Métodos de Runge-Kutta con longitud de paso variable

Ander Murua
Curso de *Computación en Ciencia e Ingeniería: Simulación Numérica*
Máster Universitario en Ingeniería Computacional y Sistemas Inteligentes

1. Introducción

Consideremos un problema de valor inicial de la forma

$$\frac{du}{dt} = f(t,u), \quad u(t_0) = u_0. \tag{1}$$

La solución $u(t)$ de (1) se puede aproximar en los valores de t de la discretización temporal

$$t_0, \quad t_1 = t_0 + h_0, \quad t_2 = t_1 + h_1, \quad t_3 = t_2 + h_2, \dots, t_n = t_{n-1} + h_{n-1} = T_{\text{final}}$$

por medio de un método de Runge-Kutta, con coeficientes $b_i, a_{i,l}$ apropiados.

Lo más sencillo, a la hora de fijar dicha discretización temporal es considerar una discretización uniforme, es decir con longitud de paso constante: Para todo $j = 0, 1, 2, \dots, n-1$, elegir $h_j = h$, con h suficientemente pequeño.

Sin embargo, para muchos problemas, es más eficiente considerar una discretización temporal no uniforme, tomando longitudes de paso h_j menores cuando la solución es más difícil de aproximar, y mayores cuando la solución se vuelve más suave.

Consideremos un método de Runge-Kutta, caracterizado por un número entero s, el *número de etapas*, y los coeficientes reales

$$b_1,\ b_2,\ \dots,\ b_s,\ a_{2,1},\ a_{3,1},\ a_{3,2},\ a_{4,1},\ a_{4,2},\ a_{4,3},\ \dots,\ a_{s,1},\ \dots,\ a_{s,s-1}.$$

Recordemos que para obtener u_{j+1} a partir de (t_j, u_j) con longitud de paso h_j, debemos realizar los siguientes cálculos:

$$\begin{aligned}
k_{j,1} &= f(t_j, u_j),\\
k_{j,2} &= f(t_j + h_j c_2, u_j + h_j a_{2,1} k_{j,1}),\\
k_{j,3} &= f(t_j + h_j c_3, u_j + h_j a_{3,1} k_{j,1} + h_j a_{3,2} k_{j,2}),\\
&\ \ \vdots \qquad \vdots\\
k_{j,s} &= f(t_j + h_j c_s, u_j + h_j a_{s,1} k_{j,1} + \cdots + h_j a_{s,s-1} k_{j,s-1}),\\
u_{j+1} &= u_j + h_j (b_1 k_{j,1} + b_2 k_{j,2} + \cdots + b_s k_{j,s-1}).
\end{aligned} \tag{2}$$

donde $c_i = a_{i,1} + \cdots + a_{i,i-1}$ para $j = 2, \dots, s$.

Aquí nos centraremos en el método de orden 5 de Dormand y Prince, $s = 6$, y con los siguientes coeficientes $b_i, a_{i,l}$:

$$
\begin{aligned}
&a_{2,1} = \frac{1}{5}, \quad a_{3,1} = \frac{3}{40}, \quad a_{3,2} = \frac{9}{40}, \quad a_{4,1} = \frac{44}{45}, \quad a_{4,2} = \frac{-56}{15}, \quad a_{4,3} = \frac{32}{9}, \\
&a_{5,1} = \frac{19372}{6561}, \quad a_{5,2} = \frac{-25360}{2187}, \quad a_{5,3} = \frac{64448}{6561}, \quad a_{5,4} = \frac{-212}{729}, \\
&a_{6,1} = \frac{9017}{3168}, \quad a_{6,2} = \frac{-355}{33}, \quad a_{6,3} = \frac{46732}{5247}, \quad a_{6,4} = \frac{49}{176}, \quad a_{6,5} = \frac{-5103}{18656}, \\
&b_1 = \frac{35}{384}, \quad b_2 = 0, \quad b_3 = \frac{500}{1113}, \quad b_4 = \frac{125}{192}, \quad b_5 = \frac{-2187}{6784}, \quad b_6 = \frac{11}{84}.
\end{aligned}
$$

2. Esquema del procedimiento habitual en la aplicación de un método de Runge-Kutta con estrategia de paso variable

Partiendo de (t_0, u_0), se procede como sigue para $j = 0, 1, 2, 3, \ldots$,

1. elegir h_j apropiado a partir de (t_j, u_j),
2. calcular $t_{j+1} = t_j + h_j$,
3. calcular u_{j+1} aplicando un paso del método de Runge-Kutta, con longitud de paso h_j.

La elección de una secuencia de longitudes de paso h_j que optimice en sentido estricto la eficiencia del método para un problema dado es en general muy difícil. En la práctica, se suele aplicar un procedimiento de carácter más bien heurístico, que describimos a continuación.

Para elegir una longitud de paso h_j apropiada se plantea como objetivo que h_j sea tal que la siguiente expresión $E(h_j)$

$$
E(h_j) = h_j \, ||d_1 k_{j,1} + d_2 k_{j,2} + \ldots + d_s k_{j,s} + d_{s+1} f(t_{j+1}, u_{j+1})||, \tag{3}
$$

(con coeficientes $d_1, d_2, \ldots, d_s, d_{s+1}$ elegidos de forma apropiada,) sea aproximadamente igual al valor del parḿetro de control del error tol. Dado un vector $v = (v_1, \ldots, v_d)$ de d componentes reales, $||v||$ representa su norma euclídea, es decir, $||v|| = \sqrt{v_1^2 + \cdots + v_d^2}$.

La elección de valores apropiados para los coeficientes d_i es una tarea relativamente compleja. Aquí nos limitaremos a dar los coeficientes usados habitualmente en el caso del método de órden 5 de Dormand y Prince:

$$
\begin{aligned}
&d_1 = -\frac{12715105075}{11282082432}, \quad d_2 = 0, \quad d_3 = \frac{87487479700}{32700410799}, \quad d_4 = -\frac{10690763975}{1880347072}, \\
&d_5 = \frac{701980252875}{199316789632}, \quad d_6 = -\frac{1453857185}{822651844}, \quad d_7 = \frac{69997945}{29380423}.
\end{aligned}
$$

El caso es que, con dichos valores de los coeficientes d_j, se puede ver que

- Si para cada j, la longitud de paso h_j se elige de tal forma que $E(h_j) \approx$ tol, habitualmente se logra una discretización no uniforme relativamente cercana a la óptima, y mejor que la discretización uniforme.

- fijados t_j y u_j, para valores de h_j suficientemente pequeños, $E(h_j)$ es aproximadamente proporcional a h_j^5, Esto último es esencial para el procedimiento de elección de la longitud de paso. A continuación, describimos una versión simplificada del algoritmo con paso variable del Dormand y Prince de orden 5 (que llamaremos DOPRI5) que se encuentra implementada en diversos entornos de cálculo:

Supondremos para simplificar la exposición que $t_0 < T_{\text{final}}$ (el algoritmo se puede adaptar, realizando unos pequeños cambios, para el caso en que $t_0 > T_{\text{final}}$, es decir, para el caso en que se integre hacia atrás en el tiempo).

Se parte de (t_0, u_0), y de un valor prescrito del parámetro $\text{tol} > 0$ (digamos que entre 10^{-3} y 10^{-14}) que controla la precisión requerida (cuanto menor es tol mayor precisión), y de un valor preliminar h_0 (tal que $0 < h_0 \leq T_{\text{final}} - t_0$) para la longitud del primer paso. Para cada $j = 0, 1, 2, 3, \ldots$, se siguen los siguientes pasos

1. calcular $t_{j+1} = t_j + h_j$;

2. calcular u_{j+1} aplicando (2), es decir un paso del método de Runge-Kutta, con longitud de paso h_j;

3. calcular $E(h_j)$ aplicando la fórmula (3);

4. comprobar si $E(h_j) \geq 2\,\text{tol}$,

   - si es cierto, calcular $\bar{h}_j$ según la fórmula que sigue,

     $$\bar{h}_j = h_j\,(\text{tol}/E(h_j))^{\frac{1}{5}},$$

     reasignar $h_j = \bar{h}_j$, y volver al paso 1;

   - en caso contrario, si $t_{j+1} = T_{\text{final}}$ terminar, y si en cambio $t_{j+1} < T_{\text{final}}$ pasar al punto 5;

5. calcular el valor de la longitud h_{j+1} del paso siguiente según la fórmula

   $$h_{j+1} = \text{mín}(h_j\,(\text{tol}/E(h_j))^{\frac{1}{5}}, T_{\text{final}} - t_{j+1});$$

6. incrementar el valor del contador, $j = j + 1$, y volver al paso 1.