Métodos de Runge-Kutta para sistemas de EDOs, y estimaciones del error

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

1. Métodos de Runge-Kutta para sistemas de EDOs

Consideremos un problema de valor inicial de la forma

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

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

$$t_0 = 0, \quad t_1 = h, \quad t_2 = 2h, \quad t_3 = 3h, \ldots$$

por medio del método de Euler o por el método de Euler mejorado. Sin embargo, dichos métodos son de orden 1 y 2 respectivamente, y requieren discretizaciones extremadamente finas (y por tanto, tiempos de CPU muy grandes) si se quieren obtener aproximaciones muy precisas. Veremos que el algoritmo de Euler se puede modificar para aproximar de forma más precisa los resultados $u(t_j)$ (para $j = 0, 1, 2, 3, \ldots$). Aquí consideraremos una familia de métodos, los *métodos de Runge-Kutta*, que incluye como caso particular al método de Euler, y al algoritmo de Euler mejorado.

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

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

Por ejemplo, para el método RK4 serían $s = 4$, y

$$b_1 = b_4 = \frac{1}{6}, \quad b_2 = b_3 = \frac{2}{6}, \quad a_{2,1} = a_{3,2} = \frac{1}{2}, \quad a_{4,3} = 1, a_{3,1} = a_{4,1} = a_{4,2} = 0.$$

Fijados el entero positivo s y los parḿetros reales $b_i,\ a_{i,l}$ del método de Runge-Kutta concreto a aplicar, las aproximaciones $u_1, u_2, u_3, \ldots$ de la solución $u(t)$ de (1) en $t = t_1, t_2, t_3, \ldots$ se obtienen según el siguiente algoritmo.

Para $j = 0, 1, 2, \ldots$, se calcula u_{j+1} a partir de (t_j, u_j) realizando los siguientes cálculos:

$$\begin{aligned}
k_{j,1} &= f(t_j, u_j),\\
k_{j,2} &= f(t_j + hc_2, u_j + ha_{2,1}k_{j,1}),\\
k_{j,3} &= f(t_j + hc_3, u_j + ha_{3,1}k_{j,1} + ha_{3,2}k_{j,2}),\\
\vdots\ &\quad \vdots\\
k_{j,s} &= f(t_j + hc_s, u_j + ha_{s,1}k_{j,1} + \cdots + ha_{s,s-1}k_{j,s-1}),\\
u_{j+1} &= u_j + h(b_1k_{j,1} + b_2k_{j,2} + \cdots + b_sk_{j,s}).
\end{aligned}$$

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

Lógicamente, la elección de los coeficientes b_i, $a_{i,l}$ es determinante para la precisión de los resultados. Por ejemplo, para que el método de Runge-Kutta correspondiente sea de orden mayor o igual que 3, los coeficientes tienen que cumplir las siguientes condiciones:

$$\sum_{i=1}^{s} b_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{s} b_i c_i = \frac{1}{2}, \quad \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{i=1}^{s}\sum_{l=1}^{i-1} b_i a_{i,l} c_l = \frac{1}{6}.$$

(*Sugerencia:* Comprobar que RK4 cumple dichas condiiciones. De hecho, cumple además otras cuatro condiciones adicionales que garantizan que el método sea de orden 4.)

2. Estimaciones de error

Supongamos que hemos calculado las aproximaciones u_j $(j = 1, 2, \ldots)$ de la solución $u(t)$ de (1) para los valores $t = t_j$ de la discretización temporal

$$t_0 = 0, \quad t_1 = h, \quad t_2 = 2h, \quad t_3 = 3h, \ldots$$

por medio de un método de Runge-Kutta de orden r (por ejemplo, para RK4, $r = 4$). Se puede demostrar que [1] la diferencia entre $u(t_j)$ y su aproximación u_j satisface, para h suficientemente pequeño, la siguiente igualdad aproximada

$$u_j - u(t_j) \approx C(t_j) h^r,$$

donde $C(t)$ es una función continua desconocida que no depende de h. Dicha igualdad aproximada será tanto más precisa cuanto más fina sea la discretización temporal utilizada (es decir, cuanto más pequeña sea la longitud de paso h empleada). Para determinar la función de $C(t)$ desconocida, se obtiene una segunda aproximación numérica con el mismo método de Runge-Kutta pero con longitud de paso doble $2h$, lo que da lugar a aproximaciones de la solución $u(t)$ en $t = t_2, t_4, t_6, \ldots$ (por utilizar un paso de longitud doble), que denotaremos como $\tilde{u}_2, \tilde{u}_4, \tilde{u}_6$, etc. En este caso, tenemos que

$$\tilde{u}_{2j} - u(t_{2j}) \approx C(t_{2j})(2h)^r,$$

para $j = 1, 2, 3, \ldots$, y al mismo tiempo

$$u_{2j} - u(t_{2j}) \approx C(t_{2j}) h^r,$$

con la misma función $C(t)$ desconocida. Despejando $C(t_{2j})$ de ambas igualdades aproximadas, llegamos a que

$$C(t_{2j}) \approx \frac{\tilde{u}_{2j} - u_{2j}}{(2^r - 1)\, h^r},$$

y por tanto finalmente tenemos (para $j = 1, 2, 3, \ldots$) que

$$u_{2j} - u(t_{2j}) \approx \frac{\tilde{u}_{2j} - u_{2j}}{2^r - 1},$$

que puede ser utilizado como estimativo del error cometido al aplicar el método de Runge-Kutta con longitud de paso h. Obsérvese que dichos estimativos se obtienen solamente para la mitad de los tiempos $t_2, t_4, t_6, \ldots$ (lo cual normalmente es más que suficiente).

[1] sujeto a la condición de que $f(t, u)$ sea continua con respecto a t y que admita todas las derivadas parciales de orden suficientemente alto respecto de todas las variables de estado