

Métodos de resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias: Parte II

Computación en ciencia e ingeniería: simulación numérica
MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA COMPUTACIONAL Y SISTEMAS
INTELIGENTES,
Euskal Herriko Unibertsitatea / Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

Supongamos que aplicamos un método numérico al problema

$$\frac{d}{dt}u = f(t, u), \quad u(t_0) = u_0 \quad (2)$$

para aproximar la solución $u(t)$ para $t \in [t_0, T]$, obteniendo

$$u_k \approx u(t_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n,$$

donde $t_k = t_0 + k h$ y $h = (T - t_0)/n$. Cuanto más fina es la discretización del tiempo, es decir, cuanto más pequeño es h , menor va a ser el error cometido

$$\text{Error}(h) = \max_{1 \leq k \leq n} \|u(t_k) - u_k\|.$$

Definición de orden de un método

El método es de orden r para el problema (2) en el intervalo $[t_0, T]$ si existe $C > 0$ tal que $\frac{1}{h^r} \text{Error}(h) \leq C$.

Nota: Dado un vector $v = (v_1, \dots, v_d) \in \mathbb{R}^d$, $\|v\|$ representa la norma Euclídea, es decir, $\|v\| = \sqrt{(v_1)^2 + \dots + (v_d)^2}$.

Hemos presentado anteriormente dos métodos numéricos para aproximar la solución $u(t)$ de un problema de valor inicial

$$\frac{d}{dt}u = f(t, u), \quad u(t_0) = u_0,$$

el método de Euler (de orden 1), y el método de Euler mejorado (de orden 2). En la práctica, nos interesa utilizar métodos de orden más alto (que nos dan mejor precisión para una discretización temporal igualmente fina).

Existen muchas clases de métodos que contienen métodos de orden más alto:

- Métodos de Taylor,
- Métodos de Runge-Kutta (RK),
- Métodos lineales multipaso,
- ...

Aquí nos limitaremos a presentar dos métodos de Runge-Kutta concretos de orden 4 y 5 respectivamente que son muy utilizados en la práctica.

Fijada una longitud de paso h :

Método de Runge-Kutta clásico de orden 4 (RK4)

Se calcula, para $k = 0, 1, 2, \dots$,

$$t_{j+1} = t_j + h, \quad u_{j+1} = u_j + \frac{h}{6}(k_{j,1} + 2k_{j,2} + 2k_{j,3} + k_{j,4}).$$

donde

$$k_{j,1} = f(t_j, u_j),$$

$$k_{j,2} = f\left(t_j + \frac{h}{2}, u_j + \frac{h}{2}k_{j,1}\right),$$

$$k_{j,3} = f\left(t_j + \frac{h}{2}, u_j + \frac{h}{2}k_{j,2}\right),$$

$$k_{j,4} = f(t_j + h, u_j + h k_{j,3}),$$

De este modo, se obtienen las aproximaciones

$$u_j \approx u(t_j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3, \dots$$

Observaciones:

- Cada u_j es un vector de d componentes ($u_j \in \mathbb{R}^d$),
- Para cada $(t_j, u_j) \in \mathbb{R}^{d+1}$, tenemos $f(t_j, u_j) \in \mathbb{R}^d$.
- Cada $k_{j,i}$ es también un vector de d componentes, que se utilizan internamente cada vez que se calcula u_{j+1} a partir de t_j y u_j . Tales vectores $k_{j,i}$ se denominan **etapas internas**. (A menudo los vectores $k_{j,i}$ se escriben como k_i , porque sólo se utilizan internamente en cada paso j .)
- Cuanto más pequeño sea h , más fina será la discretización temporal, y más precisas las aproximaciones obtenidas.

Runge-Kutta de orden 5 de Dormand & Prince

Se calcula, para $j = 0, 1, 2, \dots$,

$$t_{j+1} = t_j + h, \quad u_{j+1} = u_j + h \left(\frac{35}{384} k_1 + \frac{500}{1113} k_3 + \frac{125}{192} k_4 - \frac{2187}{6784} k_5 + \frac{11}{84} k_6 \right).$$

donde para cada j , las etapas internas $k_1, \dots, k_5 \in \mathbb{R}^d$ se calculan como

$$k_1 = f(t_j, u_j)$$

$$k_2 = f\left(t_j + \frac{1}{5}h, u_j + \frac{h}{5}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_j + \frac{3}{10}h, u_j + \frac{3h}{40}k_1 + \frac{9h}{40}k_2\right)$$

$$k_4 = f\left(t_j + \frac{4}{5}h, u_j + \frac{44h}{45}k_1 - \frac{56h}{15}k_2 + \frac{32h}{9}k_3\right)$$

$$k_5 = f\left(t_j + \frac{8}{9}h, u_j + \frac{19372h}{6561}k_1 - \frac{25360h}{2187}k_2 + \frac{64448h}{6561}k_3 - \frac{212h}{729}k_4\right)$$

$$k_6 = f\left(t_j + h, u_j + \frac{9017h}{3168}k_1 - \frac{355h}{33}k_2 + \frac{46732h}{5247}k_3 + \frac{49h}{176}k_4 - \frac{5103h}{18656}k_5\right)$$

Ello da lugar a las aproximaciones

$$u_j \approx u(t_j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3, \dots$$

Monitorización del error de los métodos numéricos

Cuando se utilizan métodos aproximados de cálculo, conviene disponer de **estimaciones del error** cometido, para asegurarnos de que los resultados numéricos son suficientemente precisos.

Supongamos que hemos aplicado a la EDO $\frac{d}{dt}u = f(t, u)$ con valor inicial $u(t_0) = u_0$ un método numérico con longitud de paso h , obteniendo las aproximaciones $u_j \approx u(t_j)$ para los tiempos

$$t_1 = t_0 + h, \quad t_2 = t_0 + 2h, \quad t_3 = t_0 + 3h, \quad t_4 = t_0 + 4h, \dots$$

Queremos **saber si el error $u_j - u(t_j)$ es suficientemente pequeño**, pero no disponemos de los valores exactos $u(t_j)$ de la solución. (si lo conociéramos, no habríamos tenido necesidad de aplicar un método numérico para calcular aproximaciones de la solución).

Existen varias formas de monitorizar el error del método numérico. Aquí consideraremos una de las formas más sencillas y fiables: La estimación del error basado en dos discretizaciones distintas de t , una el doble de fina que la otra.

Supongamos que hemos aplicado a la EDO $\frac{d}{dt}u = f(t, u)$ con valor inicial $u(t_0) = u_0$ un método numérico (por ejemplo, el método RK4) con longitud de paso h , obteniendo (a partir del valor conocido $u_0 = u(t_0)$) las aproximaciones $u_j \approx u(t_j)$ para los tiempos

$$t_1 = t_0 + h, \quad t_2 = t_0 + 2h, \quad t_3 = t_0 + 3h, \quad t_4 = t_0 + 4h, \dots$$

y que sabemos de que dicho método es de orden r ($r = 4$ en el caso de RK4).

Procedimiento de estimación del error

- 1 Se vuelve a aplicar el mismo método, pero con longitud de paso $2h$, obteniendo las aproximaciones

$$\tilde{u}_2 \approx u(t_2), \quad \tilde{u}_4 \approx u(t_4), \quad \tilde{u}_6 \approx u(t_6), \dots$$

- 2 se pueden estimar $u_{2j} - u(t_{2j})$ para $j = 1, 2, 3, \dots$ como

$$u_{2j} - u(t_{2j}) \approx \frac{1}{2^r - 1} (\tilde{u}_{2j} - u_{2j}) \quad (3)$$