodos más difundidos y a la vez más exactos para obtener soluciones aproximadas a un problema con valor inicial sea el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

Carl David Runge (1856-1927), matemático y físico alemán, trabajó durante muchos años en espectroscopía. El análisis de datos lo llevó a considerar los problemas de cálculo numérico, y el método de Runge-Kutta se originó en su publicación sobre la solución numérica de ecuaciones diferenciales, en 1895. El método fue extendido en 1901 hacia los sistemas de ecuaciones por M. Wilhelm Kutta (1867-1944). Kutta fue un matemático y experto en aerodinámica, alemán también, bastante conocido por sus importantes contribuciones a la teoría clásica de los perfiles aerodinámicos.

Los métodos de Runge-Kutta se obtienen a partir de la serie de Taylor. La forma general de la ecuación usada para formular el método de Runge-Kutta es:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta y_n \quad , \quad \Delta y_n = \Phi(x_n, y_n)h$$

Δy_n es la función incremental y puede ser interpretada como la pendiente representativa en el intervalo $(x_n, x_n + h)$

En general tenemos que:

$$\Phi = \sum_{i=1}^s b_i F_i$$

Donde para cada $i \in 1, 2, \dots, s$ las b_i son constantes y las F_i se definen de la siguiente manera:

$$F_i = f \left(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=i}^s a_{ij} F_j \right)$$

Jhon Butcher en [3] representa el método a través de la siguiente tabla:

c_1	a_{11}	a_{12}	\cdots	a_{1s}
c_2	a_{21}	a_{22}	\cdots	a_{2s}
\vdots	\vdots	\vdots		\vdots
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\cdots	a_{ss}
	b_1	b_2	\cdots	b_s

la cual lleva su nombre.

Diremos que el método es explícito si la matriz $A = (a_{ij})$ es triangular inferior con diagonal cero y $c_1 = 0$, y para este caso tenemos la tabla triangular inferior:

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\cdots	a_{ss-1}	
	b_1	b_2	\cdots	b_{s-1}	b_s

De esta manera obtenemos que:

$$\begin{aligned} F_1 &= f(x_n, y_n) \\ F_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} F_1 h) \\ F_3 &= f(x_n + c_3 h, y_n + a_{31} F_1 h + a_{32} F_2 h) \\ &\vdots \\ F_n &= f(x_n + c_n h, y_n + a_{n1} F_1 h + a_{n2} F_2 h + \cdots + a_{nn} F_{n-1} h) \end{aligned}$$

Para deducir los valores de las constantes a_{ij} , b_i , c_i y F_i en el método de RK de segundo orden escribimos:

$$y_{n+1} = y_n + (b_1F_1 + b_2F_2)h$$

donde:

$$\begin{aligned} F_1 &= f(x_n, y_n) \\ F_2 &= f(x_n + c_2h, y_n + a_{21}F_1h) \end{aligned}$$

Consideremos el polinomio de Taylor de grado 2 de la solución del PVI centrado en x_n , es decir:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + f(x_n, y(x_n))(x_{n+1} - x_n) + f'(x_n, y(x_n))\frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{2!}$$

considerando que $y(x_n) = y_n$ y que $x_{n+1} - x_n = h$ obtenemos:

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)h + f'(x_n, y_n)\frac{h^2}{2} \quad (1.9)$$

Por regla de la cadena tenemos que:

$$f'(x_n, y_n) = \frac{\partial f(x_n, y_n)}{\partial x} + \frac{\partial f(x_n, y_n)}{\partial y}f(x_n, y_n)$$

sustituyendo en la expresión anterior obtenemos:

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)h + \left(\frac{\partial f(x_n, y_n)}{\partial x} + \frac{\partial f(x_n, y_n)}{\partial y}f(x_n, y_n) \right) \frac{h^2}{2!}$$

Adicionalmente, la expansión de $f(x_n + c_2h, y_n + a_{21}F_1h)$ en serie de Taylor es de la forma:

$$g(x + r, y + s) = g(x, y) + r\frac{\partial g}{\partial x} + s\frac{\partial g}{\partial y} + \dots$$

así, la serie de Taylor de $f(x_n + c_2h, y_n + a_{21}F_1h)$ es:

$$f(x_n + c_2h, y_n + a_{21}F_1h) = f(x_n, y_n) + c_2h\frac{\partial f}{\partial x} + a_{21}F_1h\frac{\partial f}{\partial y} + O(h^2)$$

El método de Runge-Kutta de segundo orden quedará escrito de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + (b_1F_1 + b_2F_2)h = y_n + b_1hf(x_n, y_n) + b_2hf(x_n + c_2h, y_n + a_{21}F_1h) \\ &= y_n + b_1hf(x_n, y_n) + b_2h \left[f(x_n, y_n) + c_2h\frac{\partial f}{\partial x} + a_{21}F_1h\frac{\partial f}{\partial y} + O(h^2) \right] \\ &= y_n + b_1hf(x_n, y_n) + b_2hf(x_n, y_n) + b_2c_2h^2\frac{\partial f}{\partial x} + b_2a_{21}F_1h^2\frac{\partial f}{\partial y} + O(h^3) \\ y_{n+1} &= y_n + [b_1f(x_n, y_n) + b_2f(x_n, y_n)]h + \left[b_2c_2\frac{\partial f}{\partial x} + b_2a_{21}f(x_n, y_n)\frac{\partial f}{\partial y} \right] h^2 + O(h^3) \end{aligned} \quad (1.10)$$

Si comparamos este resultado con (1.9) obtenemos que:

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 &= 1 \\ b_2 c_2 &= \frac{1}{2} \\ b_2 a_{21} &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

esto es un sistema de 3 ecuaciones con 4 incógnitas, por lo que existe una familia infinita de métodos de RK de segundo orden, uno de ellos es el definido por:

$$y_{n+1} = y_n + \left(\frac{1}{2} F_1 + \frac{1}{2} F_2 \right) h$$

Particularmente, si en $F_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} F_1 h)$ consideramos $c_2 = 1$ y $a_{21} = 1$ obtenemos el método de Euler mejorado, es decir, el método de Euler mejorado es un método de RK de segundo orden.

Adicionalmente, cabe destacar que como se puede observar en (1.10) los métodos de RK de segundo orden tienen un error local de truncamiento de $O(h^3)$.

La tabla de Butcher puede ser utilizada para expresar el método de Euler mejorado pues si consideramos la siguiente tabla de Butcher:

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

Obtenemos entonces que:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \Delta y_n = y_n + h\Phi(x_n, y_n) \\ &= y_n + h \left(\frac{f(x_n, y_n)}{2} + \frac{f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))}{2} \right) \end{aligned}$$

De donde, la tabla de Butcher dada representa el método de Euler mejorado.

1.3.5. Método de Runge-Kutta de cuarto orden

Las fórmulas de los métodos de RK se desarrollan a partir de la serie de Taylor:

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)(x_{n+1} - x_n) + \frac{f'(x_n, y_n)}{2!}(x_{n+1} - x_n)^2 + \frac{f''(x_n, y_n)}{3!}(x_{n+1} - x_n)^3 + \frac{f'''(x_n, y_n)}{4!}(x_{n+1} - x_n)^4 + \dots$$

como $x_{n+1} = x_n + h$, entonces:

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)h + \frac{f'(x_n, y_n)}{2!}h^2 + \frac{f''(x_n, y_n)}{3!}h^3 + \frac{f'''(x_n, y_n)}{4!}h^4 + \dots$$

Definiendo $\Delta y_n = y_{n+1} - y_n$ tenemos:

$$\Delta y_n = f(x_n, y_n)h + \frac{f'(x_n, y_n)}{2!}h^2 + \frac{f''(x_n, y_n)}{3!}h^3 + \frac{f'''(x_n, y_n)}{4!}h^4 + \dots \quad (1.11)$$

Ahora bien:

$$\begin{aligned} f' &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = f_x + f_y f \\ f'' &= \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)' + \left(\frac{\partial f}{\partial y} f \right)' \\ &= f_{xx} + f_{yx} f + f_y f_x + (f_{xy} + f_{yy} f + f_y^2) f \\ f''' &= f_{xxx} + \dots \end{aligned}$$

Sustituyendo lo anterior en la ecuación (1.11) resulta:

$$\begin{aligned} \Delta y_n &= f(x_n, y_n)h + \frac{1}{2!} (f_x + f_y f) (x_n, y_n)h^2 \\ &+ \frac{1}{3!} (f_{xx} + 2f_{yx} f + f_{yy} f^2 + (f_x + f_y f) f_y) (x_n, y_n)h^3 \\ &+ \frac{1}{4!} (f_{xxx} + \dots) (x_n, y_n)h^4 \end{aligned} \quad (1.12)$$

La evaluación de tanta derivada es poco práctico y para evitar esta dificultad tomamos el cambio:

$$\Delta y_n = \underbrace{(b_1 F_1 + b_2 F_2 + b_3 F_3 + \dots + b_s F_s)}_{\Phi(x_n, y_n)} h$$

donde:

$$\begin{aligned} F_1 &= f(x_n, y_n) \\ F_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} F_1) \\ F_3 &= f(x_n + c_3 h, y_n + a_{31} F_1 + a_{32} F_2) \\ &\vdots \\ F_s &= f(x_n + c_s h, y_n + a_{s1} F_1 + a_{s2} F_2 + \dots) \end{aligned}$$

El objetivo es determinar los tres conjuntos de constantes a , b y c . El subíndice s indica que las expresiones para Δy_n deben coincidir hasta el término que contiene a h^{s-1} .

Tomando $s = 4$:

$$\Delta y_n = (b_1 F_1 + b_2 F_2 + b_3 F_3 + b_4 F_4)h \quad (1.13)$$

$$F_1 = f(x_n, y_n)$$

$$F_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} F_1)$$

$$F_3 = f(x_n + c_3 h, y_n + a_{31} F_1 + a_{32} F_2)$$

$$F_4 = f(x_n + c_4 h, y_n + a_{41} F_1 + a_{42} F_2 + a_{43} F_3)$$

Ahora buscamos la forma de determinar las 13 constantes $b_1, b_2, b_3, b_4, c_2, c_3, c_4, a_{21}, a_{31}, a_{32}, a_{41}, a_{42}$ y a_{43} . Para esto, partiremos de la serie de Taylor para dos variables independientes alrededor del punto (x_0, y_0) :

$$\begin{aligned} f(x_0 + h, y_0 + k) = & f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0)h + f_y(x_0, y_0)k \\ & + \frac{1}{2!} (f_{xx}(x_0, y_0)h^2 + 2f_{xy}(x_0, y_0)hk + f_{yy}(x_0, y_0)k^2) + \dots \end{aligned}$$

Esta serie se suele reescribir simbólicamente de la siguiente manera:

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x_0, y_0) + \frac{1}{2!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x_0, y_0) + \dots$$

Sustituyendo ahora F_1, F_2, F_3 y F_4 en la última ecuación obtenemos:

$$F_1 = f(x_n, y_n)$$

$$\begin{aligned} F_2 = & f(x_n, y_n) + \left(c_2 h \frac{\partial}{\partial x} + a_{21} F_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x_n, y_n) + \frac{1}{2!} \left(c_2 h \frac{\partial}{\partial x} + a_{21} F_1 \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x_n, y_n) \\ & + \frac{1}{3!} \left(c_2 h \frac{\partial}{\partial x} + a_{21} F_1 \frac{\partial}{\partial y} \right)^3 f(x_n, y_n) + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_3 = & f(x_n, y_n) + \left(c_3 h \frac{\partial}{\partial x} + (a_{31} F_1 + a_{32} F_2) \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x_n, y_n) \\ & + \frac{1}{2!} \left(c_3 h \frac{\partial}{\partial x} + (a_{31} F_1 + a_{32} F_2) \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x_n, y_n) \\ & + \frac{1}{3!} \left(c_3 h \frac{\partial}{\partial x} + (a_{31} F_1 + a_{32} F_2) \frac{\partial}{\partial y} \right)^3 f(x_n, y_n) + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_4 = & f(x_n, y_n) + \left(c_4 h \frac{\partial}{\partial x} + (a_{41} F_1 + a_{42} F_2 + a_{43} F_3) \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x_n, y_n) \\ & + \frac{1}{2!} \left(c_4 h \frac{\partial}{\partial x} + (a_{41} F_1 + a_{42} F_2 + a_{43} F_3) \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x_n, y_n) \\ & + \frac{1}{3!} \left(c_4 h \frac{\partial}{\partial x} + (a_{41} F_1 + a_{42} F_2 + a_{43} F_3) \frac{\partial}{\partial y} \right)^3 f(x_n, y_n) + \dots \end{aligned}$$

Truncando los desarrollos de Taylor de las F 's hasta el término de h^3 y sustituyendolos en (1.13), al igualar esto con (1.12) obtendremos 11 ecuaciones con 13 incógnitas:

$$\begin{aligned}
c_2 &= a_{21} \\
c_3 &= a_{31} + a_{32} \\
c_4 &= a_{41} + a_{42} + a_{43} \\
b_1 + b_2 + b_3 + b_4 &= 1 \\
b_2c_2 + b_3c_3 + b_4c_4 &= \frac{1}{2} \\
b_2c_2^2 + b_3c_3^2 + b_4c_4^2 &= \frac{1}{3} \\
b_2c_2^3 + b_3c_3^3 + b_4c_4^3 &= \frac{1}{4} \\
b_3c_2a_{32} + b_4(c_2a_{42} + c_3a_{43}) &= \frac{1}{6} \\
b_3c_2^2a_{32} + b_4(c_2^2a_{42} + c_3^2a_{43}) &= \frac{1}{12} \\
b_3c_2c_3a_{32} + b_4(c_2a_{42} + c_3a_{42})c_4 &= \frac{1}{8} \\
b_4c_2a_{32}a_{43} &= \frac{1}{24}
\end{aligned}$$

Como solo poseemos 11 ecuaciones para 13 incógnitas debemos escoger 2 de las incógnitas y resolver el sistema de ecuaciones. Tomando $b_2 = b_3 = \frac{1}{3}$ obtenemos:

$$\begin{aligned}
b_1 &= \frac{1}{6} \quad , \quad b_2 = \frac{1}{3} \quad , \quad b_3 = \frac{1}{3} \quad , \quad b_4 = \frac{1}{6} \\
c_2 &= \frac{1}{2} \quad , \quad c_3 = \frac{1}{2} \quad , \quad c_4 = 1 \\
a_{21} &= \frac{1}{2} \quad , \quad a_{31} = 0 \quad , \quad a_{41} = 0 \quad , \quad a_{32} = \frac{1}{2} \quad , \quad a_{42} = 0 \quad , \quad a_{43} = 1
\end{aligned}$$

Los coeficientes anteriores se conocen como coeficientes de Runge.

Capítulo 2

Árboles

2.1. Grafos

En matemáticas y ciencias de la computación, un grafo (del griego grafos: dibujo, imagen) es un conjunto de objetos llamados vértices unidos por enlaces llamados lados, que permiten representar relaciones binarias entre elementos de un conjunto.

El origen de la teoría de grafos se remonta al siglo XVIII con el problema de los puentes de Königsberg (actualmente Kaliningrado) el cual consistía en encontrar un camino que recorriera los siete puentes del río Pregel de modo que se recorrieran todos los puentes pasando una sola vez por cada uno de ellos, regresando finalmente al punto de salida. El trabajo de Leonhard Euler en 1736 es considerado el primer resultado de la teoría de grafos.

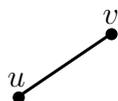
Luego, en 1847, Gustav Kirchhoff utilizó la teoría de grafos para el análisis de redes eléctricas publicando sus leyes de los circuitos para calcular el voltaje y la corriente en los circuitos eléctricos, conocidas como leyes de Kirchhoff, considerado la primera aplicación de la teoría de grafos a un problema de ingeniería.

Definición 2.1. *Un grafo simple es un par $G = (V, L)$ en donde:*

- V es un conjunto no vacío, los elementos de V se denominan vértices.
- L es un subconjunto del conjunto:

$$\{\{u, v\} : u, v \in V\} = \mathbb{P}_2(V)$$

en donde $\mathbb{P}_2(V)$ es el conjunto formado por todos los subconjuntos de tamaño 2 de V . Si $L \neq \emptyset$ un elemento $\{u, v\}$ es un lado de G , este será representado gráficamente por un segmento no dirigido que conecta a u con v .



En este trabajo consideraremos el caso en el que $|V|$ es finito.

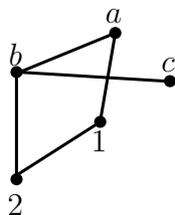
Ejemplo 2.1.

Consideremos los conjuntos:

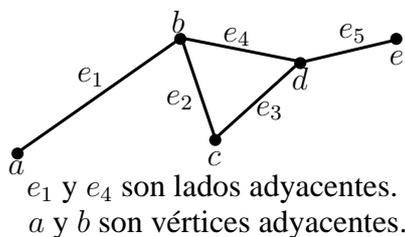
$$V = \{a, b, c, 1, 2\}$$

$$L = \{\{a, b\}, \{a, 1\}, \{b, c\}, \{b, 2\}, \{1, 2\}\}$$

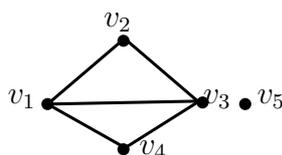
El grafo al cual le corresponden estos conjuntos V y L es:



Definición 2.2. Decimos que dos vértices u, v son adyacentes si $\{u, v\}$ es un lado del grafo, y decimos que dos lados diferentes son adyacentes si tienen un vértice en común.



Definición 2.3. Sea $G = (V, L)$ un grafo, el grado de un vértice v que denotaremos por $gr(v)$ es el número de lados que son incidentes a v . Si $gr(v) = 0$ entonces v se dice aislado.

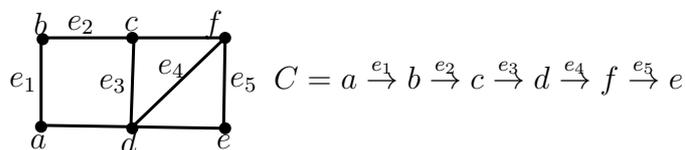


$$gr(v_2) = 2$$

$$gr(v_3) = 3$$

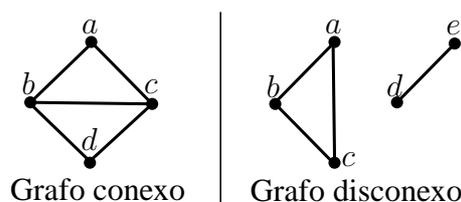
$$gr(v_5) = 0$$

Definición 2.4. Sea $G = (V, L)$ un grafo. Un camino de G es una secuencia de vértices de modo que dos vértices consecutivos de la secuencia sean adyacentes. Decimos que un camino es de longitud n si contiene n lados.

Camino del vértice a al vértice e

Un camino C se dice que es *simple* si en el no aparecen lados repetidos.

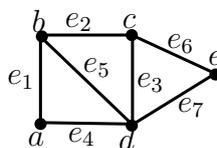
Definición 2.5. Un grafo $G = (V, L)$ se dice que es *conexo* si para cada par de vértices u, v existe un camino que los conecta. En caso contrario es *disconexo*.



Definición 2.6. Un ciclo es un camino simple de longitud mayor que cero que va de un determinado vértice u al mismo u .

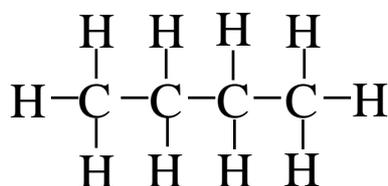
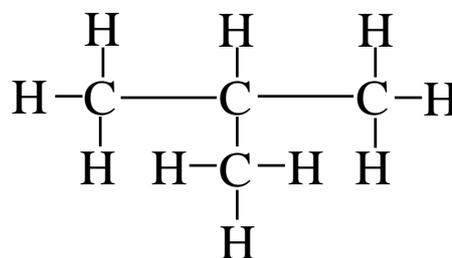
En la siguiente figura, un ciclo de a en a es por ejemplo:

$$a \xrightarrow{e_1} b \xrightarrow{e_5} d \xrightarrow{e_3} c \xrightarrow{e_6} e \xrightarrow{e_7} d \xrightarrow{e_4} a$$



2.2. Árboles

En 1857, Arthur Cayley estudió el problema de enumeración de los isómeros, compuestos químicos con idéntica composición (fórmula) pero diferente estructura molecular. Para ello representó cada compuesto, mediante un grafo donde los vértices representan átomos y los lados la existencia de enlaces químicos.

Butano (C_4H_{10})Isobutano (C_4H_{10})

Cayley estudió el siguiente problema:

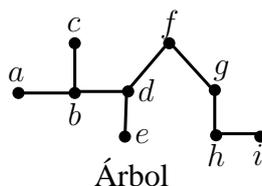
Fijado el número n de átomos de carbono determinar el número de compuestos químicos con idéntica composición (la misma fórmula) pero con distinta estructura molecular.

Esto es equivalente a lo siguiente:

¿ Cuántos grafos sin ciclos con vértices de grado 4 y 1 existen?

Esto motiva la siguiente definición:

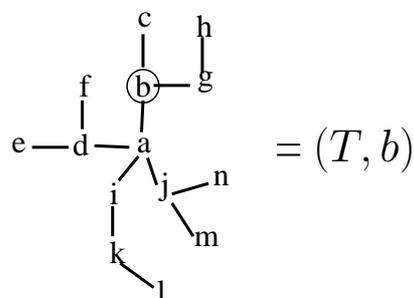
Definición 2.7. *Un árbol es un grafo conexo que no contiene ciclos.*



Denotaremos por $\mathcal{A}[n]$ al conjunto de todos los árboles con vértices en $\{1, 2, \dots, n\}$.

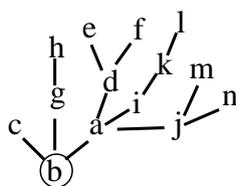
Si U es un conjunto finito, entonces $\mathcal{A}[U]$ denotará al conjunto formado por todos los árboles con vértices en U . Por ejemplo, el árbol de la figura de arriba pertenece a $\mathcal{A}[a, b, c, d, e, f, g, h, i]$.

Definición 2.8. *Un árbol con raíz es un par (T, r) en donde T es un árbol y r es un vértice que se denomina la raíz de T .*



Árbol con raíz

Elegir una raíz r introduce una orientación sobre T que va desde la raíz hasta los vértices de grado 1. De esta manera, el árbol quedará representado por:



Partes de un árbol con raíz:

1. Las *hojas* de (T, r) son los vértices de grado 1, $H(T)$ es el conjunto de hojas.
2. Los *vértices internos* de (T, r) son aquellos que tienen grado mayor que 1, $Iv(T)$ es el conjunto de los vértices internos.
3. El *nivel* o *profundidad* de un vértice v de (T, r) es la longitud del camino que comienza en r y finaliza en v , se denota $p(v)$.

En el ejemplo anterior $p(k) = 3$.

4. La *altura* de (T, r) se define como $Alt(T) = \max\{p(v) : v \in T\}$.

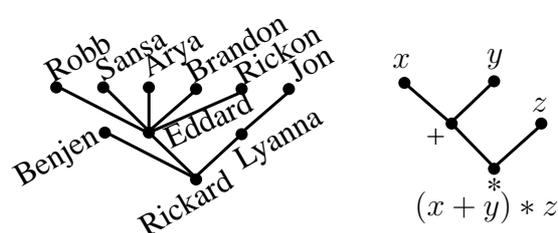
En el ejemplo anterior $Alt(T) = 4$.

5. Para cualquier vértice v de (T, r) excepto la raíz, v es el *padre* de u y u es *hijo* de v si existe un lado que va de v a u siguiendo la dirección que induce la raíz r de T .

En el ejemplo anterior a es padre de d , i y j , a quienes se les suele llamar hermanos pues tienen el mismo padre.

6. Decimos que v es *descendiente* de u si existe un camino que va de u a v y $p(v) > p(u)$.
7. Si cada vértice interno tiene m hijos ordenados entonces (T, r) se denomina árbol *m-ario*.

Algunas aplicaciones de árboles incluyen la representación de árboles genealógicos y de operaciones aritméticas agrupadas, donde los vértices más internos corresponden a las operaciones que se deben aplicar primero.

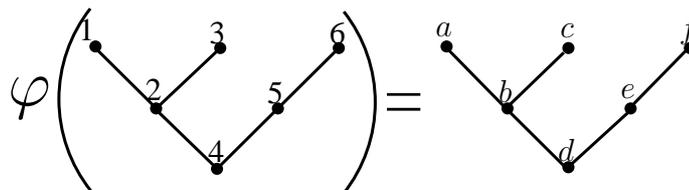


2.3. Reetiquetamiento de árboles

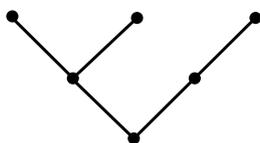
A pesar de que representamos los árboles usando puntos, etiquetados por miembros de un conjunto de vértices estamos interesados en la estructura abstracta detrás de esta definición. Esto es, si $T = (V, L)$ y $T' = (V', L')$ son árboles con raíz y existe una biyección $\varphi : V \rightarrow V'$ tal que $\{u, v\} \in L$ si y solo si $\{\varphi(u), \varphi(v)\} \in L'$ entonces los dos árboles con raíz son idénticos cuando se representan como diagramas, excepto por las etiquetas correspondientes a los puntos. Es decir, T' es el resultado de reetiquetar los vértices de T usando la biyección φ . De esta manera denotaremos por $\varphi(T) = T'$ a la correspondiente aplicación de φ sobre cada vértice del árbol T . En este caso diremos que φ es un *isomorfismo* de T en T' y que T es isomorfo a T' .

Ejemplo 2.2. Reetiquetamiento de un árbol

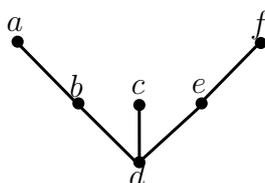
Sea φ una función definida por, $\varphi(1) = a$, $\varphi(2) = b$, $\varphi(3) = c$, $\varphi(4) = d$, $\varphi(5) = e$ y $\varphi(6) = f$ entonces:



Si los representáramos sin etiquetas, ambos árboles son idénticos a:

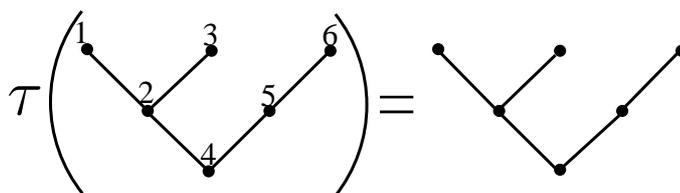


En cambio si comparamos cualquiera de los dos árboles de arriba con el siguiente árbol:

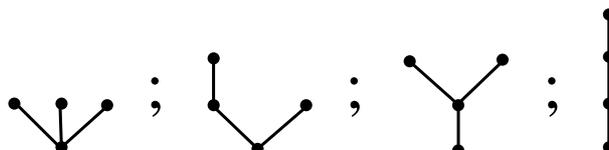


Nos podemos dar cuenta de que no existe isomorfismo entre ellos debido a que sus diagramas sin etiquetas son diferentes.

Podemos referirnos entonces a un árbol sin etiquetas como el *tipo de isomorfismo* que este posee. Lo que ocurre formalmente es que la relación binaria isomorfismo de árboles sobre el conjunto $\mathcal{A}[n]$ es una relación de equivalencia y la clase de un árbol T es el conjunto formado por todos los árboles que se obtienen como reetiquetamiento sobre los vértices de T . Esto nos dice que etiquetar es irrelevante cuando consideramos la clase de equivalencia de T . Por esta razón, la clase de T no es más que el árbol T sin etiquetas, la cual denotaremos por $\tau(T)$. Desde este punto en adelante, se usará la letra T en mayúscula para denotar árboles con etiquetas y la letra t en minúscula para denotar árboles sin etiquetas.



Denotaremos $\mathbb{T}(\mathcal{A}[n])$ al conjunto de todos los tipos de isomorfismos de árboles con n -vértices. Así pues, todos los tipos de isomorfismos para árboles de 4 vértices ($\mathbb{T}(\mathcal{A}[4])$) son:

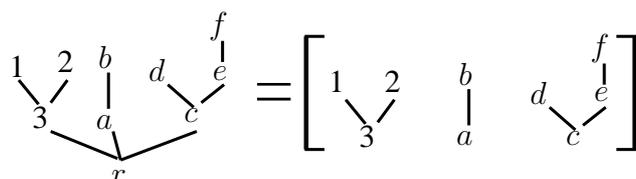


Concluimos esta introducción presentando la siguiente notación para árboles con raíz. En esta notación \bullet denotará el tipo de isomorfismo del árbol singular, con un solo vértice.

Ahora bien, sea T un árbol con raíz r , supongamos que T_1, T_2, \dots, T_k son los subárboles de T cuyas raíces están conectadas a r . Denotaremos a T por:

$$T = [T_1 T_2 \dots T_k]_r$$

Cuando r está dado explícitamente escribimos $T = [T_1 T_2 \dots T_k]$. Por ejemplo:



Si t_1, t_2, \dots, t_k son los tipos de isomorfismo de los árboles T_1, T_2, \dots, T_k entonces denotaremos por $B_+(t_1, t_2, \dots, t_k)$ al tipo de isomorfismo de $[T_1 T_2 \dots T_k]_r$. Por ejemplo:



Definición 2.9. Sea $T \in \mathcal{A}[n]$, un automorfismo de T es una permutación $\theta : \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{1, 2, \dots, n\}$ tal que $\theta(T) = T$.

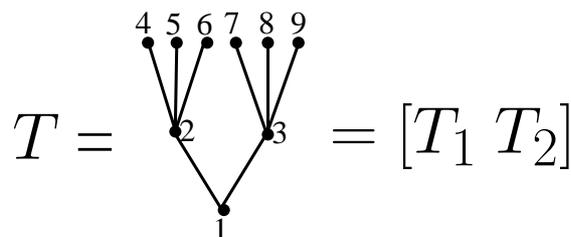
$Aut(T)$ está definido como el conjunto de todos los automorfismos de T . Es decir:

$$Aut(T) = \{\theta \in S_n : \theta(T) = T\}$$

Ilustraremos esta definición usando un árbol (V, L) dado por:

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$$

$$L = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 4\}, \{2, 5\}, \{2, 6\}, \{3, 7\}, \{3, 8\}, \{3, 9\}\}$$



Si $\theta \in Aut(T)$ entonces $\theta(T) = T$, es decir:

$$\theta(T) = \begin{array}{c} \theta(4) \theta(5) \theta(6) \theta(7) \theta(8) \theta(9) \\ \diagdown \quad | \quad / \quad \diagdown \quad | \quad / \\ \theta(2) \quad \theta(3) \\ \diagdown \quad / \\ \theta(1) \end{array} = T$$

De esta manera $\theta(1) = 1$ y además intercambia los árboles T_1 y T_2 o los deja fijos. Si los deja fijos entonces θ permuta a las hojas de T_1 y a las hojas de T_2 . Por lo tanto:

$$|Aut(T)| = 3!3!2! = 72$$

Proposición 2.1. Sean $T_1, T_2 \in \mathcal{A}[n]$:

1. $Aut(T_1)$ es un subgrupo de S_n .
2. Si $\tau(T_1) = \tau(T_2) = t$ entonces:

$$Aut(T_1) \cong Aut(T_2)$$

3. Sean T_1 y T_2 árboles con raíz cuyos conjuntos de vértices son U_1 y U_2 respectivamente. Supongamos que $\tau(T_1) = \tau(T_2)$ y que $Hom(T_1, T_2)$ es el conjunto formado por todas las biyecciones $\varphi : U_1 \rightarrow U_2$ tales que $\varphi(T_1) = T_2$. Entonces:

$$|Aut(T_2)| = |Hom(T_1, T_2)|$$

Demostración.

1. Sean $T \in \mathcal{A}[n]$ y $\theta_1, \theta_2 \in Aut(T)$.

La permutación identidad claramente es un automorfismo de T .

Ahora bien:

$$(\theta_2 \circ \theta_1)(T) = \theta_2(\theta_1(T)) = \theta_2(T) = T$$

Por lo tanto $\theta_2 \circ \theta_1 \in Aut(T)$. Por último:

$$\begin{aligned} \theta(T) = T &\Leftrightarrow \theta^{-1}(\theta(T)) = \theta^{-1}(T) \\ &\Leftrightarrow T = \theta^{-1}(T) \end{aligned}$$

Por lo tanto $\theta^{-1} \in Aut(T)$ y en consecuencia, $Aut(T)$ es un subgrupo de S_n .

2. Sea $\delta : [n] \rightarrow [n]$ una permutación tal que $\delta(T_1) = T_2$ y sea $\theta \in \text{Aut}(T_1)$ definimos:

$$\psi : \text{Aut}(T_1) \rightarrow \text{Aut}(T_2)$$

Definida por $\psi(\theta) = \delta \circ \theta \circ \delta^{-1}$, queremos demostrar que ψ es un isomorfismo de grupos.

En efecto:

$$\begin{aligned} \psi(\theta) \circ \psi(\theta') &= \delta \circ \theta \circ \delta^{-1} \circ \delta \circ \theta' \circ \delta^{-1} \\ &= \delta \circ \theta \circ \theta' \circ \delta^{-1} \\ &= \psi(\theta \circ \theta') \end{aligned}$$

Por lo tanto ψ es un homomorfismo de grupos.

Sea $\theta \in \text{Ker}(\psi)$, tenemos que:

$$\psi(\theta) = \delta \circ \theta \circ \delta^{-1} = e$$

Donde e es la permutación identidad, así pues:

$$\begin{aligned} \delta \circ \theta \circ \delta^{-1} = e &\Leftrightarrow \delta \circ \theta \circ \delta^{-1} \circ \delta = e \circ \delta \\ &\Leftrightarrow \delta \circ \theta = \delta \\ &\Leftrightarrow \delta^{-1} \circ \delta \circ \theta = \delta^{-1} \circ \delta \\ &\Leftrightarrow \theta = e \end{aligned}$$

Por lo tanto $\text{Ker}(\psi) = e$ y en consecuencia ψ es inyectiva.

Ahora bien, sea $\theta' \in \text{Aut}(T_2)$ entonces para $\delta^{-1} \circ \theta' \circ \delta \in \text{Aut}(T_1)$ se tiene:

$$\psi(\delta^{-1} \circ \theta' \circ \delta) = \delta \circ \delta^{-1} \circ \theta' \circ \delta \circ \delta^{-1} = \theta'$$

Por lo tanto ψ es sobreyectiva.

Así pues, ψ es homomorfismo, inyectiva y sobreyectiva, por lo tanto ψ es un isomorfismo de grupos.

3. Sea $\varphi \in \text{Hom}(T_1, T_2)$ fijo, y sea $g_\varphi : \text{Aut}(T_2) \rightarrow \text{Hom}(T_1, T_2)$ definido por:

$$g_\varphi(\theta) = \theta \circ \varphi$$

Veamos que g_φ es una biyección, en efecto:

Sean $\theta_1, \theta_2 \in \text{Aut}(T_2)$ tales que $g_\varphi(\theta_1) = g_\varphi(\theta_2)$ entonces:

$$\begin{aligned} g_\varphi(\theta_1) = g_\varphi(\theta_2) &\Leftrightarrow \theta_1 \circ \varphi = \theta_2 \circ \varphi \\ &\Leftrightarrow \theta_1 \circ \varphi \circ \varphi^{-1} = \theta_2 \circ \varphi \circ \varphi^{-1} \\ &\Leftrightarrow \theta_1 = \theta_2 \end{aligned}$$

Y por lo tanto, g_φ es inyectiva.

Ahora bien, sea $\alpha \in \text{Hom}(T_1, T_2)$ entonces si consideramos $\alpha \circ \varphi^{-1} \in \text{Aut}(T_2)$ se cumple que:

$$g_\varphi(\alpha \circ \varphi^{-1}) = \alpha \circ \varphi^{-1} \circ \varphi = \alpha$$

Por lo tanto, g_φ es sobreyectiva. Así, hemos obtenido que g_φ es biyectiva y en consecuencia, como existe una biyección entre $\text{Hom}(T_1, T_2)$ y $\text{Aut}(T_2)$ podemos asegurar que:

$$|\text{Aut}(T_2)| = |\text{Hom}(T_1, T_2)|$$

□

La parte (2) de esta proposición nos permite enunciar lo siguiente:

Definición 2.10. Sea $T \in \mathcal{A}[n]$ tal que $\tau(T) = t$, definimos la simetría de T como:

$$\sigma(t) = |\text{Aut}(T)|$$

Teorema 2.1. Sea $T \in \mathcal{A}[n]$ tal que $\tau(T) = t$, entonces:

$$\sigma(t) = \prod_{i=1}^k m_i! \sigma(t'_i)^{m_i}$$

en donde t'_1, t'_2, \dots, t'_k son los diferentes tipos de isomorfismo de los árboles que se conectan con la raíz de T y m_i es el número de veces en que aparece repetido t'_i .

Demostración.

Sea $T \in \mathcal{A}[n]$ tal que $\tau(T) = t$, sean T_1, T_2, \dots, T_l los subárboles de T cuyas raíces se conectan a la raíz r de T , es decir:

$$T = [T_1 T_2 \dots T_l]_r$$

Sean t'_1, t'_2, \dots, t'_k los diferentes tipos de isomorfismos que aparecen en la lista:

$$\tau(T_1), \tau(T_2), \dots, \tau(T_l)$$

Definimos para cada $i \in \{1, 2, \dots, k\}$ el conjunto:

$$B_i = \{j \in \{1, 2, \dots, l\} : \tau(T_j) = t'_i\}$$

Ahora bien, para $\theta \in \text{Aut}(T)$ tenemos que:

$$\theta \in \text{Aut}(T) \Leftrightarrow \theta(r) = r \text{ y } \{\theta(T_j) : j = 1, 2, \dots, l\} = \{T_j : j = 1, 2, \dots, l\}$$

es decir, θ deja fija a la raíz de T y la restricción de θ al subárbol T_j es un automorfismo de T_j o permuta a T_j con otro subárbol de igual tipo de isomorfismo.

Esto nos dice que θ se puede descomponer de la siguiente manera:

$$\theta = \left\{ \left(\{\theta_j\}_{j \in B_i}, \widehat{\theta}_i \right) \right\}_{i=1}^k$$

En donde:

- θ_j es la restricción de θ sobre el conjunto de vértices del subárbol T_j .
- $\widehat{\theta}_i : B_i \rightarrow B_i$ es una biyección definida por:

$$\widehat{\theta}_i(j) = j' \Leftrightarrow \theta_j(T_j) = T_{j'}$$

en otras palabras, $\widehat{\theta}_i$ es una permutación en el conjunto de subárboles que tienen tipo de isomorfismo t'_i .

Esto nos dice que si $j \in B_i$ entonces:

$$\theta_j \in \text{Hom}(T_j, T_{\widehat{\theta}_i(j)})$$

Sea S_{B_i} el conjunto formado por todas las biyecciones de B_i en B_i . Definimos $\text{Aut}(T_1, T_2, \dots, T_k)$ como el conjunto formado por todos los subconjuntos de la forma:

$$\left\{ \left(\{\gamma_j\}_{j \in B_i}, \beta_i \right) \right\}_{i=1}^k$$

en donde $\beta_i \in S_{B_i}$ y $\gamma_j \in \text{Hom}(T_j, T_{\beta_i(j)})$. Sea, $\psi : \text{Aut}(T) \rightarrow \text{Aut}(T_1, T_2, \dots, T_l)$ definida por:

$$\psi(\theta) = \left\{ \left(\{\theta_j\}_{j \in B_i}, \widehat{\theta}_i \right) \right\}_{i=1}^k$$

Veamos que ψ es una biyección. Sean $\theta, \alpha \in \text{Aut}(T)$ tales que $\psi(\theta) = \psi(\alpha)$, entonces

$$\begin{aligned} \psi(\theta) = \psi(\alpha) &\Leftrightarrow \left\{ \left(\{\theta_j\}_{j \in B_i}, \widehat{\theta}_i \right) \right\}_{i=1}^k = \left\{ \left(\{\alpha_j\}_{j \in B_i}, \widehat{\alpha}_i \right) \right\}_{i=1}^k \\ &\Leftrightarrow \theta = \alpha \end{aligned}$$

Por lo tanto ψ es inyectiva. Ahora bien, sea:

$$\left\{ \left(\{\gamma_j\}_{j \in B_i}, \beta_i \right) \right\}_{i=1}^k \in \text{Aut}(T_1, T_2, \dots, T_k)$$

Sea $\gamma \in S_n$ definida por $\gamma(x) = \gamma_j(x)$ si $x \in T_j$ para algún $j \in \{1, 2, \dots, l\}$. Adicionalmente $\gamma(r) = r$. Con estas condiciones es claro que $\gamma \in \text{Aut}(T)$ y $\psi(\gamma) = \left\{ \left(\{\gamma_j\}_{j \in B_i}, \beta_i \right) \right\}_{i=1}^k$. Esto demuestra que ψ es sobreyectiva y por lo tanto ψ es biyectiva.

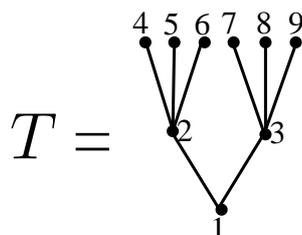
Note que $m_i = |B_i|$, luego:

$$\begin{aligned} \sigma(t) = |\text{Aut}(T)| &= |\text{Aut}(T_1, T_2, \dots, T_l)| \\ &= \prod_{i=1}^k \prod_{\widehat{\alpha}_i \in S_{B_i}} \left| \prod_{j \in B_i} \text{Hom}(T_j, T_{\widehat{\alpha}_i(j)}) \times \{\widehat{\alpha}_i\} \right| \\ &= \prod_{i=1}^k \prod_{\widehat{\alpha}_i \in S_{B_i}} \prod_{j \in B_i} |\text{Hom}(T_j, T_{\widehat{\alpha}_i(j)})| \\ &= \prod_{i=1}^k \prod_{\widehat{\alpha}_i \in S_{B_i}} \prod_{j \in B_i} |\text{Aut}(T_j)| \\ &= \prod_{i=1}^k \prod_{\widehat{\alpha}_i \in S_{B_i}} \prod_{j \in B_i} \sigma(t'_i) \\ &= \prod_{i=1}^k \prod_{\widehat{\alpha}_i \in S_{B_i}} (\sigma(t'_i))^{|B_i|} \\ &= \prod_{i=1}^k \prod_{\widehat{\alpha}_i \in S_{B_i}} \sigma(t'_i)^{m_i} \\ &= \prod_{i=1}^k m_i! \sigma(t'_i)^{m_i} \end{aligned}$$

□

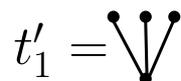
Ejemplo 2.3. *Simetría*

Consideremos nuevamente el árbol que se usó como ejemplo anteriormente:



En primer lugar, la simetría depende del tipo de isomorfismo de T , por lo que a partir de este punto consideraremos el tipo de isomorfismo t del árbol T .

Luego, se puede notar que los subárboles de T que se conectan a la raíz de T tienen tipo de isomorfismo igual a:



Como t'_1 está repetido dos veces entonces $m_1 = 2$. Ahora bien, es necesario calcular $\sigma(t'_1)$, para lo cual es necesario ver los tipos de isomorfismo de los subárboles cuyas raíces se conectan con la raíz de t'_1 , estos son todos iguales a \bullet . Es claro que $\sigma(\bullet) = 1$ y por lo tanto:

$$\sigma(t) = 2!(3!)^2 = 72$$

Corolario 2.1. *Sea $T \in \mathcal{A}[n]$ con tipo de isomorfismo t , si $A_t = \{T \in \mathcal{A}[n] : \tau(T) = t\}$ entonces:*

$$|A_t| = \frac{n!}{\sigma(t)}$$

Demostración.

Sea $S_n/Aut(T)$ el conjunto de las clases laterales a derecha de $Aut(T)$ en S_n .

$$S_n/Aut(T) = \{Aut(T)_\theta : \theta \in S_n\}$$

Sea:

$$g : S_n/Aut(T) \rightarrow A_t$$

definida por:

$$g(Aut(T)_\theta) = \theta^{-1}(T)$$

Notemos que:

$$\begin{aligned}
Aut(T)_\theta = Aut(T)_{\theta'} &\Leftrightarrow \theta \circ \theta'^{-1} \in Aut(T) \\
&\Leftrightarrow \theta \circ \theta'^{-1}(T) = T \\
&\Leftrightarrow \theta'^{-1}(T) = \theta^{-1}(T) \\
&\Leftrightarrow g(Aut(T)_\theta) = g(Aut(T)_{\theta'})
\end{aligned}$$

Esto demuestra que g esta bien definida y además que es inyectiva.

Ahora bien, sea T' tal que $\tau(T') = t$, entonces existe $\alpha \in S_n$ tal que:

$$\alpha(T') = T \Leftrightarrow T' = \alpha^{-1}(T) = g(Aut(T)_\alpha)$$

por lo tanto g es sobreyectiva.

Así g es biyectiva y usando el teorema de Lagrange de la teoría de grupos se sigue que:

$$|A_t| = |S_n/Aut(T)| = \frac{o(S_n)}{o(Aut(T))} = \frac{n!}{\sigma(t)}$$

De donde:

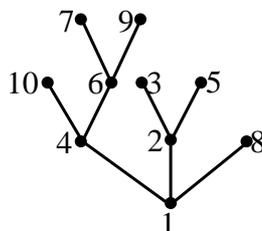
$$|A_t| = \frac{n!}{\sigma(t)}$$

□

Definición 2.11. Sea $T \in \mathcal{A}[n]$, decimos que T es un árbol creciente si todo camino de T que comienza en la raíz y finaliza en una hoja es creciente. Es decir, cualquier camino que comience en la raíz de T y finalice en una hoja tiene la forma:

$$1 < v_1 < v_2 < \dots < v_k$$

Note que la raíz de cualquier árbol creciente con etiquetas en $\{1, 2, \dots, n\}$ es 1.



Denotaremos al conjunto de todos los árboles crecientes con vértices en $[n]$ por $\mathcal{A}^\uparrow[n]$.

Definición 2.12. Sea $T = [T_1 T_2 \dots T_k]_r$ un árbol tal que $\tau(T) = t$ y $\tau(T_i) = t_i$ para cada $i = 1, 2, \dots, k$ se define el factorial de t recursivamente como:

$$\bullet! = 1 \quad , \quad t! = |t| t_1! t_2! \dots t_k!$$

en donde $|t|$ es el número de vértices de T .

Ejemplo 2.4. Cálculo de factorial de un árbol

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} ! = 5 \cdot \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} ! \bullet ! = 5 \cdot 3 \cdot (\bullet!)^2 \cdot 1 = 5 \cdot 3 = 15$$

$$\begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} ! = 4 \cdot \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} ! = 4 \cdot 3 \cdot \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} ! = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot \bullet ! = 4!$$

Nótese como en el segundo ejemplo el factorial del árbol coincide con el factorial de cuatro. Esto no es casual, de hecho si t es el tipo de isomorfismo de un árbol 1-ario, es decir, un orden lineal con n vértices, entonces $t! = n!$.

Proposición 2.2. Sea

$$A_t^\uparrow = \{T \in \mathcal{A}^\uparrow[n] : \tau(T) = t\}$$

entonces:

$$|A_t^\uparrow| = \frac{n!}{\sigma(t)t!}$$

es decir:

$$t!|A_t^\uparrow| = |A_t|$$

Demostración.

Sean U un conjunto finito contenido en \mathbb{N} y $T \in \mathcal{A}[U]$. $Ord(T)$ denotará al árbol creciente que resulta de reetiquetar los vértices de T siguiendo la siguiente igualdad recursiva:

$$Ord(\bullet_r) = \bullet_r$$

$$Ord(T) = [Ord(T_1)Ord(T_2) \dots Ord(T_k)]$$

En donde $[T_1 T_2 \dots T_k]$ es el árbol que se obtiene al transponer la raíz de T con el mínimo de U . Veamos en la siguiente figura un ejemplo de aplicación de Ord a un árbol T :

$$T = \begin{array}{c} 2 \quad 1 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 6 \quad 5 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} 2 \quad 4 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 6 \quad 5 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 1 \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} 6 \quad 4 \quad 5 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 1 \end{array} = \text{Ord} \left(\begin{array}{c} 2 \quad 1 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 6 \quad 5 \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \end{array} \right)$$

Definimos sobre A_t la siguiente relación de equivalencia:

$$T \sim T' \Leftrightarrow \text{Ord}(T) = \text{Ord}(T')$$

Luego, la clase de T está unívocamente determinada por el árbol $T' = \text{Ord}(T)$ y así:

$$\begin{aligned} T \in \overline{T'} &\Leftrightarrow \text{Ord}(T) = \text{Ord}(T') \\ &\Leftrightarrow [\text{Ord}(T_1) \dots \text{Ord}(T_k)] = [\text{Ord}(T'_1) \dots \text{Ord}(T'_k)] \\ &\Leftrightarrow T_j \in \overline{T'_j} \quad \forall j = 1, 2, \dots, k \end{aligned}$$

De donde:

$$|\overline{T'}| = n |\overline{T'_1}| |\overline{T'_2}| \dots |\overline{T'_k}|$$

es decir, las n maneras diferentes de elegir a la raíz de T , multiplicado por la cantidad de maneras diferentes de elegir a la raíz de cada uno de los subárboles de T cuyas raíces se unen con la raíz de T , y así sucesivamente hasta las hojas.

Al ejecutar la recursión de esta igualdad obtenemos que:

$$|\overline{T'}| = \tau(T')! = t!$$

Ahora como $|A_t / \sim| = |A_t^\uparrow|$, entonces:

$$\begin{aligned} |A_t| &= \sum_{\overline{T'} \in A_t / \sim} |\overline{T'}| \\ &= t! \sum_{\overline{T'} \in A_t / \sim} 1 \\ &= t! |A_t / \sim| \\ &= t! |A_t^\uparrow| \end{aligned}$$

□

Capítulo 3

Series formales

3.1. Series formales en una variable

Fue Laplace quien descubrió el método de funciones generatrices y la correspondencia entre operaciones conjuntísticas y operaciones entre series formales. Usó este método para resolver problemas de combinatoria.

Desde entonces muchos investigadores han trabajado siguiendo la misma idea de Laplace, entre ellos se encuentran F. Bergeron, G. Labelle and P. Leroux en [9] quienes generalizan las operaciones entre series formales con su famosa teoría de especies la cual es una interpretación funtorial y conjuntística de las operaciones entre series formales. M. Méndez en [8] hace una importante contribución literaria al definir las operaciones entre series formales utilizando disimuladamente el lenguaje de la teoría de especies, es decir, sin usar el concepto de funtor entre categorías. Su técnica consiste básicamente en interpretar a una serie F como una regla que envía a cualquier conjunto finito de tamaño n en el correspondiente coeficiente n -ésimo de la serie F . Esta interpretación es poco formal, sin embargo es muy útil ya que nos permite representar una operación entre series formales con operaciones entre conjuntos sin utilizar complejo concepto de especies. En esta sección usaremos la misma técnica introducida por M. Méndez en [8], excepto que los coeficientes de una serie formal son elementos de un álgebra.

De aquí en adelante \mathbb{R} denotará al cuerpo de los números reales.

Definición 3.1. *Un \mathbb{R} -espacio vectorial \mathbb{A} es una \mathbb{R} -álgebra si existe una operación binaria*

$$\cdot : \mathbb{A} \times \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{A}$$

tal que para todo $u, v, w \in \mathbb{A}$ y $\lambda \in \mathbb{K}$ se cumple:

1. $u \cdot (v \cdot w) = (u \cdot v) \cdot w$
2. $u \cdot (v + w) = u \cdot v + u \cdot w$

$$3. (v + w) \cdot u = v \cdot u + w \cdot u$$

$$4. u \cdot (\lambda v) = (\lambda u) \cdot v = \lambda(u \cdot v)$$

· se denomina la multiplicación de \mathbb{A} . Decimos que \mathbb{A} es conmutativa si $u \cdot v = v \cdot u$ para todo $u, v \in \mathbb{A}$. Decimos que \mathbb{A} es un álgebra con unidad si existe $\mathbf{1} \in \mathbb{A}$ tal que $u \cdot \mathbf{1} = \mathbf{1} \cdot u = u$ para todo $u \in \mathbb{A}$, $\mathbf{1}$ se denomina la unidad de \mathbb{A} .

Ejemplo 3.1. A continuación se muestran algunos ejemplos de \mathbb{R} -álgebras

1. \mathbb{R} con su propia multiplicación y unidad es un álgebra conmutativa con unidad.
2. El conjunto de todas las matrices de orden $n \times n$ con entradas en \mathbb{R} es un álgebra no conmutativa con unidad. Para este caso la multiplicación del álgebra es el producto usual de matrices y $\mathbf{1}$ es la matriz identidad de orden $n \times n$
3. El conjunto de todos los polinomios con coeficientes en \mathbb{R} es un álgebra conmutativa con unidad. Para este caso la multiplicación del álgebra es el producto de polinomios y $\mathbf{1}$ es la unidad del cuerpo \mathbb{R} .
4. Sea S un conjunto no vacío y \mathbb{A} una \mathbb{R} -álgebra. El conjunto \mathbb{A}^S cuyos elementos son funciones de S en \mathbb{A} es un álgebra. En este caso la suma y la multiplicación están definidas punto a punto, es decir, para cada $f, g \in \mathbb{A}^S$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $s \in S$

$$(f + g)(s) = f(s) + g(s)$$

$$(f \cdot g)(s) = f(s) \cdot g(s)$$

$$(\lambda f)(s) = \lambda f(s)$$

De ahora en adelante \mathbb{A} es una \mathbb{R} -álgebra conmutativa con unidad $\mathbf{1}$. Definimos $\mathbb{A}[[x]]$ como el conjunto formado por todas las funciones $F : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{A}$, es decir, F es una sucesión de elementos de \mathbb{A} , denotaremos:

$$F = (F(0), F(1), \dots) = (f_0, f_1, \dots)$$

la cual quedará escrita por:

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n$$

$F(x)$ se denomina serie formal de potencias sobre \mathbb{A} y:

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \frac{x^n}{n!}$$

es la serie formal de tipo exponencial asociada a F . En general nos referimos a series formales genéricas con letras mayúsculas y a sus coeficientes con la misma letra pero en

minúsculas.

Las series formales suelen ser llamadas con los mismos nombres de las funciones analíticas a las que ellas representarían en caso de que converjan. Por ejemplo, la serie cuyos coeficientes son todos iguales a la unidad $\mathbf{1}$ es la exponencial.

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{1} \frac{x^n}{n!}$$

De igual manera, la serie cuya sucesión es $(\mathbf{1}, 2!\mathbf{1}, 3!\mathbf{1}, 4!\mathbf{1}, \dots)$ es la serie geométrica.

$$\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - \mathbf{1}x} = \sum_{n=0}^{\infty} n!\mathbf{1} \frac{x^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{1}x^n$$

3.1.1. Operaciones fundamentales con series formales

Las operaciones fundamentales entre series formales son la suma, el producto y la sustitución. En primer lugar definiremos la suma y el producto, la sustitución será definida en otra sección. Dadas dos series formales F y G definimos:

Definición 3.2. Suma

Definimos la *suma* de F más G como la serie formal de la suma término a término de sus respectivos coeficientes:

$$(F + G)(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (f_n + g_n) \frac{x^n}{n!} \quad (3.1)$$

Definición 3.3. Producto

Definimos el *producto* de F por G de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} (F \cdot G)(x) &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n \frac{x^n}{n!} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} g_n \frac{x^n}{n!} \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k_1+k_2=n} \frac{f_{k_1} g_{k_2}}{k_1! k_2!} \right) x^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n \frac{f_k g_{n-k}}{k! (n-k)!} \right) x^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n n! \frac{f_k g_{n-k}}{k! (n-k)!} \right) \frac{x^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f_k g_{n-k} \right) \frac{x^n}{n!} \end{aligned}$$

El coeficiente n -ésimo del producto:

$$(f \cdot g)_n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f_k g_{n-k} \quad (3.2)$$

es conocido como el producto de Cauchy de las series F y G .

Cabe destacar que $\binom{n}{k}$ cuenta el número de diferentes subconjuntos de tamaño k que se pueden obtener a partir de un conjunto de tamaño n . Esta observación no es casual, de hecho, motiva a introducir la siguiente sección.

3.1.2. Interpretación combinatoria de las series formales en una variable

A menudo las series formales tienen asociadas familias de estructuras combinatorias que utilizan como base un conjunto finito. Es decir, en muchos casos el coeficiente f_n de una serie F es igual a $\lambda_n a_n$, en donde $a_n \in \mathbb{A}$ y λ_n es el cardinal de un conjunto F_n de estructuras combinatorias sobre un conjunto de n elementos (pensados frecuentemente como vértices). Por ejemplo, el coeficiente n -ésimo de la serie geométrica $\frac{1}{1-x}$ es $n! \mathbf{1}$, y $n!$ es el cardinal del conjunto S_n de permutaciones de un conjunto de n elementos.

Las familias de estructuras combinatorias pueden construirse sobre un conjunto finito de vértices C . A estas estructuras combinatorias las llamaremos configuraciones. Las operaciones entre series formales se traducen entonces en operaciones conjuntísticas entre las configuraciones asociadas a las series involucradas, y se pueden expresar de una manera más simple cuando ponemos los términos de las series a depender de conjuntos finitos arbitrarios en vez del subíndice n o del conjunto $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$. Esto motiva la siguiente definición:

Definición 3.4. Sea C un conjunto finito arbitrario de cardinal n . Dada una serie formal F se define $F[C]$ como el coeficiente n -ésimo de la serie $F(x)$.

$$F[C] := f_n = \left[\frac{x^n}{n!} \right] (F(x))$$

Representaremos gráficamente el coeficiente $F[C]$ usando la notación gráfica de Labelle, como en la siguiente figura:



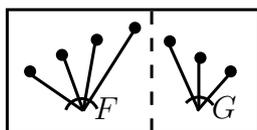
Desde la definición de suma en (3.1) obtenemos que:

$$(F + G)[C] = F[C] + G[C]$$

Análogamente, si C es un conjunto de cardinal n entonces de la ecuación (3.2) tenemos:

$$\begin{aligned} (F \cdot G)[C] &= (f \cdot g)_n \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f_k g_{n-k} \\ &= \sum_{k=0}^n \left(\sum_{\substack{C_1 \subseteq C \\ |C_1|=k}} 1 \right) f_k g_{n-k} \\ &= \sum_{k=0}^n \sum_{\substack{C_1 \subseteq C \\ |C_1|=k}} F[C_1] \cdot G[C - C_1] \\ &= \sum_{C_1 + C_2 = C} F[C_1] \cdot G[C_2] \end{aligned}$$

La suma de arriba es entonces sobre todas las descomposiciones de C en pares de subconjuntos disjuntos (C_1, C_2) tales que $C_1 \cup C_2 = C$. Gráficamente representaremos a $F \cdot G[C]$ de la siguiente manera:



A modo de ejemplo, podemos calcular el coeficiente de grado cuatro del producto de la serie exponencial por la serie geométrica. Si C es un conjunto de cardinal 4 entonces:

$$\left(e^x \cdot \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - \mathbf{1}x} \right) [C] = \sum_{C_1 + C_2 = C} e^x[C_1] \cdot \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - \mathbf{1}x}[C_2] = \sum_{C_1 + C_2 = C} |C_2|! \mathbf{1} = \sum_{k=0}^4 k! \mathbf{1} = (34) \mathbf{1}$$

Proposición 3.1. *El producto de tres o más series formales es asociativo y:*

$$F_1(x) \cdot F_2(x) \cdots F_k(x)$$

denotará el producto de k series sin importar el orden de asociación.

En el caso de una multiplicación de 3 series formales, si C es un conjunto de cardinal n , tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} (F_1 \cdot F_2 \cdot F_3)[C] &= \left[\frac{x^n}{n!} \right] \left((F_1(x)F_2(x))F_3(x) \right) \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left(\sum_{s=0}^k \binom{k}{s} f_s^{(1)} f_{k-s}^{(2)} \right) f_{n-k}^{(3)} \\ &= \sum_{k=0}^n \sum_{s=0}^k \binom{n}{k} \binom{k}{s} f_s^{(1)} f_{k-s}^{(2)} f_{n-k}^{(3)} \end{aligned}$$

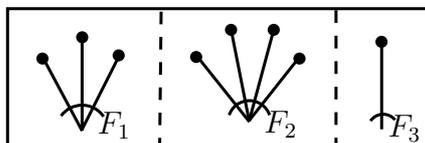
Sea B un subconjunto de tamaño k de C y E un subconjunto de tamaño s de B . ¿De cuántas maneras se puede obtener el par (E, B) ? Una vez fijado B , E se puede obtener de $\binom{k}{s}$ maneras diferentes y B se puede obtener de $\binom{n}{k}$ maneras diferentes. Por el principio de multiplicación, el número de maneras diferentes de obtener un par (E, B) es igual al producto $\binom{n}{k} \binom{k}{s}$. La aplicación que envía al par (E, B) en la tripleta $(E, B - E, C - B)$ es una biyección, por lo tanto:

$$\sum_{k=0}^n \sum_{s=0}^k \binom{n}{k} \binom{k}{s} f_s^{(1)} f_{k-s}^{(2)} f_{n-k}^{(3)} = \sum_{k=0}^n \sum_{s=0}^k \left(\sum_{\substack{E \subseteq B \subseteq C \\ |B|=k, |E|=s}} 1 \right) F_1[E] F_2[B - E] F_3[C - B]$$

Como la tripleta $(E, B - E, C - B)$ es una descomposición de C en 3 subconjuntos de cardinales s , $k - s$ y $n - k$ respectivamente y dado que k varía desde 0 hasta n y s varía desde 0 hasta k , entonces reescribimos:

$$\begin{aligned} &\sum_{k=0}^n \sum_{s=0}^k \left(\sum_{\substack{E \subseteq B \subseteq C \\ |B|=k, |E|=s}} 1 \right) F_1[E] F_2[B - E] F_3[C - B] \\ &= \sum_{k=0}^n \sum_{s=0}^k \left(\sum_{\substack{C_1 + C_2 + C_3 = C \\ |C_1|=s, |C_2|=k-s, |C_3|=n-k}} 1 \right) F_1[C_1] F_2[C_2] F_3[C_3] \\ &= \sum_{C_1 + C_2 + C_3 = C} F_1[C_1] \cdot F_2[C_2] \cdot F_3[C_3] \end{aligned}$$

Graficamente, un sumando del producto de tres series formales queda representado como sigue:



Nótese que:

$$\binom{n}{k} \binom{k}{s} = \frac{n!}{(n-k)!k!} \frac{k!}{(k-s)!s!} = \frac{n!}{s!(k-s)!(n-k)!}$$

Sabemos que $\binom{n}{k} \binom{k}{s}$ cuenta la cantidad de maneras posibles de descomponer a C en una tripleta de subconjuntos disjuntos (C_1, C_2, C_3) cuyos cardinales son s , $k-s$ y $n-k$ respectivamente, el valor $\frac{n!}{s!(k-s)!(n-k)!}$ se conoce como *número multinomial* y se denota por:

$$\binom{n}{s, k-s, n-k} = \frac{n!}{s!(k-s)!(n-k)!}$$

Podemos deducir entonces, de una manera análoga al caso de 3 series formales, que la fórmula para el producto de k series formales es la siguiente:

$$\begin{aligned} (F_1 \cdot F_2 \cdots F_k)[C] &= \sum_{n_1 + \cdots + n_k = n} n! \frac{f_{n_1}^{(1)}}{n_1!} \frac{f_{n_2}^{(2)}}{n_2!} \cdots \frac{f_{n_k}^{(k)}}{n_k!} \\ &= \sum_{C_1 + \cdots + C_k = C} F_1[C_1] \cdot F_2[C_2] \cdots F_k[C_k] \end{aligned}$$

Donde la suma de arriba está indexada sobre todas las descomposiciones de C en k -tuplas de subconjuntos disjuntos (C_1, C_2, \dots, C_k) cuya unión es C . Para este caso, el número multinomial $\binom{n}{n_1, n_2, \dots, n_k}$ cuenta las diferentes maneras de descomponer a C en k tuplas de subconjuntos disjuntos (C_1, \dots, C_k) tales que el cardinal de C_i es n_i .

Por lo tanto, hemos obtenido que:

$$\left(\prod_{j=1}^k F_j \right) [C] = \sum_{C_1 + \cdots + C_k = C} \prod_{j=1}^k F_j[C_j]$$

3.1.3. Topología de las series formales

Supongamos que $\{F_k(x)\}_{k \geq 0}$ es una secuencia en $\mathbb{A}[[x]]$, ¿cuándo converge esta sucesión a una serie $F(x)$?

$$F_k(x) = \sum_{n \geq 0} f_n^{(k)} \frac{x^n}{n!}, \quad F(x) = \sum_{n \geq 0} f_n \frac{x^n}{n!}$$

Podemos definir una topología en $\mathbb{A}[[x]]$ de la siguiente manera. Diremos que la sucesión de series formales $F_k(x)$ converge a $F(x)$ si y solo si:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f_n^{(k)} = f_n$$

para todo $n \geq 0$.

Es decir, $\{F_k(x)\}_{k \geq 0}$ converge a $F(x)$ si para cada $n \geq 0$, existe un natural K_n tal que si $k \geq K_n$ entonces $f_n^{(k)} = f_n$.

Supongamos que de manera general se desea sumar una cantidad arbitraria de series formales, ¿bajo qué condiciones converge esta suma?

Definición 3.5. *Sumabilidad*

Una sucesión de series formales $\{F_k(x)\}_{k \geq 0}$ es *sumable* si para todo $n \geq 0$ el coeficiente n -ésimo de $F_k(x)$ es el neutro de \mathbb{A} cuando k es suficientemente grande.

De este modo:

$$\sum_{k=0}^{\infty} F_k(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n^{(k)} \frac{x^n}{n!} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} f_n^{(k)} \right) \frac{x^n}{n!}$$

Esta definición tiene sentido pues hay una cantidad finita de elementos distintos del neutro de \mathbb{A} en la suma interna $\sum_{k=0}^{\infty} f_n^{(k)}$.

Es posible reformular la condición de sumabilidad en términos de la topología de series formales. Como para cada $n \geq 0$ existe k suficientemente grande tal que $f_n^{(k)} = 0$. Luego la sucesión $\{F_k(x)\}_{k \geq 0}$ es sumable si y solo si converge a cero. Es decir:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F_k(x) = 0 + 0 \frac{x}{1!} + 0 \frac{x^2}{2!} + \dots$$

Proposición 3.2. *Sea $\{F_k(x)\}_{k \geq 0}$ una sucesión de series formales en $\mathbb{A}[[x]]$. La serie $\sum_{k=0}^{\infty} F_k(x)$ converge si y solo si $F_k(x)$ converge a cero.*

De esta proposición se tiene:

Proposición 3.3. *Si $f_0 = 0$, entonces la serie $\sum_{k=0}^{\infty} F^k(x)$ es convergente.*

Demostración.

Si $k > n$:

$$\left[\frac{x^n}{n!} \right] F^k(x) = \sum_{n_1 + \dots + n_k = n} \binom{n}{n_1, \dots, n_k} \prod_{i=1}^k f_{n_i} = 0$$

debido a que en el índice de la suma anterior existe un j tal que $n_j = 0$.

Luego, por la proposición (3.2) $\sum_{k=1}^{\infty} F^k(x)$ converge.

□

Para lo que sigue $F^0(x) = \mathbf{1} + 0\frac{x}{1!} + 0\frac{x^2}{2!} + \dots = \mathbf{1}$

3.1.4. Substitución y exponencial

Consideremos la serie:

$$G(x) = g_1x + \sum_{n=2}^{\infty} g_n \frac{x^n}{n!}$$

La exponencial de $G(x)$ se define como la substitución de $G(x)$ en la serie e^x , es decir:

$$e^{G(x)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{G^k(x)}{k!}$$

como $g_0 = 0$ se sigue de la proposición (3.3) que $e^{G(x)}$ converge.

Por otra parte:

$$\left(\frac{G^k}{k!}\right)[C] = \frac{1}{k!} G^k[C] = \frac{1}{k!} \sum_{C_1 + \dots + C_k = C} G[C_1] \cdots G[C_k]$$

Como $g_0 = 0$ obtenemos que si $C_i = \emptyset$ para algún $i = 1, \dots, k$ entonces $G[C_i] = g_0 = 0$, por lo tanto, la suma de arriba es nula para todas las descomposiciones de C en las cuales al menos uno de los subconjuntos C_i sea vacío. Es decir:

$$\frac{1}{k!} \sum_{C_1 + \dots + C_k = C} G[C_1] \cdots G[C_k] = \frac{1}{k!} \sum_{\substack{C_1 + \dots + C_k = C \\ C_i \neq \emptyset}} G[C_1] \cdots G[C_k]$$

Note que al dividir entre $k!$ se está desordenando de todas las maneras posibles la descomposición (C_1, C_2, \dots, C_k) de C , obteniendo entonces un conjunto $\{C_1, \dots, C_k\}$ de subconjuntos no vacíos de C tales que su unión es C , es decir, una partición de C en k bloques. Así:

$$\frac{1}{k!} \sum_{\substack{C_1 + \dots + C_k = C \\ C_i \neq \emptyset}} G[C_1] \cdots G[C_k] = \sum_{\pi \in \Pi_k[C]} \prod_{B \in \pi} G[B]$$

donde $\Pi_k[C]$ es el conjunto de todas las particiones de C en k bloques.

De esta manera:

$$\left(\frac{G^k}{k!}\right)[C] = \sum_{\pi \in \Pi_k[C]} \prod_{B \in \pi} G[B]$$

es decir:

$$\frac{G^k(x)}{k!} = \sum_{n=k}^{\infty} \left(\sum_{\pi \in \Pi_k[n]} \prod_{B \in \pi} g_{|B|} \right) \frac{x^n}{n!}$$

donde $\Pi_k[n]$ es el conjunto de todas las particiones de $[n]$ en k bloques.

Definición 3.6. *Substitución*

Si $g_0 = 0$, definimos la *substitución* de G en F como la serie:

$$F(G(x)) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \frac{G^k(x)}{k!}$$

cuyos coeficientes están dados por:

$$\left[\frac{x^0}{0!} \right] F(G(x)) = f_0 \mathbf{1} = f_0$$

Si $n \geq 1$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{x^n}{n!} \right] F(G(x)) &= \left[\frac{x^n}{n!} \right] \sum_{k=1}^{\infty} f_k \frac{G^k}{k!} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} f_k \left[\frac{x^n}{n!} \right] \frac{G^k}{k!} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} f_k \sum_{\pi \in \Pi_k[n]} \prod_{B \in \pi} g_{|B|} \end{aligned}$$

Si $k > n$ entonces en el índice de la sumatoria de arriba se requiere una partición π de $[n]$ que tenga una cantidad de bloques mayor a la cantidad de elementos que posee, esto es imposible, en consecuencia:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} f_k \sum_{\pi \in \Pi_k[n]} \prod_{B \in \pi} g_{|B|} &= \sum_{k=1}^n f_k \sum_{\pi \in \Pi_k[n]} \prod_{B \in \pi} g_{|B|} \\ &= \sum_{\pi \in \Pi[n]} f_{|\pi|} \prod_{B \in \pi} g_{|B|} \end{aligned}$$

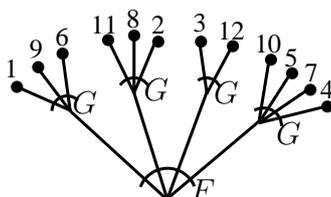
donde $\Pi[n]$ es el conjunto formado por todas las particiones de $[n]$.

Por lo tanto:

$$F(G)[C] = \sum_{\pi \in \Pi[C]} F[\pi] \prod_{B \in \pi} G[B]$$

Se puede interpretar que para obtener las configuraciones de $F(G(x))$ en un conjunto, se colocan configuraciones asociadas a G dentro de una configuración externa asociada a F de todas las maneras posibles, una para cada partición π del conjunto C . Los bloques de

π se interpretan como vértices “gordos” para las configuraciones de F . Una representación gráfica de esto es:



Donde $C = [12]$ y $\pi = \{\{1, 6, 9\}, \{2, 8, 11\}, \{3, 12\}, \{4, 5, 7, 10\}\}$ es la partición de C .

Ejemplo 3.2. Fórmula de substitución

Hallar el coeficiente de tercer grado de e^{e^x-1} .

Solución:

Queremos hallar $e^{e^x-1}[3]$, esto es:

$$e^{e^x-1}[3] = \sum_{\pi \in \Pi[3]} e^x[\pi] \prod_{B \in \pi} e^x[B] = \sum_{\pi \in \Pi[3]} \prod_{B \in \pi} \mathbf{1} = \left(\sum_{\pi \in \Pi[3]} 1 \right) \mathbf{1} = (5)\mathbf{1}$$

Note que el valor de la suma $\left(\sum_{\pi \in \Pi[3]} 1 \right)$ representa la cantidad de particiones posibles del conjunto $[3] = \{1, 2, 3\}$, estas son:

$$\{\{1\}, \{2\}, \{3\}\} \quad \{\{1, 2\}, \{3\}\} \quad \{\{1, 3\}, \{2\}\} \quad \{\{2, 3\}, \{1\}\} \quad \{\{1, 2, 3\}\}$$

La cantidad de particiones posibles de un conjunto de cardinal n es conocido como el *número de Bell* B_n , es decir:

$$e^{e^x-1}[n] = B_n \mathbf{1} = |\Pi[n]| \mathbf{1}$$

Adicionalmente, la cantidad de particiones en k bloques posibles a partir de un conjunto de cardinal n se conoce como el *número de Stirling del segundo tipo* y se denota $S(n, k)$, así:

$$|\Pi_k[n]| = S(n, k)$$

Es claro que:

$$\sum_{k=1}^n S(n, k) = B_n$$

Por lo tanto:

$$e^{e^x-1}[n] = \left(\sum_{k=1}^n S(n, k) \right) \mathbf{1}$$

Los números de Stirling del segundo tipo cumplen con la siguiente relación de recurrencia:

$$S(n, k) = S(n - 1, k - 1) + kS(n - 1, k)$$

donde $S(0, 0) = 1$ y $S(n, 0) = 0$

3.2. Series formales en dos variables

Consideraremos ahora series formales de tipo exponencial en las variables x_1 y x_2 :

$$F(x_1, x_2) = \sum_{m,n=0}^{\infty} f_{m,n} \frac{x_1^m x_2^n}{m!n!}$$

donde los coeficientes $f_{m,n}$ pertenecen a \mathbb{R} .

El objetivo principal de esta sección consiste en hallar el coeficiente k -ésimo de la substitución de dos series univariadas en una bivariada. Es decir si:

$$G_1(h) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(1)} \frac{h^n}{n!} \quad G_2(h) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(2)} \frac{h^n}{n!}$$

y F es una serie bivariada con coeficientes en \mathbb{R} . ¿Cuál es el coeficiente k -ésimo de la serie $F(G_1, G_2)$? Para poder entender lo que ocurre con este cálculo debemos introducir la siguiente definición.

Definición 3.7. Conjunto coloreado

Sea C un conjunto no vacío. Una n -coloración sobre C es una función $\mathcal{K} : C \rightarrow \{1, \dots, n\}$. Decimos que $x \in C$ tiene color i si $\mathcal{K}(x) = i$. De este modo, $\mathcal{K}^{-1}(\{i\})$ es el subconjunto de C que tiene color i .

Todo conjunto n -coloreado C , está unívocamente representado por el par (C, \mathcal{K}) .

Definición 3.8. Si $F(x_1, x_2)$ es una serie bivariada, definimos para cualquier conjunto bicolorado (C, \mathcal{K}) :

$$F[C, \mathcal{K}] = f_{m,n} = \left[\frac{x_1^m}{m!} \frac{x_2^n}{n!} \right] F$$

donde m es el cardinal del subconjunto de C que tiene color 1 y n el cardinal del subconjunto de C que tiene color 2.

Teorema 3.1. Sean

$$G_1(h) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(1)} \frac{h^n}{n!} \quad G_2(h) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(2)} \frac{h^n}{n!}$$

dos series univariadas con coeficientes en una \mathbb{R} -álgebra conmutativa \mathbb{A} con unidad $\mathbf{1}$. Sea

$$F(x_1, x_2) = \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{x_1^m x_2^n}{m! n!}$$

una serie bivariada con coeficientes en \mathbb{R} . Si C es un conjunto de cardinal k entonces:

$$\left[\frac{h^k}{k!} \right] F(G_1, G_2) = F(G_1, G_2)[C] = \sum_{(\pi, \mathcal{K})} F[\pi, \mathcal{K}] \prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B]$$

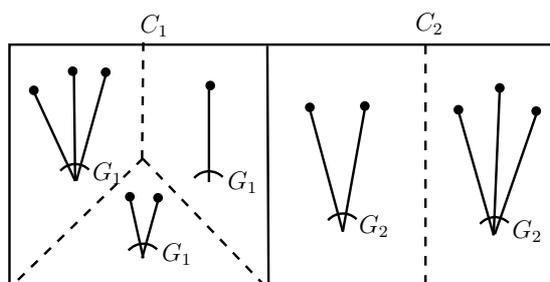
y la suma de arriba está indexada sobre todas las particiones bicoloreadas (π, \mathcal{K}) de C .

Demostración.

Notemos que:

$$\begin{aligned} \frac{G_1^m}{m!} \frac{G_2^n}{n!} [C] &= \sum_{C_1 + C_2 = C} \frac{G_1^m}{m!} [C_1] \frac{G_2^n}{n!} [C_2] \\ &= \sum_{C_1 + C_2 = C} \left(\sum_{\pi_1 \in \Pi_m[C_1]} \prod_{B \in \pi_1} G_1[B] \right) \left(\sum_{\pi_2 \in \Pi_n[C_2]} \prod_{B \in \pi_2} G_2[B] \right) \end{aligned}$$

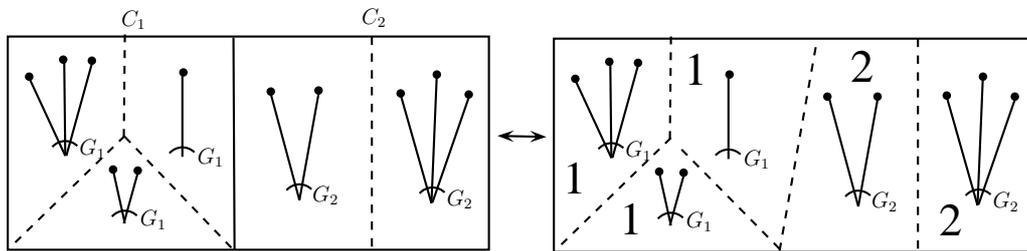
La interpretación combinatoria de la suma de arriba consiste en hacer todas las posibles descomposiciones del conjunto C en el par (C_1, C_2) , luego se hace una partición π_1 de m bloques en C_1 y a cada uno de los bloques se le aplica G_1 , de manera análoga, C_2 es particionado en n bloques a los cuales se le aplica G_2 . Por ejemplo, para $m = 3$ y $n = 2$ una representación gráfica de esto es:



Se quiere unir las dos particiones π_1 y π_2 en una sola partición π , para hacer esto coloreamos los bloques de π_1 con el color 1 y los de π_2 con el color 2, de este modo la

partición $\pi = \pi_1 \cup \pi_2$ tiene m bloques de color 1 y n de color 2.

Formalmente, lo que se está haciendo es considerando la aplicación que envía a la tupla (C_1, C_2, π_1, π_2) en el par (π, \mathcal{K}) definida por $\pi = \pi_1 \cup \pi_2$ y $\mathcal{K}(B) = i$ si $B \in \pi_i$. Recíprocamente, una partición bicolorada (π, \mathcal{K}) es enviada en la tupla (C_1, C_2, π_1, π_2) haciendo $\pi_1 = \mathcal{K}^{-1}(1)$, $\pi_2 = \mathcal{K}^{-1}(2)$, $C_1 = \bigcup_{B \in \mathcal{K}^{-1}(1)} B$ y $C_2 = \bigcup_{B \in \mathcal{K}^{-1}(2)} B$. Esto es una biyección. Gráficamente:



De esta manera

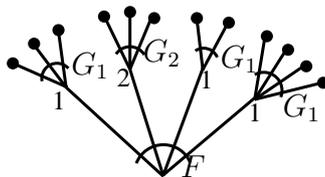
$$\sum_{C_1+C_2=C} \left(\sum_{\pi_1 \in \Pi_m[C_1]} \prod_{B \in \pi_1} G_1[B] \right) \left(\sum_{\pi_2 \in \Pi_n[C_2]} \prod_{B \in \pi_2} G_2[B] \right) = \sum_{\substack{(\pi, \mathcal{K}) \\ |\mathcal{K}^{-1}(1)|=m \\ |\mathcal{K}^{-1}(2)|=n}} \prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B]$$

Por lo tanto tenemos

$$\begin{aligned} F(G_1, G_2)[C] &= \sum_{m,n} f_{m,n} \frac{G_1^m G_2^n}{m! n!} [C] \\ &= \sum_{m,n} f_{m,n} \left(\sum_{\substack{(\pi, \mathcal{K}) \\ |\mathcal{K}^{-1}(1)|=m \\ |\mathcal{K}^{-1}(2)|=n}} \prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B] \right) \\ &= \sum_{m,n} \sum_{\substack{(\pi, \mathcal{K}) \\ |\mathcal{K}^{-1}(1)|=m \\ |\mathcal{K}^{-1}(2)|=n}} F[\pi, \mathcal{K}] \prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B] \\ &= \sum_{(\pi, \mathcal{K})} F[\pi, \mathcal{K}] \prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B] \end{aligned}$$

□

Gráficamente, la substitución de dos series univariadas en una bivariada se representa como sigue:



el cual es un árbol de altura 2 cuyas hojas son los elementos del conjunto C . Un bloque de la partición π es el conjunto de hojas de un subárbol pequeño al cual se le aplica G_1 o G_2 . Las etiquetas en las raíces de estos subárboles pequeños señalan la coloración de cada uno de los bloques de π , si el bloque es de color 1 entonces en el se aplica G_1 y si es de color 2 en el se aplica G_2 .

El teorema anterior es crucial para desarrollar los objetivos de este trabajo, pues nos permitirá escribir los coeficientes de la solución analítica de un problema a valor inicial autónomo en términos de árboles crecientes. Sin embargo, desde este teorema también se puede describir las condiciones de orden sobre los coeficientes de un método de Runge-Kutta utilizando árboles con raíz. En las otras secciones se hará tal descripción. Por ahora, haremos una construcción en el contexto de las series formales de la ecuación (5) presentada por J. Butcher en su artículo [3].

Si $L : \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{A}$ es una transformación lineal, entonces L puede ser extendida a una transformación lineal de $\mathbb{A}[[x]]$ en $\mathbb{A}[[x]]$ por la aplicación de L en cada coeficiente de una serie. Es decir:

$$L\left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n \frac{x^n}{n!}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L(f_n) \frac{x^n}{n!}$$

Sean

$$F_1(x_1, x_2) = \sum_{m,n=0}^{\infty} f_{m,n}^{(1)} \frac{x_1^m x_2^n}{m!n!}, \quad F_2(x_1, x_2) = \sum_{m,n=0}^{\infty} f_{m,n}^{(2)} \frac{x_1^m x_2^n}{m!n!}$$

series bivariadas con coeficientes en \mathbb{R} y

$$G_1(h) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(1)} \frac{h^n}{n!}, \quad G_2(h) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n^{(2)} \frac{h^n}{n!}$$

series univariadas con coeficientes en \mathbb{A} . La ecuación (5) planteada por Butcher en [3] en el contexto de las series formales es la siguiente:

$$G_j = (\mathbf{1}h)L(F_j(G_1, G_2)), \quad j \in \{1, 2\} \quad (3.3)$$

Es decir, G_j es el producto de la serie $\mathbf{1}h = 0 + \mathbf{1}\frac{h}{1!} + 0\frac{h^2}{2!} + \dots$ con la serie que resulta de aplicar L a la substitución $F_j(G_1, G_2)$. Note que $g_1^{(j)} = L(f_{00}^{(j)} \mathbf{1}) = f_{00}^{(j)} L(\mathbf{1})$. Sea C un

conjunto de tamaño $k \geq 2$ desde el Teorema (3.1) se sigue que:

$$\begin{aligned}
g_k^{(j)} &= G_j[C] \\
&= \left((\mathbf{1}h)L(F_j(G_1, G_2)) \right) [C] \\
&= \sum_{(\{r\}, C-\{r\})} h[\{r\}] \cdot L(F_j(G_1, G_2)) [C - \{r\}] \\
&= \sum_{(\{r\}, C-\{r\})} \mathbf{1} \cdot L(F_j(G_1, G_2)) [C - \{r\}] \\
&= \sum_{(\{r\}, C-\{r\})} L(F_j(G_1, G_2)) [C - \{r\}] \\
&= \sum_{(\{r\}, C-\{r\})} \sum_{(\pi, \mathcal{K})} L \left(F_j[\pi, \mathcal{K}] \prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B] \right)
\end{aligned}$$

Finalmente usando la linealidad de L tenemos la ecuación:

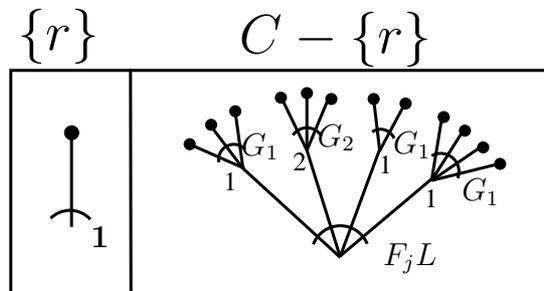
$$G_j[C] = \sum_{(\{r\}, C-\{r\})} \sum_{(\pi, \mathcal{K})} F_j[\pi, \mathcal{K}] L \left(\prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B] \right) \quad (3.4)$$

En el índice de la suma interna de (3.4) varia sobre todas particiones bicoloreadas (π, \mathcal{K}) de $C - \{r\}$. Como sabemos, al hacer el producto de dos series, desde el punto de vista combinatorio se obtienen todas las descomposiciones de C en pares (C_1, C_2) . Como

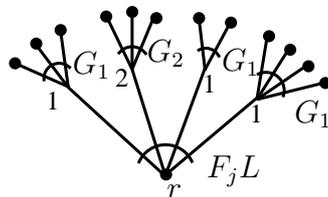
$$\mathbf{1}h = 0 + \mathbf{1} \frac{h}{1!} + 0 \frac{h^2}{2!} + \dots$$

entonces para todas las descomposiciones en las cuales C_1 tenga un cardinal distinto de 1 obtendremos que $\mathbf{1}h[C_1] = 0$, lo cual hace nulo el producto $(\mathbf{1}h)L(F_j(G_1, G_2))$. Así, solo se consideran las descomposiciones de C en pares de la forma $(\{r\}, C - \{r\})$ como se observa en el índice de la primera sumatoria.

Una vez hecha esta descomposición a $\{r\}$ se le aplica la serie $\mathbf{1}h$, lo cual da como resultado la unidad del álgebra $\mathbf{1}$. Luego a $C - \{r\}$ se le aplica la substitución $F_j(G_1, G_2)$, la cual queda representada siguiendo la interpretación del árbol de altura 2 después del Teorema 3.1, excepto que debemos aplicarle L al producto $\prod_{B \in \pi} G_{\mathcal{K}(B)}[B]$. Finalmente la interpretación gráfica de la ecuación (3.4) es:



La descomposición de arriba, se puede identificar biyectivamente con la siguiente árbol:



El cual es similar al árbol del lado derecho en la descomposición de arriba excepto que hemos etiquetado a la raíz con r . Note que r tiene asociado el operador lineal $f_{i_1, i_2}^{(j)} L$, en donde $i_1 = |\mathcal{K}^{-1}(\{1\})|$, $i_2 = |\mathcal{K}^{-1}(\{2\})|$, por lo tanto es natural asignarle a r color j . Si iteramos el mismo razonamiento sobre cada $G_{\mathcal{K}(B)}[B]$ y así sucesivamente, obtenemos un par (T, \mathcal{K}') en donde:

1. T es un árbol cuyos vértices están etiquetados con los elementos de C y r es la raíz de T . Los vértices de T que tienen profundidad p , con $p \geq 1$, se obtienen mediante la selección de un elemento sobre cada bloque de las particiones bicoloradas que aparecen en el paso p de la iteración.
2. \mathcal{K}' es una bicoloración sobre C definida de la siguiente manera: $\mathcal{K}'(c) = l$ si y sólo si el operador lineal asociado al vértice c es de la forma $f_{i_1, i_2}^{(l)} L$, en donde i_1 e i_2 son los respectivos números de bloques de color 1 y 2 que tiene la partición bicolorada del conjunto de descendientes de c .

La aplicación sucesiva de los operadores de la forma $f_{i_1, i_2}^{(\mathcal{K}'(c))} L$ desde la raíz r de T hasta sus hojas define un peso sobre este árbol, el cual es igual a:

$$\prod_{v \in T} f_{i_1, i_2}^{(\mathcal{K}'(v))} \Lambda(t) \quad (3.5)$$

en donde, i_1 es el número de diferente hijos de v a los cuales \mathcal{K}' le asigna color 1 e i_2 es el número de diferente hijos de v a los cuales \mathcal{K}' le asigna color 2. t es el tipo de isomorfismo de T y Λ es la función de $\mathbb{T}(\mathcal{A}[n])$ en \mathbb{A} que se obtiene mediante la aplicación sucesiva del operador L sobre un árbol. Λ está definida recursivamente como:

$$\Lambda(\bullet) = L(\mathbf{1}),$$

si $t = B_+(t_1, t_2, \dots, t_k)$ entonces:

$$\Lambda(t) = L(\Lambda(t_1) \cdot \Lambda(t_2) \cdot \dots \cdot \Lambda(t_k))$$

Cada sumando en la ecuación (3.4) corresponde biyectivamente a un peso sobre uno de los árboles bicoloreados que describe el algoritmo anteriormente explicado. Finalmente tenemos que:

$$G_j[C] = \sum_{\substack{(T, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j}} \prod_{v \in T} f_{i_1, i_2}^{\mathcal{K}(v)} \Lambda(t) \tag{3.6}$$

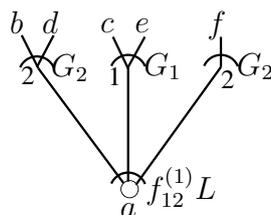
La suma de la ecuación (3.6) está indexada sobre todos los árboles bicoloreados (T, \mathcal{K}) con vértices en C , tales que \mathcal{K} asigna a la raíz r de T el color j .

De ahora en adelante un vértice con color 1 será denotado por \circ el cual se identifica con la variable x_1 de una serie bivariada y un vértice de color 2 será denotado por \bullet el cual se identifica con la variable x_2 de una serie bivariada.

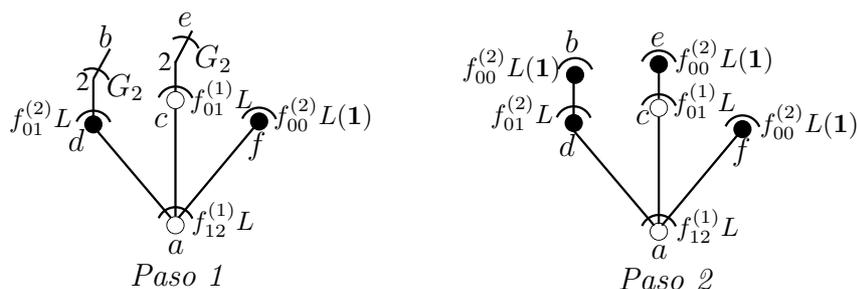
El siguiente ejemplo ilustra el algoritmo anterior:

Ejemplo 3.3.

Sea $C = \{a, b, c, d, e, f\}$, un sumando de $G_1[C]$ se obtiene haciendo la descomposición correspondiente a la fórmula (3.4) antes explicada, obteniendo lo siguiente:



Ahora bien, este procedimiento se itera dentro de los subárboles del árbol anterior y así sucesivamente, quedando:



Sean (T, \mathcal{K}) un árbol bicoloreado y α una biyección de C en C . Sea $T' = \alpha(T)$ con coloración $\mathcal{K} \circ \alpha^{-1}$, entonces si $\alpha(v) = v'$ se cumple que:

$$\mathcal{K}(v) = \mathcal{K}(\alpha^{-1}(v')) = (\mathcal{K} \circ \alpha^{-1})(v')$$

es decir, la aplicación de α a T no modifica los colores de los vértices. Por lo tanto si v tiene i_1 e i_2 hijos de color 1 y 2 respectivamente entonces el correspondiente v' tendrá igual cantidad de hijos de colores 1 y 2. Así:

$$\prod_{v \in T} f_{i_1, i_2}^{(\mathcal{K}(v))} = \prod_{v' \in T'} f_{j_1, j_2}^{((\mathcal{K} \circ \alpha^{-1})(v'))}$$

y en consecuencia, el sumando $\prod_{v \in T} f_{i_1, i_2}^{(\mathcal{K}(v))} \Lambda(t)$ se repetirá en (3.6) tantas veces como árboles de tipo t existan. Como $|C| = k$, desde el corolario (2.1) este número de repeticiones es $\frac{k!}{\sigma(t)}$.

En [3] se define:

$$\mathbb{F}(t, \mathcal{K}) = \prod_{v \in t} f_{i_1, i_2}^{(\mathcal{K}(v))}$$

como el *diferencial elemental* de un árbol no etiquetado t con una bicoloración \mathcal{K} sobre sus vértices. Recordando que un vértice de color 1 se representa como \circ y uno de color 2 se representa como \bullet , tenemos por ejemplo que

$$\mathbb{F}\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \circ \quad \bullet \\ \bullet \end{array}\right) = f_{20}^{(2)} f_{00}^{(1)} f_{02}^{(1)} f_{00}^{(2)} f_{00}^{(2)}$$

Finalmente, la ecuación (3.6) se reescribe de la siguiente manera:

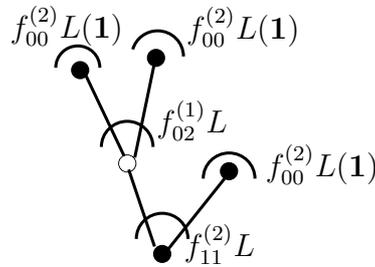
$$g_k^{(j)} = G_j[C] = \sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j \\ |t|=k}} \frac{k! \mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Lambda(t)}{\sigma(t)} \quad (3.7)$$

ahora el índice de la suma de arriba varía sobre todos los pares de la forma (t, \mathcal{K}) en donde t es un árbol no etiquetado con k -vértices y \mathcal{K} es una bicoloración sobre los vértices de t que le asigna color j a la raíz r de t .

Un posible sumando de g_5^2 es

$$f_{11}^{(2)} f_{00}^{(2)} f_{02}^{(1)} f_{00}^{(2)} f_{00}^{(2)} L\left(L\left(L(1) \cdot L(1)\right) \cdot L(1)\right)$$

que está representado por el siguiente árbol:



el cual aparece repetido $\frac{5!}{2!} = 60$ veces.

Mas aún

$$\begin{aligned}
 g_3^{(2)} = & \frac{3!}{2!} \left(\begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ + \\ \text{Diagram 2} \end{array} \right) L(L(\mathbf{1}).L(\mathbf{1})) \\
 & + \frac{3!}{2!} \left(\begin{array}{c} \text{Diagram 3} \\ + \\ \text{Diagram 4} \end{array} \right) L(L(\mathbf{1}).L(\mathbf{1})) \\
 & + \frac{3!}{1!} \left(\begin{array}{c} \text{Diagram 5} \\ + \\ \text{Diagram 6} \\ + \\ \text{Diagram 7} \\ + \\ \text{Diagram 8} \end{array} \right) L(L(L(\mathbf{1})))
 \end{aligned}$$

Finalmente desde la ecuación (3.7) se tiene que para $j \in \{1, 2\}$

$$G_j(h) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k^{(j)} \frac{h^k}{k!} = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}^{(r)=j} \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Lambda(t)}{\sigma(t)} \right) h^k \tag{3.8}$$

y

$$G(h) = (G_1(h), G_2(h)) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=1 \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K})\Lambda(t)}{\sigma(t)}, \sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=2 \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K})\Lambda(t)}{\sigma(t)} \right) h^k \quad (3.9)$$

Capítulo 4

Condiciones de orden para el método de Runge-Kutta

El objetivo de este capítulo es usar la ecuación (3.7) para hallar la solución analítica de un PVI y simultáneamente establecer condiciones de orden para un método de Runge-Kutta utilizando árboles bicoloreados.

4.1. Solución analítica de un PVI

Ahora estudiamos la ecuación diferencial autónoma:

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

en donde $y_0 = (y_0^{(1)}, y_0^{(2)})$ y $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ esta dada por:

$$f = (f^{(1)}, f^{(2)})$$

con $f^{(j)} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ para $j = 1, 2$.

La solución de este PVI es una función $y : [x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon] \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por $y = (y_1, y_2)$ con $\epsilon > 0$. De este modo, el PVI se puede reescribir como sigue:

$$\begin{cases} y_j' = f^{(j)}(y_1, y_2) \\ y_0^{(j)} = y_j(x_0) \end{cases}$$

Sea $h = x - x_0$, para $j = 1, 2$ definimos $G_j : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ por:

$$G_j(\xi) = y_j(x_0 + h\xi)$$

De este modo:

$$\frac{d}{d\xi}G_j = y'_j(x_0 + h\xi)h = f^{(j)}(y_1(x_0 + h\xi), y_2(x_0 + h\xi))h = hf^{(j)}(G_1, G_2)$$

Así, el PVI queda escrito por:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\xi}G_j = hf^{(j)}(G_1, G_2) \\ G_j(0) = y_0^{(j)} \\ G_j(1) = y_j(x) \end{cases}$$

Integrado desde 0 hasta ξ tenemos que:

$$\int_0^\xi G'_j(s)ds = \int_0^\xi hf^{(j)}(G_1(s), G_2(s))ds$$

es decir:

$$G_j(\xi) - y_0^{(j)} = h \int_0^\xi f^{(j)}(G_1(s), G_2(s))ds \quad (4.1)$$

Cuando $G_1(s) = s$ y $j = 2$, (4.1) se convierte en la ecuación integral de Picard (1.7) estudiada en el capítulo 1. Sea $\mathbb{A} = \mathcal{C}[0, 1]$ el espacio de las funciones continuas en el intervalo $[0, 1]$, \mathbb{A} es una \mathbb{R} -álgebra bajo las operaciones producto y suma punto a punto de funciones. La unidad de esta álgebra es la función $\mathbf{1}$ definida por $\mathbf{1}(\xi) = 1$, para todo $\xi \in [0, 1]$. Sea $L : \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{A}$ el operador integral

$$L(\Phi)(\xi) = \int_0^\xi \Phi(s)ds$$

así la ecuación (4.1) se escribe como la ecuación funcional

$$G_j - y_0^{(j)}\mathbf{1} = hL(f^{(j)}(G_1, G_2)) \quad (4.2)$$

Ahora bien, recordemos que si $f \in \mathcal{C}^n$ entonces las derivadas de orden k de f ($k < n$) las denotamos de la siguiente manera:

$$f_{x^i y^{k-i}} = \frac{\partial^k f}{\partial y^{k-i} \partial x^i}$$

En este capítulo denotaremos las derivadas parciales de $f^{(j)}$ como sigue:

$$f_{i k-i}^{(j)} = \frac{\partial^k f^{(j)}}{\partial y_2^{k-i} \partial y_1^i}$$

es decir, el primer subíndice cuenta la cantidad de veces que se deriva $f^{(j)}$ respecto a y_1 y el segundo la cantidad de veces que se deriva respecto a y_2 .

Supongamos que cada $f^{(j)}$ admite un desarrollo de Taylor en un entorno abierto U_j de y_0 , es decir

$$\begin{aligned}
f^{(j)}(y) &= f^{(j)}(y_0) + \frac{1}{1!} \left((y_1 - y_0^{(1)}) f_{10}^{(j)}(y_0) + (y_2 - y_0^{(2)}) f_{01}^{(j)}(y_0) \right) \\
&\quad + \frac{1}{2!} \left((y_1 - y_0^{(1)})^2 f_{20}^{(j)}(y_0) + 2(y_1 - y_0^{(1)})(y_2 - y_0^{(2)}) f_{11}^{(j)}(y_0) + (y_2 - y_0^{(2)})^2 f_{02}^{(j)}(y_0) \right) \\
&\quad + \dots \\
&\quad + \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (y_1 - y_0^{(1)})^k (y_2 - y_0^{(2)})^{n-k} f_{k, n-k}^{(j)}(y_0) + \dots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (y_1 - y_0^{(1)})^k (y_2 - y_0^{(2)})^{n-k} f_{k, n-k}^{(j)}(y_0) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)! k!} (y_1 - y_0^{(1)})^k (y_2 - y_0^{(2)})^{n-k} f_{k, n-k}^{(j)}(y_0) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{(y_1 - y_0^{(1)})^k (y_2 - y_0^{(2)})^{n-k}}{k! (n-k)!} f_{k, n-k}^{(j)}(y_0) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1+i_2=n} \frac{(y_1 - y_0^{(1)})^{i_1} (y_2 - y_0^{(2)})^{i_2}}{i_1! i_2!} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \\
&= \sum_{i_1, i_2 \geq 0} \frac{(y_1 - y_0^{(1)})^{i_1} (y_2 - y_0^{(2)})^{i_2}}{i_1! i_2!} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0)
\end{aligned}$$

Podemos elegir a h suficientemente pequeño como para que $(G_1(\xi), G_2(\xi)) \in U_1 \cap U_2$ para todo $\xi \in [0, 1]$, luego la substitución $f^{(j)}(G_1, G_2)$ en el desarrollo anterior puede expresarse como una serie en h con coeficientes en \mathbb{A} . Esto nos dice que $G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1}$ también se expresa como una serie en h con coeficientes en \mathbb{A} , es decir,

$$G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1} = \sum_{k=1}^{\infty} g_k^{(j)} \frac{h^k}{k!}$$

Sea $F^j(x_1, x_2)$ la serie formal en 2 variables dada por:

$$F^j(x_1, x_2) = \sum_{i_1, i_2 \geq 0} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \frac{x_1^{i_1} x_2^{i_2}}{i_1! i_2!}$$

Luego:

$$G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1} = hL(F^j(G_1 - y_0^{(1)} \mathbf{1}, G_2 - y_0^{(2)} \mathbf{1}))$$

La ecuación (3,7) nos dice que los coeficientes de $G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1}$ se expresan de la siguiente

manera

$$g_k^{(j)} = \sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j \\ |t|=k}} \frac{k! \mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Lambda(t)}{\sigma(t)}$$

para este caso $\Lambda(t)(\xi) = \frac{\xi^k}{t!}$ si t es árbol con k vértices. En efecto,

Si $k = 1$ entonces $t = \bullet$, así:

$$\Lambda(\bullet)(\xi) = L(\mathbf{1})(\xi) = \int_0^\xi \mathbf{1}(s) ds = s \Big|_0^\xi = \frac{\xi}{1} = \frac{\xi}{\bullet!}$$

Si $k = 2$ entonces $t = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \bullet \end{array}$, por lo tanto:

$$\Lambda(t)(\xi) = \int_0^\xi \Lambda(\bullet)(s) ds = \int_0^\xi s ds = \frac{\xi^2}{2 \cdot 1} = \frac{\xi^2}{t!}$$

Asumamos que para $k \leq n$ se cumple que $\Lambda(t)(\xi) = \frac{\xi^k}{t!}$ y veamos que se cumple para $k = n + 1$. En efecto, si $t = [t_1, t_2, \dots, t_l]$ tiene $n + 1$ vértices, entonces:

$$\Lambda(t)(\xi) = \int_0^\xi (\Lambda(t_1) \cdots \Lambda(t_l))(s) ds = \int_0^\xi \Lambda(t_1)(s) \cdots \Lambda(t_l)(s) ds$$

Como los subárboles t_1, \dots, t_l tienen menos de n vértices, así, por hipótesis inductiva tenemos:

$$\begin{aligned} \int_0^\xi \Lambda(t_1)(s) \cdots \Lambda(t_l)(s) ds &= \int_0^\xi \frac{s^{|t_1|}}{t_1!} \cdots \frac{s^{|t_l|}}{t_l!} ds \\ &= \frac{1}{t_1! \cdots t_l!} \int_0^\xi s^n ds \\ &= \frac{1}{t_1! \cdots t_l!} \cdot \frac{\xi^{n+1}}{n+1} \\ &= \frac{\xi^{n+1}}{t!} \end{aligned}$$

Así, hemos demostrado lo requerido.

De este modo, el desarrollo en serie de Taylor de la solución analítica del PVI queda de la siguiente manera:

$$y_j(x) = y_j(x_0 + h) = G_j(1) = y_0^j + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K})}{\sigma(t)t!} \right) (x - x_0)^k \quad (4.3)$$

Recordemos que según la proposición 2.2 el número $\frac{k!}{\sigma(t)t!}$ cuenta todos los posibles árboles crecientes con k vértices y de tipo t , por lo tanto:

$$\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j \\ |t|=k}} \frac{k! \mathbb{F}(t, \mathcal{K})}{\sigma(t)t!}$$

cuenta todos los posibles diferenciales elementales que poseen todos los árboles crecientes bicoloreados T , tales que $\tau(T) = t$ y $\mathcal{K}(r) = j$. Así:

$$y_j(x) = y_0^j + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{T \in \mathcal{A}^\uparrow[k] \\ \mathcal{K}: [k] \rightarrow \{1,2\} \\ \mathcal{K}(r)=j}} \prod_{v \in T} f_{i_1 i_2}^{(\mathcal{K}(v))}(y_0) \right) \frac{(x - x_0)^k}{k!}$$

De donde deducimos que:

$$\frac{d^k y_j}{dx^k}(x_0) = \sum_{\substack{T \in \mathcal{A}^\uparrow[k] \\ \mathcal{K}: [k] \rightarrow \{1,2\} \\ \mathcal{K}(r)=j}} \prod_{v \in T} f_{i_1 i_2}^{(\mathcal{K}(v))}(y_0)$$

es decir, la derivada k -ésima de y_j se puede obtener sumando los diferenciales elementales de todos los árboles bicoloreados crecientes de k vértices cuyas raíces tienen color j .

Veamos a continuación, una tabla que muestra como obtener las derivadas de $y_1(x)$ hasta la de tercer orden.

y_1'	y_1''	y_1'''
$\circ_1 f_{00}^{(1)}$	$f_{10}^{(1)} f_{00}^{(1)}$ $f_{01}^{(1)} f_{00}^{(2)}$	$f_{10}^{(1)} f_{10}^{(1)} f_{00}^{(1)}$ $f_{10}^{(1)} f_{01}^{(1)} f_{00}^{(2)}$ $f_{20}^{(1)} f_{00}^{(1)} f_{00}^{(1)}$ $f_{11}^{(1)} f_{00}^{(1)} f_{00}^{(2)}$ $f_{01}^{(1)} f_{10}^{(2)} f_{00}^{(1)}$ $f_{01}^{(1)} f_{01}^{(2)} f_{00}^{(2)}$ $f_{11}^{(1)} f_{00}^{(2)} f_{00}^{(1)}$ $f_{02}^{(1)} f_{00}^{(2)} f_{00}^{(2)}$

Junto a cada árbol de la tabla de arriba vemos su respectivo diferencial elemental, recordando que $f_{ik-i}^{(j)} = \frac{\partial^k f^{(j)}}{\partial y_2^{k-i} \partial y_1^i}$, obtenemos que las primeras tres derivadas de y_1 son:

$$\begin{aligned}
 y_1' &= f^{(1)}(y_1, y_2) \\
 y_1'' &= f^{(1)} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_1} + f^{(2)} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_2} \\
 y_1''' &= f^{(1)} \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_1} \right)^2 + f^{(2)} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_1} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_2} + (f^{(1)})^2 \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial y_1^2} + f^{(1)} f^{(2)} \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial y_2 \partial y_1} \\
 &\quad + f^{(1)} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_2} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial y_1} + f^{(2)} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y_2} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial y_2} + f^{(1)} f^{(2)} \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial y_1 \partial y_2} + (f^{(2)})^2 \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial y_2^2}
 \end{aligned}$$

Si quisiéramos hallar la cuarta derivada de y_1 , habría que hacer incidir el vértice 4 sobre los árboles con los cuales se obtuvo la tercera derivada, de los dos colores posibles y sobre cada uno de los vértices existentes, esto nos daría un total de 48 árboles diferentes,

es decir, la cuarta derivada de y_1 tiene 48 términos.

4.1.1. El caso univariado

En el caso univariado tenemos $y'_2 = f^{(2)}(y_1, y_2) = u(y_2)$ en donde u es una función que depende únicamente de la variable y_2 . De este modo, al calcular las derivadas parciales de $f^{(2)}$ con respecto a y_1 estas se anularán y los únicos términos distintos de cero en la solución analítica de y_2 son aquellos en los cuales se deriva respecto a y_2 . En términos de árboles esto quiere decir que todo árbol con al menos un vértice de color blanco tendrá diferencial elemental nulo.

La fórmula que describe el proceso de derivación en una variable usando árboles es:

$$y_2^{(k)} = \sum_{T \in \mathcal{A}^\uparrow[k]} \prod_{v \in T} u^{(i(v))}(y_2)$$

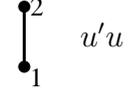
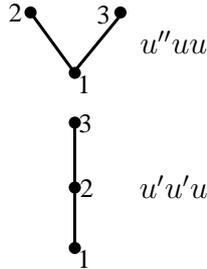
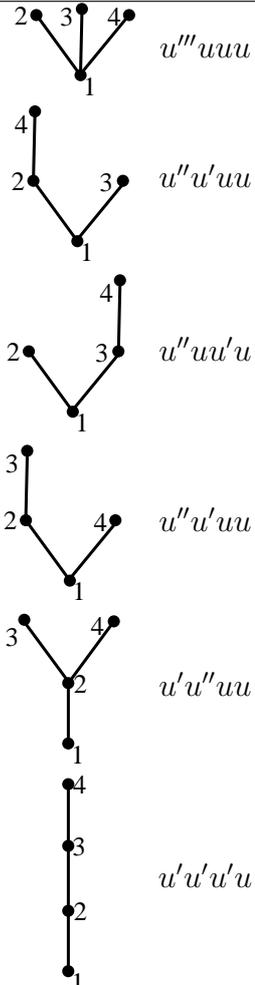
en donde $i(v)$ es la cantidad de hijos que tiene el vértice v y $u^{(i(v))}$ es la derivada de orden $i(v)$ de la función u .

En el caso univariado, el producto:

$$\prod_{v \in T} u^{(i(v))}(y_2)$$

es el diferencial elemental de u asociado al árbol T .

A continuación, se presenta una tabla en la cual se observa la construcción de los árboles crecientes necesarios para hallar las primeras cuatro derivadas de y_2 :

y_2'	y_2''	y_2'''	$y_2^{(4)}$
			

De este modo, las primeras cuatro derivadas de y_2 son:

$$y_2' = u(y_2)$$

$$y_2'' = u'(y_2)u(y_2)$$

$$y_2''' = u''(y_2)u^2(y_2) + (u'(y_2))^2u(y_2)$$

$$y_2^{(4)} = u'''(y_2)u^3(y_2) + 4u''(y_2)u'(y_2)u^2(y_2) + (u'(y_2))^3u(y_2)$$

Análogamente al caso bivariado, si quisiéramos hallar la quinta derivada de y_2 a partir de la cuarta, es necesario tomar el vértice 5 y hacerlo incidir sobre cada uno de los vértices de los seis árboles con los cuales obtuvimos la cuarta derivada, esto nos daría un total de 24 posibilidades diferentes.

En conclusión, el desarrollo en serie de Taylor de la solución de un PVI univariado es:

$$y(x) = y_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{T \in \mathcal{A}^\dagger[n]} \prod_{v \in T} u^{i(v)}(y_0) \right) \frac{(x - x_0)^n}{n!} \quad (4.4)$$

Veamos a continuación algunos ejemplos de como usar la fórmula (4.4) para hallar la solución de ecuaciones diferenciales.

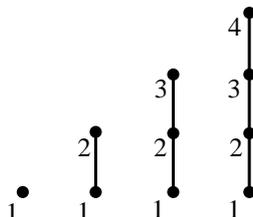
Ejemplo 4.1.

Resolver el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = y \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Solución:

En este caso $f(y) = y$, de donde $f'(y)y' = y'$ y finalmente $f'(y) = 1$. Esto nos dice que $f^{(k)} = 0$ si $k \geq 2$, por lo tanto $\prod_{v \in T} f^{(i(v))} = 0$ si y solo si el árbol T tiene al menos un vértice con 2 o más hijos. De esta manera, los únicos árboles que no anulan al diferencial elemental son las cadenas, es decir:



De la condición inicial obtenemos:

$$f(y(x_0)) = f(y_0) = y_0$$

Así, la serie de Taylor de la solución del PVI dado es:

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0 + f(y_0)(x - x_0) + f'(y_0)f(y_0) \frac{(x - x_0)^2}{2!} \\ &\quad + (f'(y_0))^2 f(y_0) \frac{(x - x_0)^3}{3!} + (f'(y_0))^3 f(y_0) \frac{(x - x_0)^4}{4!} + \dots \\ &= y_0 + y_0(x - x_0) + y_0 \frac{(x - x_0)^2}{2!} + y_0 \frac{(x - x_0)^3}{3!} + y_0 \frac{(x - x_0)^4}{4!} + \dots \\ &= y_0 e^{x-x_0} \end{aligned}$$

Ejemplo 4.2.

Resolver el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = y^2 + 1 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Solución:

Tenemos que $f(y) = y^2 + 1$, de donde:

$$f'(y) = 2y \quad y \quad f''(y) = 2$$

y de manera análoga al ejemplo anterior concluimos que $f^{(k)} = 0$ si $k \geq 3$. Esto nos dice que los árboles que tengan al menos un vértice con 3 o más hijos tendrán diferencial elemental nulo.

Por la condición inicial tenemos:

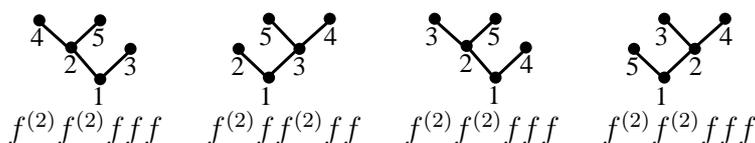
$$\begin{aligned} f(y(0)) &= f(0) = 1 \\ f'(y(0)) &= f'(0) = 0 \\ f''(y(0)) &= f''(0) = 2 \end{aligned}$$

La serie de Taylor de la solución queda:

$$\begin{aligned} y(x) &= f(0)x + f'(0)f(0)\frac{x^2}{2!} + \left(f''(0)f^2(0) + (f'(0))^2 f(0)\right)\frac{x^3}{3!} \\ &\quad + \left(4f''(0)f'(0)f^2(0) + (f'(0))^3 f(0)\right)\frac{x^4}{4!} + \dots \\ &= x + 2\frac{x^3}{3!} + \dots \end{aligned}$$

Dado que $f'(0) = 0$ deducimos que los árboles que tengan al menos un vértice con un solo hijo tendrán también diferencial elemental nulo, esto nos facilita el proceso de hallar más términos de la serie de Taylor de la solución. Dado que tenemos tan pocos términos de la solución de este PVI, hallemos el término de quinto grado.

Los árboles a considerar (y sus diferenciales) son:



De donde:

$$y^{(5)}(0) = 4(f''(0))^2 f^3(0) = 16$$

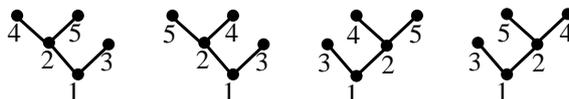
Así:

$$y(x) = x + 2\frac{x^3}{3!} + 16\frac{x^5}{5!} + \dots$$

Los únicos árboles cuyos diferenciales no se anulan son aquellos cuyos vértices internos tienen 2 hijos, es decir, árboles binarios. Esto quiere decir que todos los términos de grado par en la serie de Taylor serán nulos, pues es imposible construir un árbol binario con una cantidad par de vértices.

Si se resuelve este ejemplo usando separación de variables se obtiene el resultado $y(x) = \tan(x)$, es decir, la k -ésima derivada de la tangente evaluada en cero cuenta la cantidad de diferentes árboles binarios planares crecientes con k vértices (planar significa que se distinguen la izquierda de la derecha, es decir, el conjunto de hijos de un vértice interno esta ordenado de izquierda a derecha). Este es un resultado razonadamente explicado en [8] y [9] el cual se corresponde biyectivamente con permutaciones alternantes.

El coeficiente de grado 5 de la serie de Taylor de y nos dice que hay 16 árboles binarios planares de 5 vértices, pero más arriba para hallar este coeficiente solo consideramos cuatro árboles. Esto se debe a que en cada uno de estos árboles es posible ordenar de 4 maneras diferentes los hijos de los vértices internos. A modo de ejemplo, a continuación volvemos a presentar el primero de esos cuatro árboles y las otras tres maneras posibles de ordenar los hijos de los vértices internos.



Nótese como se distingue izquierda de derecha.

Ejemplo 4.3.

Resolver el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = y^3 \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Solución:

Esta vez $f(y) = y^3$, por lo tanto:

$$f'(y) = 3y^2 \quad f''(y) = 6y \quad f'''(y) = 6$$

De donde $f^{(k)} = 0$ si $k \geq 4$, es decir, los árboles que tengan al menos un vértice con 4 o más hijos tienen diferencial nulo.

Por la condición inicial tenemos:

$$\begin{aligned}f(y_0) &= y_0^3 \\f'(y_0) &= 3y_0^2 \\f''(y_0) &= 6y_0 \\f'''(y_0) &= 6\end{aligned}$$

Así:

$$\begin{aligned}y(x) &= y_0 + y_0^3(x - x_0) + 3y_0^5 \frac{(x - x_0)^2}{2!} + (6y_0^7 + 9y_0^7) \frac{(x - x_0)^3}{3!} \\&\quad + (6y_0^9 + 72y_0^9 + 27y_0^9) \frac{(x - x_0)^4}{4!} + \dots \\&= y_0 + y_0^3(x - x_0) + 3y_0^5 \frac{(x - x_0)^2}{2!} + 15y_0^7 \frac{(x - x_0)^3}{3!} + 105y_0^9 \frac{(x - x_0)^4}{4!} + \dots\end{aligned}$$

Ejemplo 4.4.

Resolver el problema de valor inicial:

$$\begin{cases}y' = \frac{1}{1-y} \\y(x_0) = y_0\end{cases}$$

Solución:

$f(y) = \frac{1}{1-y}$, por lo tanto:

$$f'(y) = \frac{1}{(1-y)^2} \quad f''(y) = \frac{2}{(1-y)^3} \quad f'''(y) = \frac{6}{(1-y)^4}$$

En general:

$$f^{(k)}(y) = \frac{k!}{(1-y)^{k+1}}$$

Se puede observar que en este caso f es una función que puede ser derivada de manera sucesiva y no se anula a partir de alguna derivada, lo cual no impone ningún tipo de restricción sobre los diferenciales elementales de los árboles.

Por la condición inicial:

$$\begin{aligned} f(y_0) &= \frac{1}{1-y_0} \\ f'(y_0) &= \frac{1}{(1-y_0)^2} \\ f''(y_0) &= \frac{2}{(1-y_0)^3} \\ f'''(y_0) &= \frac{6}{(1-y_0)^4} \end{aligned}$$

De lo anterior se tiene que el diferencial elemental de f asociado a un árbol creciente T con k vértices es:

$$\prod_{v \in T} \frac{i(v)!}{(1-y)^{i(v)+1}} = \frac{1}{(1-y)^{2k-1}} \prod_{v \in T} i(v)!$$

Finalmente:

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0 + \frac{1}{1-y_0}(x-x_0) + \frac{1}{(1-y_0)^3} \cdot \frac{(x-x_0)^2}{2!} \\ &\quad + \left(\frac{2}{(1-y_0)^5} + \frac{1}{(1-y_0)^5} \right) \frac{(x-x_0)^3}{3!} \\ &\quad + \left(\frac{6}{(1-y_0)^7} + \frac{8}{(1-y_0)^7} + \frac{1}{(1-y_0)^7} \right) \frac{(x-x_0)^4}{4!} + \dots \\ &= y_0 + \frac{1}{1-y_0}(x-x_0) + \frac{1}{(1-y_0)^3} \cdot \frac{(x-x_0)^2}{2!} + \frac{3}{(1-y_0)^5} \cdot \frac{(x-x_0)^3}{3!} \\ &\quad + \frac{15}{(1-y_0)^7} \cdot \frac{(x-x_0)^4}{4!} + \dots \end{aligned}$$

Si consideramos la condición inicial $y(0) = 0$ la serie de la solución queda:

$$y(x) = x + \frac{x^2}{2!} + 3\frac{x^3}{3!} + 15\frac{x^4}{4!} + \dots$$

La solución de esta ecuación por separación de variables es $y = 1 - \sqrt{1-2x}$, es decir, la derivada k -ésima de la función $1 - \sqrt{1-2x}$ evaluada en el cero cuenta la cantidad de diferentes árboles planares crecientes con k vértices. Así:

$$y^{(k)}(0) = \sum_{T \in \mathcal{A}^\uparrow[k]} \prod_{v \in T} i(v)!$$

el valor $i(v)!$ cuenta la cantidad de maneras posibles de ordenar los hijos del vértice v , por lo que la suma de arriba cuenta todas las formas posibles de ordenar los hijos de los vértices internos de todos los árboles crecientes con k vértices.

Ejemplo 4.5.

Resolver el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = e^y \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Solución:

Tenemos:

$$f(y) = e^y \quad y \quad f'(y) = f''(y) = f'''(y) = e^y$$

De la misma manera que en el ejemplo anterior, no hay ninguna restricción sobre los árboles dado que f no se anula a partir de cierta derivada. Por condición inicial:

$$f(y_0) = f'(y_0) = f''(y_0) = f'''(y_0) = e^{y_0}$$

Nótese que en este caso, el diferencial elemental de f asociado a un árbol creciente T de k vértices es igual a e^{ky} . De este modo, la derivada k -ésima de y es igual a la cantidad de árboles crecientes de k vértices multiplicado por e^{ky} .

Así:

$$\begin{aligned} y(x) = & y_0 + e^{y_0}(x - x_0) + e^{2y_0} \frac{(x - x_0)^2}{2!} + 2e^{3y_0} \frac{(x - x_0)^3}{3!} \\ & + 6e^{4y_0} \frac{(x - x_0)^4}{4!} + \dots + |\mathcal{A}^\uparrow[k]| e^{ky_0} \frac{(x - x_0)^k}{k!} + \dots \end{aligned}$$

Si consideramos la condición inicial $y(0) = 0$ entonces la solución de esta ecuación diferencial usando separación de variables es $y = \ln\left(\frac{1}{1-x}\right)$, y por lo tanto la cantidad de árboles crecientes con k vértices es igual a la derivada k -ésima de y evaluada en cero.

Por otra parte, sabiendo que $\frac{1}{1-u} = \sum_{n=0}^{\infty} u^n$, tenemos que:

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{1}{1-x}\right) &= \int_0^x \frac{1}{1-u} du \\ &= \int_0^x \sum_{n=0}^{\infty} u^n du \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^x u^n du \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^x u^n du &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{n+1}}{n+1} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} (n-1)! \frac{x^n}{n!}
\end{aligned}$$

Es decir, la serie generatriz de y es:

$$\ln\left(\frac{1}{1-x}\right) = \sum_{k=1}^{\infty} (k-1)! \frac{x^k}{k!}$$

de donde, concluimos que:

$$|\mathcal{A}^\uparrow[k]| = (k-1)!$$

4.1.2. El caso no autónomo

El caso no autónomo es similar al caso bivariado, con la diferencia de que la solución (y_1, y_2) de un PVI se puede escribir como $(y_1, y_2) = (x, y)$, de este modo:

$$(y'_1, y'_2) = (1, y') = (f^{(1)}(x, y), f^{(2)}(x, y))$$

Para simplificar la escritura haremos $f^{(2)} = f$ obteniendo:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y_1(x_0) = x_0 \\ y_2(x_0) = y_0 \end{cases}$$

Como en este caso $f^{(1)}(x, y) = 1$ entonces:

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial x} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial f^{(1)}}{\partial y} = 0$$

en términos de diferenciales elementales esto es $f_{10}^{(1)} = f_{01}^{(1)} = 0$, es decir, si un vértice de color blanco tiene al menos un hijo, entonces su árbol tendrá diferencial elemental nulo.

Esto facilita el cálculo de las derivadas pues los vértices de color blanco necesariamente deben ser hojas. En una sección anterior se mostró como usar árboles para hallar las primeras 3 derivadas de y_1 , en este caso mostraremos las primeras 3 derivadas de $y_2 = y$

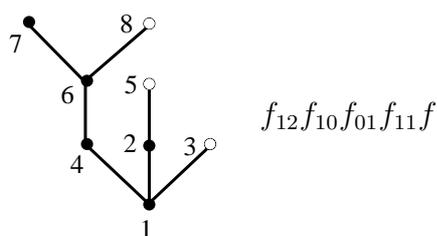
pues sabemos que cualquier derivada de $y_1 = x$ más allá de la de primer orden debe ser nula.

y'	y''	y'''
 f_{00}	 f_{10}	 f_{20}
	 $f_{01}f_{00}$	 $f_{11}f_{00}$
		 $f_{01}f_{10}$
		 $f_{01}f_{01}f_{00}$
		 $f_{11}f_{00}$
		 $f_{02}f_{00}f_{00}$

En la tabla anterior se usó el cambio $f^{(2)} = f$ y el hecho de que $f_{00}^{(1)} = 1$. De este modo las tres primeras derivadas de y son:

$$\begin{aligned}
 y' &= f(x, y) \\
 y'' &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f \\
 y''' &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 f + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} f^2
 \end{aligned}$$

Un ejemplo de diferencial elemental de un árbol con una mayor cantidad de vértices es:



Finalmente, la serie de Taylor de la solución de un PVI no autónomo queda:

$$y(x) = y_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{T \in \mathcal{A}^\uparrow[k] \\ \mathcal{K}: [k] \rightarrow \{1,2\} \\ \mathcal{K}(r)=2}} \prod_{v \in T} f_{i_1 i_2}(y_0) \right) \frac{(x - x_0)^n}{n!}$$

recordando que, todo árbol con al menos un vértice interno de color blanco tiene diferencial elemental nulo.

Ejemplo 4.6.

Resolver el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = xe^{y^2} \\ y(x_0) = (x_0, y_0) \end{cases}$$

Solución:

En este caso $f(x, y) = xe^{y^2}$ de donde:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= e^{y^2} & \frac{\partial f}{\partial y} &= 2xye^{y^2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= 0 & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} &= 2xe^{y^2} + 4xy^2e^{y^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} &= 2ye^{y^2} \end{aligned}$$

De aquí obtenemos que los árboles que tengan un vértice con al menos dos hijos de color blanco tienen diferencial elemental nulo. Por la condición inicial:

$$\begin{aligned} f(x_0) &= x_0 e^{y_0^2} & f_x(x_0) &= e^{y_0^2} & f_y(x_0) &= 2x_0 y_0 e^{y_0^2} \\ f_{xx}(x_0) &= 0 & f_{yy}(x_0) &= 2x_0 e^{y_0^2} + 4x_0 y_0^2 e^{y_0^2} & f_{xy}(x_0) &= 2y_0 e^{y_0^2} \end{aligned}$$

Así:

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0 + x_0 e^{y_0^2} (x - x_0) + \left(e^{y_0^2} + 2x_0^2 y_0 e^{2y_0^2} \right) \frac{(x - x_0)^2}{2!} \\ &+ \left(4x_0 y_0 e^{2y_0^2} + 2x_0 y_0 e^{2y_0^2} + 4x_0^3 y_0^2 e^{3y_0^2} + 2x_0^3 e^{3y_0^2} + 4x_0^3 y_0^2 e^{3y_0^2} \right) \frac{(x - x_0)^3}{3!} + \dots \end{aligned}$$

4.2. El método autónomo de Runge-Kutta de s etapas

En esta sección usaremos la ecuación $g = hL(f \circ g)$ dada en [3] para estudiar el método de Runge-Kutta de s etapas considerando la serie de Taylor de f y expandiendo a g como una serie con parámetro h . Luego, usando los resultados del capítulo anterior demostraremos que los coeficientes de g se pueden escribir en términos de árboles con cierta configuración. Finalmente vemos como obtener las condiciones de orden de un método de Runge-Kutta a través de los árboles.

John B. en [3] define el método de RK s etapas a través de s valores $Y_1, \dots, Y_s \in \mathbb{R}^2$ tales que:

$$Y_i = y_0 + h \sum_{k=1}^s a_{ik} f(Y_k)$$

y la aproximación en $x_1 = x_0 + h$ está determinada por:

$$y_1 = y_0 + h \sum_{k=1}^s b_k f(Y_k) \approx y(x_0 + h)$$

en donde $f = (f^{(1)}, f^{(2)})$, $y_0 = (y_0^{(1)}, y_0^{(2)})$, $y_1 = (y_1^{(1)}, y_1^{(2)})$ y $Y_i = (Y_{i1}, Y_{i2})$ para cada $i = 1, \dots, s$.

El método se puede reescribir como sigue:

$$\begin{pmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{21} & Y_{22} \\ \vdots & \vdots \\ Y_{s1} & Y_{s2} \\ y_1^{(1)} & y_1^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0^{(1)} & y_0^{(2)} \\ y_0^{(1)} & y_0^{(2)} \\ \vdots & \vdots \\ y_0^{(1)} & y_0^{(2)} \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} & 0 \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_s & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f^{(1)}(Y_1) & f^{(2)}(Y_1) \\ f^{(1)}(Y_2) & f^{(2)}(Y_2) \\ \vdots & \vdots \\ f^{(1)}(Y_s) & f^{(2)}(Y_s) \\ f^{(1)}(y_1) & f^{(2)}(y_1) \end{pmatrix}$$

John B. en [3] organiza el método usando la siguiente tabla:

c_1	a_{11}	a_{12}	\cdots	a_{1s}
c_2	a_{21}	a_{22}	\cdots	a_{2s}
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\cdots	a_{ss}
	b_1	b_2	\cdots	b_s

y si

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \end{pmatrix}$$

el método es explícito si A es una matriz triangular inferior con diagonal cero y $c_1 = 0$.

Para $j = 1, 2$ definamos:

$$G_j = \begin{pmatrix} Y_{1j} \\ Y_{2j} \\ \vdots \\ Y_{sj} \\ y_1^{(j)} \end{pmatrix}$$

Si

$$\widehat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} & 0 \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_s & 0 \end{pmatrix}$$

entonces G_j satisface la ecuación:

$$G_j = y_0^{(j)} \cdot \mathbf{1} + h\widehat{A} \begin{pmatrix} f^{(j)}(Y_1) \\ f^{(j)}(Y_2) \\ \vdots \\ f^{(j)}(Y_s) \\ f^{(j)}(y_1) \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

donde $\mathbf{1}$ es la matriz columna de orden $(s+1) \times 1$ cuyas entradas son todas iguales a 1.

Si cada $f^{(j)}$ admite un desarrollo de Taylor en un entorno abierto U_j de y_0 , digamos:

$$f^{(j)}(w) = \sum_{i_1, i_2 \geq 0} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \frac{(w_1 - y_0^{(1)})^{i_1}}{i_1!} \frac{(w_2 - y_0^{(2)})^{i_2}}{i_2!}$$

entonces podemos elegir h lo suficientemente pequeño como para que:

$$Y_i \in U_1 \cap U_2, \quad y_1 \in U_1 \cap U_2$$

y así:

$$f^{(j)}(Y_i) = \sum_{i_1, i_2 \geq 0} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \frac{(Y_{i1} - y_0^{(1)})^{i_1}}{i_1!} \frac{(Y_{i2} - y_0^{(2)})^{i_2}}{i_2!}$$

$$f^{(j)}(y_1) = \sum_{i_1, i_2 \geq 0} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \frac{(y_1^{(1)} - y_0^{(1)})^{i_1}}{i_1!} \frac{(y_1^{(2)} - y_0^{(2)})^{i_2}}{i_2!}$$

Si $\mathbb{A} = \mathbb{R}^{(s+1) \times 1}$, entonces \mathbb{A} es una \mathbb{R} -álgebra con el producto:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_s \\ x_{s+1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_s \\ z_{s+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 z_1 \\ x_2 z_2 \\ \vdots \\ x_s z_s \\ x_{s+1} z_{s+1} \end{pmatrix}$$

Así tenemos que:

$$\begin{pmatrix} f^{(j)}(Y_1) \\ f^{(j)}(Y_2) \\ \vdots \\ f^{(j)}(Y_s) \\ f^{(j)}(y_1) \end{pmatrix} = \sum_{i_1, i_2 \geq 0} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \frac{(G_1 - y_0^{(1)} \mathbf{1})^{i_1}}{i_1!} \cdot \frac{(G_2 - y_0^{(2)} \mathbf{1})^{i_2}}{i_2!}$$

donde $(G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1})^{i_j}$ consiste en multiplicar i_j -veces la columna $G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1}$ usando el producto del álgebra \mathbb{A} .

Una vez más sea $F^j(x_1, x_2)$ la serie formal en 2 variables dada por:

$$F^j(x_1, x_2) = \sum_{i_1, i_2 \geq 0} f_{i_1 i_2}^{(j)}(y_0) \frac{x_1^{i_1}}{i_1!} \frac{x_2^{i_2}}{i_2!}$$

entonces la ecuación (4.5) se reescribe como:

$$G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1} = h \widehat{A} F^j(G_1 - y_0^{(1)}, G_2 - y_0^{(2)}) \quad (4.6)$$

Note que $F^j(G_1 - y_0^{(1)}, G_2 - y_0^{(2)})$ es una serie en h con coeficientes en \mathbb{A} , por lo tanto $G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1}$ también es una serie en h con coeficientes en \mathbb{A} . Es decir:

$$G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1} = \sum_{k=1}^{\infty} g_k^{(j)} \frac{h^k}{k!}$$

con $g_k^{(j)} \in \mathbb{A}$ para todo $k \geq 1$. Nuevamente la ecuación (3.7) nos dice que los coeficientes de $G_j - y_0^{(j)} \mathbf{1}$ quedan expresados de la siguiente manera:

$$g_k^{(j)} = \sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}^{(r)}=j \\ |t|=k}} \frac{k! \mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Lambda(t)}{\sigma(t)}$$

Para este caso:

$$\Lambda(\bullet) = \widehat{A}\mathbf{1} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^s a_{1k} \\ \sum_{k=1}^s a_{2k} \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^s a_{sk} \\ \sum_{k=1}^s b_k \end{pmatrix}$$

y si $t = B_+(t_1, t_2, \dots, t_m)$, entonces $\Lambda(t) = \widehat{A}(\Lambda(t_1) \cdot \Lambda(t_2) \cdots \Lambda(t_m))$. Finalmente:

$$G_j = y_0 \mathbf{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Lambda(t)}{\sigma(t)} \right) h^k$$

Sea $P_i : \mathbb{R}^{(s+1) \times 1} \rightarrow \mathbb{R}$ la proyección en la i -ésima entrada y

$$\Phi_i(t) = P_i(\Lambda(t))$$

De esta manera:

$$y_1^{(j)} = P_{s+1}(G_j) = y_0^{(j)} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=j \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Phi_{s+1}(t)}{\sigma(t)} \right) h^k$$

y por lo tanto:

$$y_1 = y_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=1 \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Phi_{s+1}(t)}{\sigma(t)}, \sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}(r)=2 \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K}) \Phi_{s+1}(t)}{\sigma(t)} \right) h^k \quad (4.7)$$

Teorema 4.1. *Un método de Runge-Kutta tiene orden m si $\Phi_{s+1}(t) = \frac{1}{t!}$ para todos los árboles t tales que $|t| \leq m$.*

Demostración.

Por la ecuación (4.3) tenemos que el desarrollo de Taylor de la solución analítica del PVI es:

$$y_j(x) = y_0^j + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}^{(r)=j} \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K})}{\sigma(t)t!} \right) (x - x_0)^k$$

Para que un método de RK sea de orden m se debe cumplir que la serie de Taylor de la aproximación coincida con la de la solución hasta el término de orden m , es decir, se debe cumplir que:

$$y_0^j + \sum_{k=1}^m \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}^{(r)=j} \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K})}{\sigma(t)t!} \right) (x - x_0)^k = y_0^{(j)} + \sum_{k=1}^m \left(\sum_{\substack{(t, \mathcal{K}) \\ \mathcal{K}^{(r)=j} \\ |t|=k}} \frac{\mathbb{F}(t, \mathcal{K})\Phi_{s+1}(t)}{\sigma(t)} \right) h^k$$

Como $h = x - x_0$, esta igualdad se cumple si y solo si $\Phi_{s+1}(t) = \frac{1}{t!}$ para todos los árboles t tales que $|t| \leq m$. \square

4.3. Interpretación arbórea de $\Phi_i(t)$

Note que si $t = B_+(t_1, \dots, t_l)$ entonces:

$$\begin{aligned} \Lambda(t) &= \widehat{A}(\Lambda(t_1) \cdots \Lambda(t_l)) \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_s & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \prod_{p=1}^l \Phi_1(t_p) \\ \prod_{p=1}^l \Phi_2(t_p) \\ \vdots \\ \prod_{p=1}^l \Phi_{s+1}(t_p) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

De donde:

$$\begin{aligned} \Phi_i(t) &= \sum_{j=1}^s a_{ij} \prod_{p=1}^l \Phi_j(t_p) \quad \text{si } 1 \leq i \leq s \\ \Phi_{s+1}(t) &= \sum_{j=1}^s b_j \prod_{p=1}^l \Phi_j(t_p) \end{aligned}$$

Esto da cabida al siguiente lema:

Lema 4.1. Sea T un árbol cuyos vértices están dados por un conjunto de índices V . Sea $r \in V$ la raíz de T , $t = \tau(T)$ y E el conjunto de lados de T . Entonces:

$$\begin{aligned}\Phi_i(t) &= \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} a_{ir} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2} \quad \text{si } 1 \leq i \leq s \\ \Phi_{s+1}(t) &= \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} b_r \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2}\end{aligned}$$

en donde v_2 es hijo de v_1 .

Demostración.

Para el caso $1 \leq i \leq s$. Si $t = \bullet$ entonces:

$$\begin{aligned}\Phi_i(\bullet) &= \sum_{j=1}^s a_{ij} \\ &= a_{i1} + a_{i2} + \cdots + a_{is} \\ &= \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} a_{ir} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2}\end{aligned}$$

en este caso como E es un conjunto vacío el producto $\prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2}$ es igual a 1.

Si $t = \overset{\bullet}{\underset{\bullet}{\text{r}}}^{\text{k}}$ entonces:

$$\begin{aligned}\Phi_i(t) &= \sum_{r=1}^s a_{ir} \Phi_r(\bullet) \\ &= \sum_{r=1}^s a_{ir} \sum_{k=1}^s a_{rk} \\ &= \sum_{1 \leq r, k \leq s} a_{ir} a_{rk} \\ &= \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} a_{ir} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2}\end{aligned}$$

Si $|t| = n$ asumamos como verdadero que:

$$\Phi_i(t) = \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} a_{ir} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2}$$

Ahora bien, si $|t| = n + 1$, $t = B_+(t_1, \dots, t_l)$ y para cada $p = 1, \dots, l$, r_p y E_p son respectivamente la raíz y el conjunto de lados de t_p , tenemos:

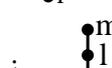
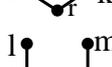
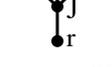
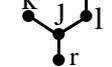
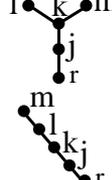
$$\begin{aligned}
\Phi_i(t) &= \sum_{j=1}^s a_{ij} \prod_{p=1}^l \Phi_j(t_p) \\
&= \sum_{j=1}^s a_{ij} \prod_{p=1}^l \sum_{\substack{v \in V_p \\ 1 \leq v \leq s}} a_{jr_p} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E_p} a_{v_1, v_2} \\
&= \sum_{j=1}^s a_{ij} \sum_{\substack{v \in V - \{j\} \\ 1 \leq v \leq s}} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2} \\
&= \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} a_{ij} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2} \\
&= \sum_{\substack{v \in V \\ 1 \leq v \leq s}} a_{ir} \prod_{\{v_1, v_2\} \in E} a_{v_1, v_2}
\end{aligned}$$

Para el caso $i = s + 1$ la prueba es análoga a la anterior cambiando a_{ij} por b_j . □

Para entender como usar este lema veamos un ejemplo para orden 3:

$$\begin{aligned}
\Phi_{s+1} \left(\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array} \right) &= \sum_{1 \leq r, j, k \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} & T = \begin{array}{c} \mathbf{k} \quad \mathbf{j} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \mathbf{r} \end{array} \\
\Phi_i \left(\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array} \right) &= \sum_{1 \leq r, j, k \leq s} a_{ir} a_{rj} a_{rk} & T = \begin{array}{c} \mathbf{k} \quad \mathbf{j} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \mathbf{r} \end{array}
\end{aligned}$$

A continuación se muestra una tabla en la cual se expresa $\Phi_{s+1}(t)$ para $|t| \leq 5$.

$ t $	T	$\Phi_{s+1}(t)$	$t!$
1		$\sum_{1 \leq r \leq s} b_r$	1
2		$\sum_{1 \leq r, j \leq s} b_r a_{rj}$	2
3		$\sum_{1 \leq r, j, k \leq s} b_r a_{rj} a_{rk}$	3
3		$\sum_{1 \leq r, j, k \leq s} b_r a_{rj} a_{jk}$	6
4		$\sum_{1 \leq r, j, k, l \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{rl}$	4
4		$\sum_{1 \leq r, j, k, l \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{kl}$	8
4		$\sum_{1 \leq r, j, k, l \leq s} b_r a_{rj} a_{jk} a_{jl}$	12
4		$\sum_{1 \leq r, j, k, l \leq s} b_r a_{rj} a_{jk} a_{kl}$	24
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{rl} a_{rm}$	5
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{rl} a_{lm}$	10
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{kl} a_{km}$	15
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{kl} a_{lm}$	30
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{rk} a_{jl} a_{km}$	20
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{jk} a_{jl} a_{jm}$	20
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{jk} a_{jl} a_{lm}$	40
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{jk} a_{kl} a_{km}$	60
5		$\sum_{1 \leq r, j, k, l, m \leq s} b_r a_{rj} a_{jk} a_{kl} a_{lm}$	120

La tabla de arriba sirve para establecer las condiciones de orden para un método de Runge-Kutta implícito de s etapas y hasta de orden 5. Por ejemplo, un método de orden 4 con 3 etapas queda:

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq r \leq 3} b_r &= 1 \\ \sum_{1 \leq r, j \leq 3} b_r a_{rj} &= \frac{1}{2} \\ \sum_{1 \leq r, j, k \leq 3} b_r a_{rj} a_{rk} &= \frac{1}{3} \\ \sum_{1 \leq r, j, k \leq 3} b_r a_{rj} a_{jk} &= \frac{1}{6} \\ \sum_{1 \leq r, j, k, l \leq 3} b_r a_{rj} a_{rk} a_{rl} &= \frac{1}{4} \\ \sum_{1 \leq r, j, k, l \leq 3} b_r a_{rj} a_{rk} a_{kl} &= \frac{1}{8} \\ \sum_{1 \leq r, j, k, l \leq 3} b_r a_{rj} a_{jk} a_{jl} &= \frac{1}{12} \\ \sum_{1 \leq r, j, k, l \leq 3} b_r a_{rj} a_{jk} a_{kl} &= \frac{1}{24} \end{aligned}$$

El cual tiene infinitas soluciones y es de difícil resolución, razón por la cual no daremos detalle de estos en este trabajo.

El método más usado es el explícito ya que este reduce la cantidad de variables en el sistema. A continuación lo desarrollamos con más detalle.

4.4. Método explícito de Runge-Kutta autónomo

Para empezar asumamos que:

$$\sum_{j=1}^s a_{ij} = c_i \quad (4.8)$$

condiciones y de variables para ciertas combinaciones de orden y etapas:

p	N_p	s	M_s
1	1	1	1
2	2	2	3
3	4	3	6
4	8	4	10
5	17	6	21
6	37	7	28
7	115	9	45
8	200	11	66

donde N_p es la cantidad de condiciones de orden.

4.5. Métodos explícitos de cuarto y quinto orden

En esta sección, a modo de conclusión, presentamos el estudio de los métodos de Runge-Kutta de cuarto y quinto orden usando la teoría de árboles tal como los presenta John B. en [3].

4.5.1. Métodos de cuarto orden

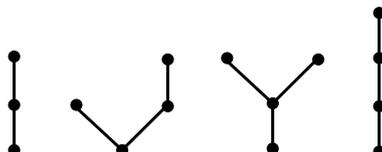
El trabajo más importante sobre los métodos de cuarto orden fue realizado por Kutta en 1901. Ahí, Kutta encuentra varias familias de métodos de las cuales solo consideraremos una en detalle. Empezamos con la tabla:

0				
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$		
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2} - a_{32}$	a_{32}	
1	$1 - a_{42} - a_{43}$	a_{42}	a_{43}	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3} - b_3$	b_3	$\frac{1}{6}$

Esta tabla cumple con las condiciones de orden que corresponden a los siguientes árboles:



Por lo que aún quedan por cumplirse las que corresponden a los siguientes:



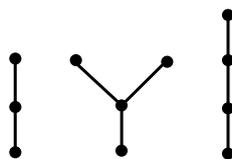
Si tomamos las ecuaciones (4.9) y (4.10) de las condiciones de orden, las restamos y después despejamos a_{4j} , obtenemos que en un método de cuarto orden con 4 etapas es necesario que:

$$a_{4j} = b_4^{-1} (b_j(1 - c_j) - \sum_{i < 4} b_i a_{ij})$$

Sustituyendo esto en la tabla obtenemos:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} - a_{32}$	a_{32}		
1	$6b_3 a_{32} - 1$	$2 - 3b_3 - 6b_3 a_{32}$	$3b_3$	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3} - b_3$	b_3	$\frac{1}{6}$

Con lo que ahora se satisfacen las condiciones de orden de estos tres árboles:



La condición restante es:

$$b_3 c_2 c_3 a_{32} + b_4 (c_2 a_{42} + c_3 a_{42}) c_4 = \frac{1}{8}$$

la cual se reduce a:

$$b_3 (1 - a_{32}) = \frac{1}{6}$$

Sustituyendo $a_{32} = 1 - \frac{1}{6b_3}$ el método queda:

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6b_3} - \frac{1}{2}$	$1 - \frac{1}{6b_3}$		
1	$6b_3 - 2$	$3 - 9b_3$	$3b_3$	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3} - b_3$	b_3	$\frac{1}{6}$

Y el valor $b_3 \neq 0$ queda a disposición. Si se tomara $b_3 = \frac{1}{3}$ se obtiene el método de Runge-Kutta de cuarto orden clásico, propuesto por Kutta en 1901.

4.5.2. Un método de orden 5

En [3] Butcher propone el siguiente método de orden 5:

0						
$\frac{1}{10}$	$\frac{1}{10}$					
$\frac{1}{5}$	$\frac{11}{260}$	$\frac{41}{260}$				
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{170}$	$\frac{63}{340}$	$\frac{9}{68}$			
$\frac{3}{4}$	$\frac{13035}{544}$	$\frac{75447}{1088}$	$\frac{9009}{136}$	$\frac{1287}{64}$		
1	$\frac{165709}{918}$	$\frac{733747}{1326}$	$\frac{638689}{1122}$	$\frac{32053}{162}$	$\frac{5320}{11583}$	
	$\frac{5}{54}$	0	0	$\frac{250}{567}$	$\frac{32}{81}$	$\frac{1}{14}$

Este método satisface las 17 condiciones de orden dadas por los árboles mostrados en la sección anterior.

El procedimiento expuesto en este trabajo para la obtención de las condiciones de orden de un método de Runge-Kutta autónomo puede ser extendido al caso no autónomo, usando una construcción similar a la aquí mostrada, es decir, reescribiendo el método como un producto de matrices se obtiene que las condiciones de orden vienen dadas por árboles. Dicho caso se encuentra fuera de los objetivos de este trabajo, razón por la cual no será desarrollado en detalle.

Bibliografía

- [1] Dennis G. Zill, Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado, International Thomson Editores, 1997.
- [2] Boyce - DiPrima, Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera, Limusa, 2000.
- [3] Butcher, J.C., Trees and numerical methods for ordinary differential equations, Numer Algor 53, 153-170 (2009)
- [4] Butcher, J.C., Numerical Methods for Ordinary Differential Equations, Wiley, 2003.
- [5] Butcher, J.C., Runge-Kutta methods for ordinary differential equations, University of Auckland, New Zealand, 2005.
- [6] Bruzual, R. - Domínguez M., Cálculo diferencial en una variable, Universidad Central de Venezuela, 2005.
- [7] Bruzual, R. - Domínguez M., Cálculo diferencial en varias variables, Universidad Central de Venezuela, 2005.
- [8] Méndez, M., Cálculo diferencial combinatorio, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, 2012.
- [9] F. Bergeron, G. Labelle and P. Leroux, Combinatorial species and tree-like structures, Enc. of Math. and its Appl., Camb. Univ. Press 1997.
- [10] A. Cayley., On the theory of the analytical forms called trees. Phil. Mag., 13:172-6, 1857.