

Integración Numérica de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias¹

Daniel Mejía R²

Grupo de Biofísica
Instituto de Física
Universidad de Antioquia



28 de Septiembre, 2011



¹Este documento corresponde a la versión 2.0 revisada y corregida el 17 Junio 2012

²danielmejia55@gmail.com

1 Motivación

2 Problemas de valor inicial

- Método de Euler
- Método Punto Medio
- Método de Heun
- Resumen Comparativo

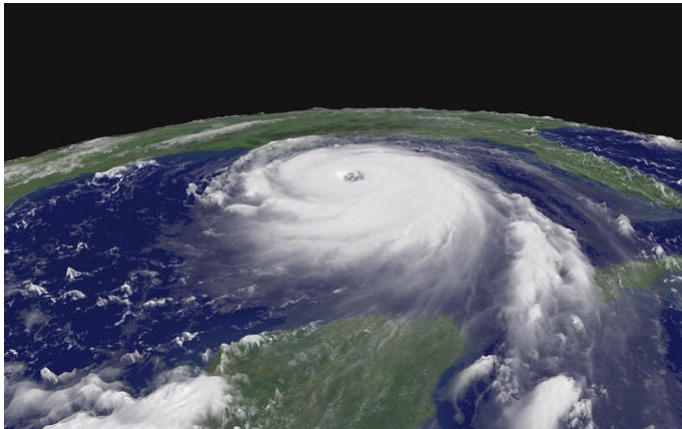
3 Métodos de Runge-Kutta

- Idea general de los métodos Runge-Kutta
- El clásico Runge-Kutta de orden 4
- Yendo más allá - Runge-Kutta-Fehlberg

4 Aplicación Práctica

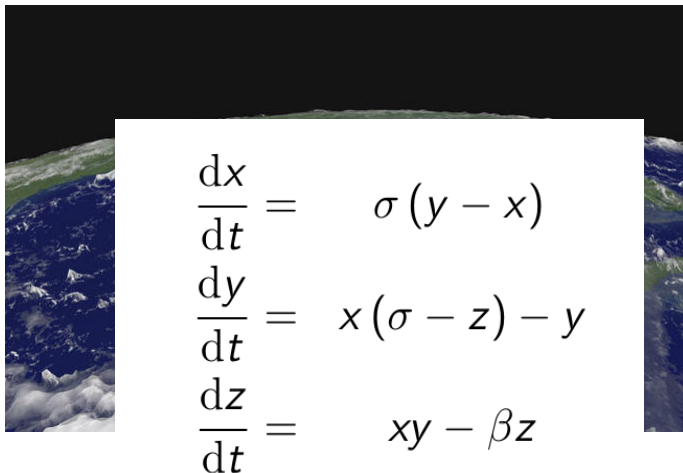
- Sistemas de EDOs de primer orden acopladas
- EDO de Orden Superior

Modelamiento de sistemas \implies Ecuaciones diferenciales ³



³E.D. para abreviar

Modelamiento de sistemas \implies Ecuaciones diferenciales ³


$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \sigma(y - x) \\ \frac{dy}{dt} &= x(\sigma - z) - y \\ \frac{dz}{dt} &= xy - \beta z\end{aligned}$$

³E.D. para abreviar

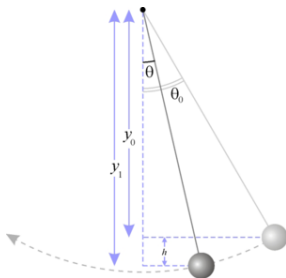
M



³E.D. para abreviar

Incluso un problema tan simple como la oscilación de un péndulo involucra una EDO sin solución analítica trivial⁴

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} - g \sin \theta = 0 \quad (1)$$



⁴La solución a esta ecuación se obtiene empleando integrales elípticas de primera clase. Agradecimientos especiales para Oswaldo Gómez de la UNAM por su observación oportuna

Se desea dar solución a una ecuación diferencial de primer orden

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad y(0) = y_0 \quad (2)$$

$f(t, y)$ es una función bien comportada, la estrategia es solucionar la ecuación en un conjunto suficientemente grande de valores discretos en las variables involucradas

$$t_j = t_0 + jh \quad (3)$$

h es un incremento de la variable independiente, puede ser fijo o variable.

De (2) es posible ver que la derivada en (t_0, y_0) es $f(t_0, y_0)$, en una aproximación de primer orden en la serie de Taylor se satisface:

$$y(t) \approx y(t_0) + (t - t_0) \frac{dy}{dt} \Big|_{t=t_0} \quad (4)$$

Tomando $h = t - t_0$, es posible construir un conjunto de valores discretos para $y(t)$

$$y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) \quad (5)$$

$$y_2 = y_1 + hf(t_1, y_1) \quad (6)$$

$$\vdots \quad (7)$$

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_j, y_j) \quad (8)$$

$$(9)$$

El método de Euler se utiliza para resolver PVI

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad y(0) = y_0 \quad (10)$$

Donde la solución se obtiene iterando la ecuación

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_j, y_j) \quad \text{Método Euler} \quad (11)$$

El error numérico asociado al *Método de Euler* es lineal a h , Lo resumimos diciendo que el Error de Discretización Global⁵ es $O(h)$ ⁶

⁵EDG

⁶Esta es la notación “O” de Lev Landau

Método de Euler - ejemplo de aplicación

Suponga que quiere solucionar

$$\frac{d\theta}{dt} - g \sin(\theta) = 0; \quad \theta(0) = g \quad (12)$$

tome $f(t, \theta) = g \sin(\theta)$

$$\theta_{j+1} = \theta_j + hg \sin(\theta_j) \quad (13)$$

$$t_j = t_0 + jh \quad (14)$$

la solución analítica de este problema se obtiene con cierta pericia,
resulta ser

$$\theta(t) = \arccos \left[\frac{1 + e^{2gt}}{1 - e^{2gt}} \right] \quad (15)$$

Método de Euler - ejemplo de aplicación⁷

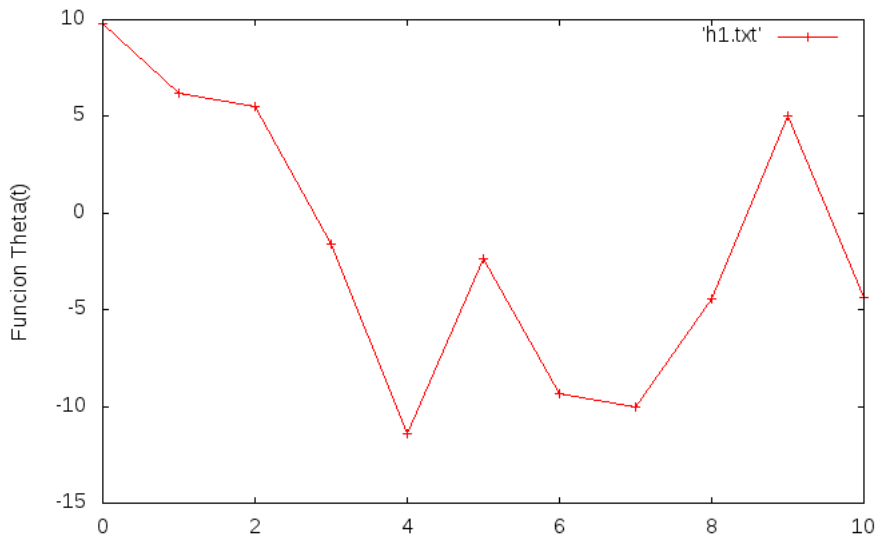
Comparación de resultados para diferentes h

| t | θ $h=1$ | θ $h=0.5$ | θ $h=0.01$ | θ $h=0.0001$ |
|-----|----------------|------------------|-------------------|---------------------|
| 0 | 9.800 | 9.800 | 9.800 | 9.800 |
| 1 | 6.209 | 1.285 | 9.425 | 9.425 |
| 2 | 5.477 | 1.910 | 9.425 | 9.425 |
| 3 | -1.593 | 2.519 | 9.425 | 9.425 |
| 4 | -1.139 | 2.716 | 9.425 | 9.425 |
| 5 | -2.344 | 3.223 | 9.425 | 9.425 |
| 6 | -9.356 | 3.117 | 9.425 | 9.425 |
| 7 | -1.003 | 2.509 | 9.425 | 9.425 |
| 8 | -4.444 | 2.361 | 9.425 | 9.425 |
| 9 | 5.005 | 1.804 | 9.425 | 9.425 |
| 10 | -4.380 | 1.908 | 9.425 | 9.425 |

⁷El código fuente se proporciona al final

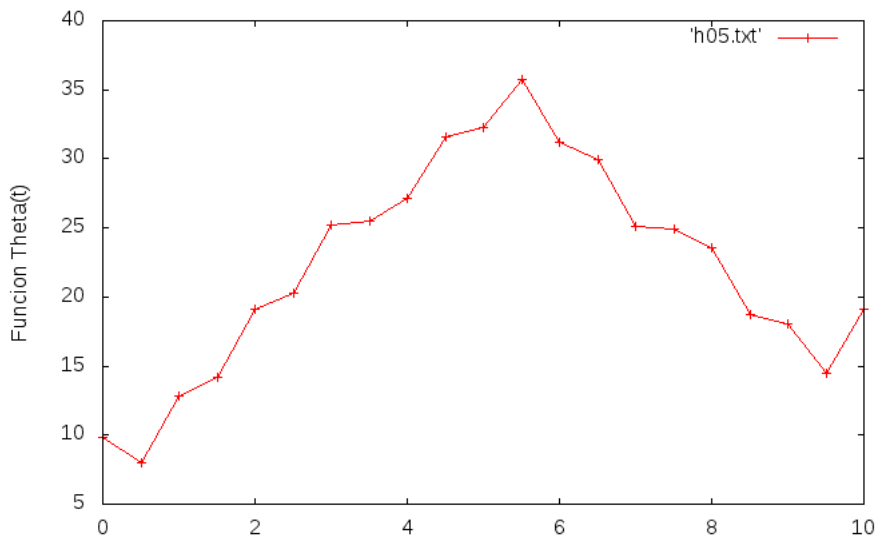
Método de Euler - ejemplo de aplicación

Ejemplo-1 - $h=1$

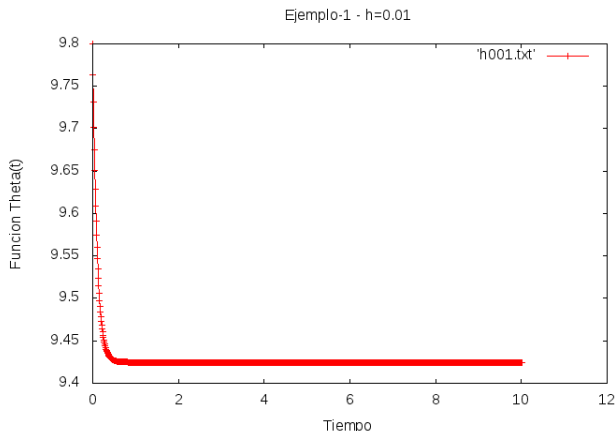


Método de Euler - ejemplo de aplicación

Ejemplo-1 - $h=0.5$



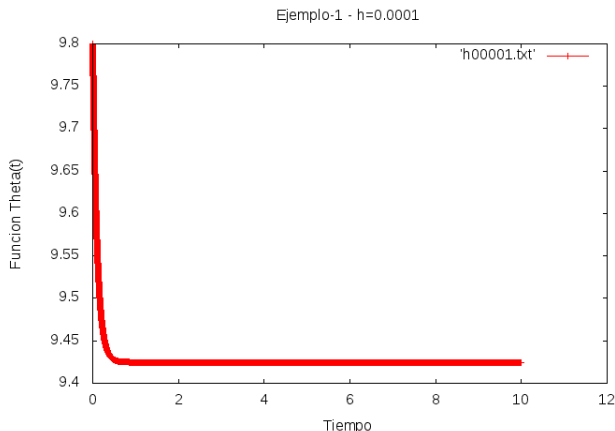
Método de Euler - ejemplo de aplicación



El resultado se comprende se toma en cuenta que para las condiciones iniciales elgidas, el resultado analítico debe arrojar

$$\theta(t) = 3\pi \approx 9,4248 \text{ para todo } t$$

Método de Euler - ejemplo de aplicación



Un h menor no añade más información a la solución numerica. Queda abierto el problema sobre la convergencia de la solución numerica de $\theta(t)$ para $t \leq 1$ que claramente no es 3π

Método del Punto Medio

El *Método del Punto Medio* mejora la precisión tomando dos evaluaciones de la pendiente y promediando el valor obtenido de modo que

$$k_1 = f(t_j, y_j) \quad (16)$$

$$y_{j+\frac{1}{2}} = y_j + \frac{h}{2} f(t_j, y_j) \quad (17)$$

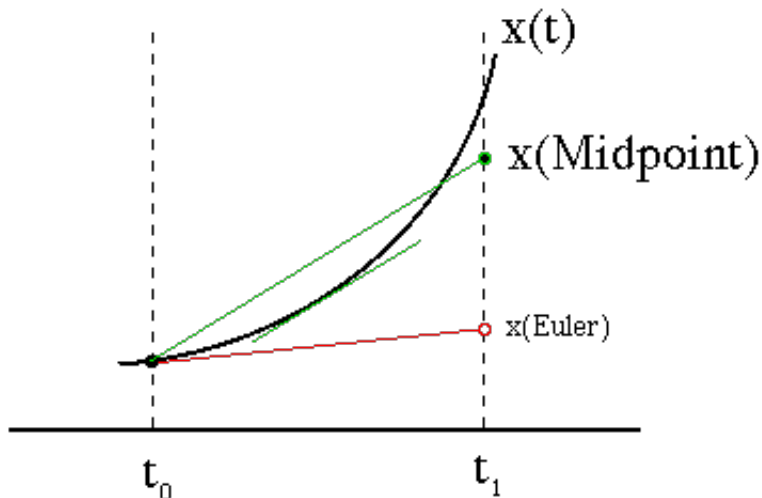
$$k_2 = f\left(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2} k_1\right) \quad (18)$$

Finalmente

$$\boxed{y_{j+1} = y_j + h k_2 \quad \text{EDG} \quad O(h^2)} \quad (19)$$

Se calculan dos constantes intermedias entre cada iteración

Comparación Métodos de Euler y Punto Medio



En el punto inicial se calcula

$$k_1 = f(t_j, y_j) \quad (20)$$

Luego se calcula un valor tentativo de y

$$y_j^{tent} = y_j + hf(t_j, y_j) \quad (21)$$

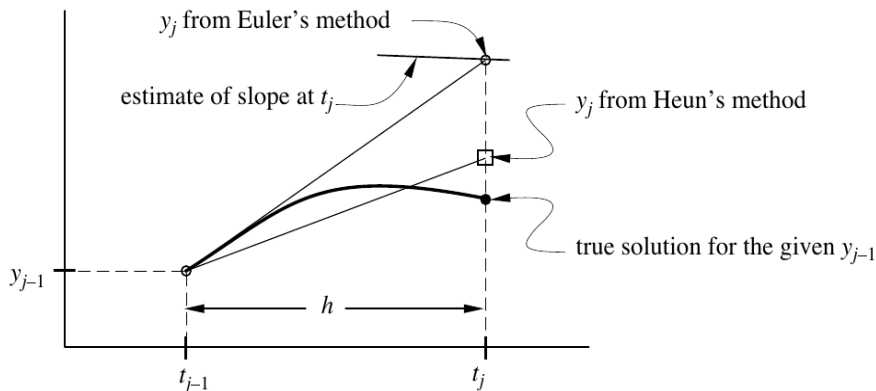
Se calcula la pendiente una vez más

$$k_2 = f(t_j + h, y_j^{tent}) = f(t_j + h, y_j + hf(t_j, y_j)) \quad (22)$$

El valor de y es un promedio, de modo que

$$y_{j+1} = y_j + h \left(\frac{k_1 + k_2}{2} \right) \quad \text{EDG} \quad O(h^2) \quad (23)$$

Comparación Métodos de Euler y Heun



- Método Euler

- Evalúa pendiente al inicio del intervalo en cada paso
- $EDG \approx O(h)$

- Método Punto Medio

- Evalúa pendiente al inicio y en el punto medio del intervalo en cada paso
- $EDG \approx O(h^2)$

- Método Heun

- Evalúa pendiente al inicio y en el extremo del intervalo en cada paso
- $EDG \approx O(h^2)$

Idea General de los Métodos Runge-Kutta ⁸

Los métodos RK utilizan el concepto de *Promedio Ponderado de la Pendiente* de la función evaluada en diferentes puntos de un intervalo dado por $h = t_{j+1} - t_j$

$$y_{j+1} = y_j + \sum_{p=1}^N \omega_p k_p \quad \text{RK orden N} \quad (24)$$

- ω_p son los coeficientes de peso. En general $\sum_{p=1}^N \omega_p = 1$
- k_p son los valores de las pendientes evaluadas en diferentes puntos del intervalo, el número de constantes utilizadas se conoce como *Orden del RK*

⁸RK para abreviar

El clásico Runge-Kutta de orden 4

Este método calcula la pendiente en cuatro puntos diferentes y luego promedia su valor

$$k_1 = f(t_j, y_j) \quad (25)$$

$$k_2 = f\left(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2}k_1\right) \quad (26)$$

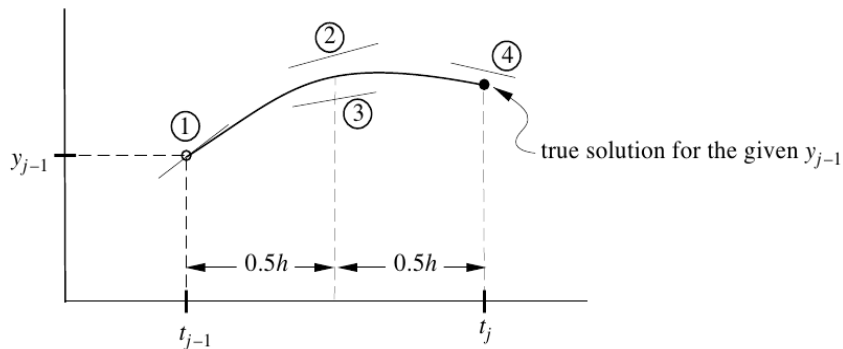
$$k_3 = f\left(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2}k_2\right) \quad (27)$$

$$k_4 = f(t_j + h, y_j + hk_3) \quad (28)$$

Para obtener finalmente

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \text{Método RK4} \quad \text{EDG} \approx O(h^4) \quad (29)$$

Runge-Kutta orden 4



Yendo más allá - Runge-Kutta-Fehlberg ó RK45

El Método RK45⁹ utiliza un RK4 y un RK5 al mismo tiempo para dar solución a un PVI.

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

$$k_2 = f\left(t_j + \frac{1}{4}h, y_j + \frac{1}{4}hk_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_j + \frac{3}{8}h, y_j + \left(\frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right)h\right)$$

$$k_4 = f\left(t_j + \frac{12}{13}h, y_j + \left(\frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right)h\right)$$

$$k_5 = f\left(t_j + h, y_j + \left(\frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right)h\right)$$

$$k_6 = f\left(t_j + \frac{1}{2}h, y_j + \left(-\frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right)h\right)$$

⁹Léase Runge Kutta 4,5

Yendo más allá - Runge-Kutta-Fehlberg ó RK45

Como resultado se tienen dos estimativos de la función dados por

$$y_{j+1} = y_j + \left(\frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4104}k_4 - \frac{1}{5}k_5 \right) h$$

$$z_{j+1} = z_j + \left(\frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6 \right) h$$

z corresponde al mejor estimativo para el valor de la función.

Se utiliza un proceso adaptativo para encontrar un mejor valor para h dado un valor de control ϵ

$$h_{nuevo} = \left(\frac{\epsilon h_{anterior}}{|z_{j+1} - y_{j+1}|} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (30)$$

$$\text{El EDG} \approx O(h^5)$$

Suponga que requiere la solución de un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dt} &= f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ \frac{dy_n}{dt} &= f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n)\end{aligned}$$

Sistemas de EDOs de primer orden acopladas

Para solucionar el sistema se requiere iterar las ecuaciones al mismo tiempo, dependiendo del método a utilizar es preciso definir las constantes k_p^j donde $p = 1, 2, \dots, m$ y $j = 1, 2, \dots, n$ donde m es el orden del método y n el número de funciones y_j .

Para un RK45

$$\begin{aligned}y_1 &\rightarrow \{k_1^1, k_2^1, k_3^1, k_4^1, k_5^1, k_6^1\}; & \{y_j^1, y_{j+1}^1, z_j^1, z_{j+1}^1\} \\y_2 &\rightarrow \{k_1^2, k_2^2, k_3^2, k_4^2, k_5^2, k_6^2\}; & \{y_j^2, y_{j+1}^2, z_j^2, z_{j+1}^2\} \\y_3 &\rightarrow \{k_1^3, k_2^3, k_3^3, k_4^3, k_5^3, k_6^3\}; & \{y_j^3, y_{j+1}^3, z_j^3, z_{j+1}^3\}\end{aligned}$$

Para un total de 10 valores a computar¹⁰

¹⁰sólo para el método, por otro lado se tienen las C.I. y demás parámetros de la ecuación

Ejemplos Aplicación - Ataque Zombie

Suponga que usted trabaja para el gobierno y está modelando un escenario de riesgo biológico donde el “Virus-T”¹¹ infecta a la población según el modelo¹²

$$\frac{dZ}{dt} = \alpha_1 SZ - \beta_1 (I + S) - \delta_1 Z \quad (31)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\alpha_1 SZ + \beta_2 S - \delta_2 S \quad (32)$$

$$\frac{dI}{dt} = -\alpha_2 IZ + \beta_3 (I + S) - \delta_3 I \quad (33)$$

$$(34)$$

Z - Zombie , S - Sano, I - Inmune

¹¹Nombre Tomado del video juego *Resident Evil*

¹²Este es un sistema de EDOs tipo *Lanchester*, las empleo para modelar las batallas entre fuerzas de ataque antagonistas

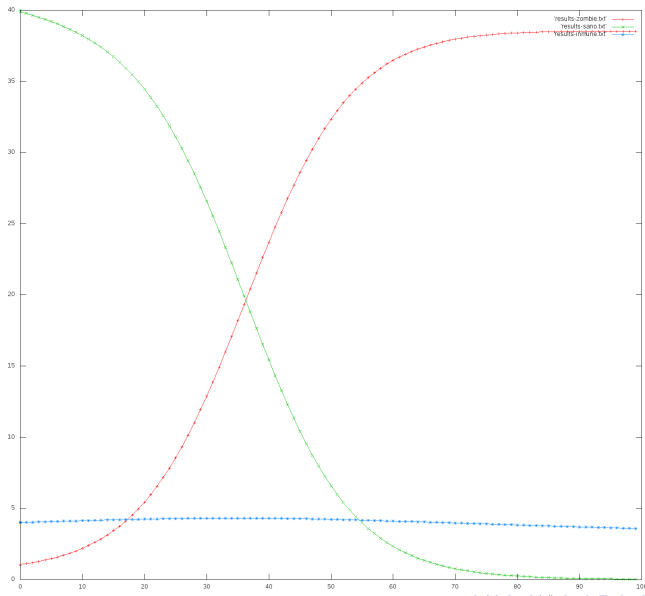
Aplicación - Ataque Zombie - Primer Scenario - Caos Colectivo(C.C.)

Ajustando parámetros para un escenario desfavorable¹³

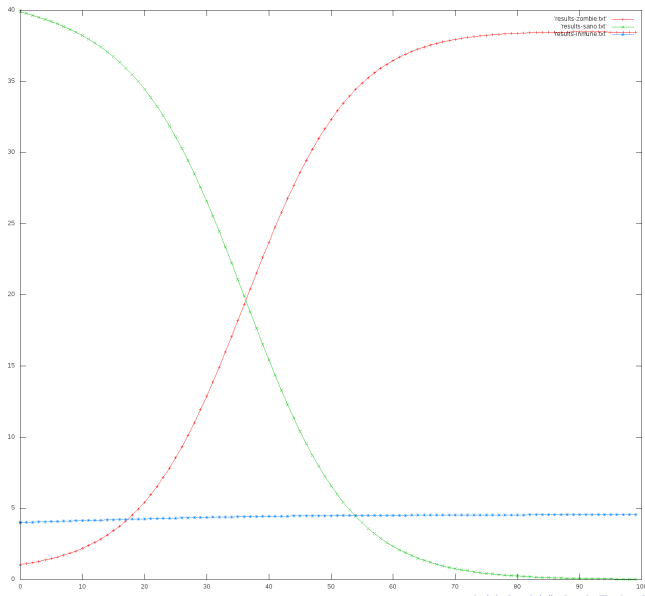
| | | | |
|------------|---|------|---|
| α_1 | = | 3 | Infección por mordida - Muchos infectados |
| α_2 | = | 0,1 | Muerte en Contienda (inmunes) - Protegiendo inmunes |
| β_1 | = | 1,5 | Muerte en Contienda (zombies) - Atacando zombies |
| β_2 | = | 0,3 | Nacimientos (sanos) |
| β_3 | = | 0,3 | Nacimientos (inmunes) |
| δ_1 | = | 0,02 | Muerte Natural (zombies) |
| δ_2 | = | 0,02 | Muerte Natural (sanos) |
| δ_3 | = | 0,02 | Muerte Natural (inmunes) |

¹³Los parámetros son de referencia. En un modelo real es necesario interpretar muy bien los parámetros a utilizar

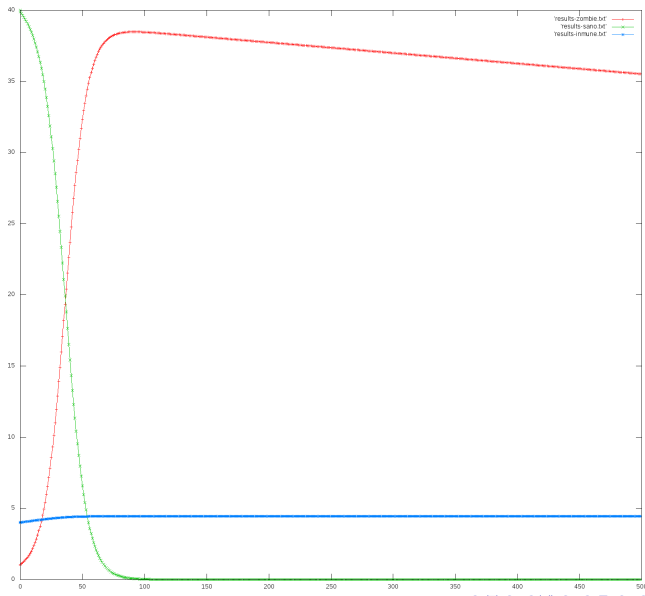
Ataque Zombie - CC + Sin proteger inmunes



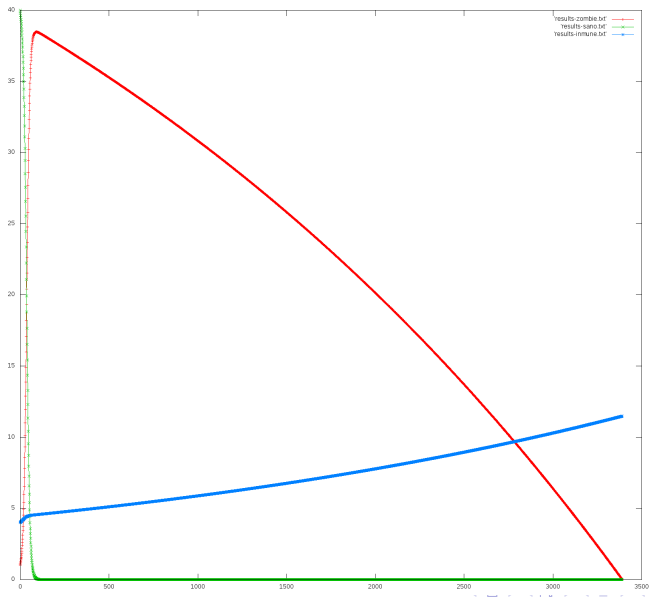
Ataque Zombie - CC + Protegiendo inmunes



Ataque Zombie - CC + Protegiendo inmunes



Ataque Zombie - Atacando + Protegiendo inmunes



Ajustando parámetros

$\alpha_1 = 1,5$ Infección por mordida - Protegiendose de las mordidas

$\alpha_2 = 0$ Muerte en Contienda (inmunes)-Protegiendo inmunes

$\beta_1 = 2$ Muerte en Contienda (zombies)- Más fuerza de ataque

$\beta_2 = 0,3$ Nacimientos (sanos)

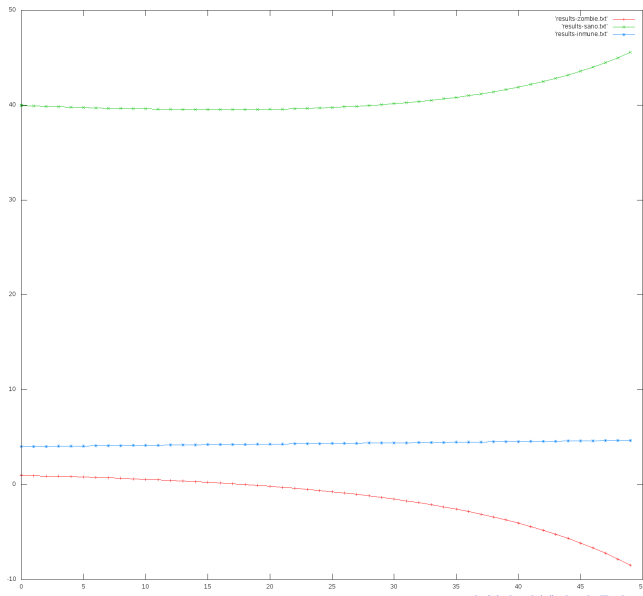
$\beta_3 = 0,3$ Nacimientos (inmunes)

$\delta_1 = 0,02$ Muerte Natural (zombies)

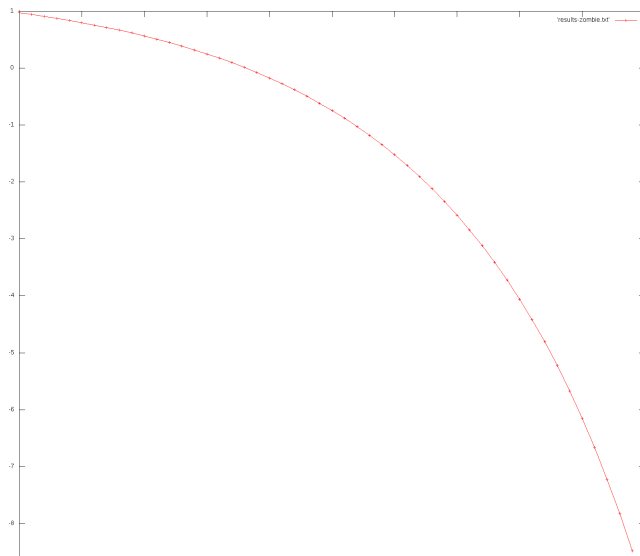
$\delta_2 = 0,02$ Muerte Natural (sanos)

$\delta_3 = 0,02$ Muerte Natural (inmunes)

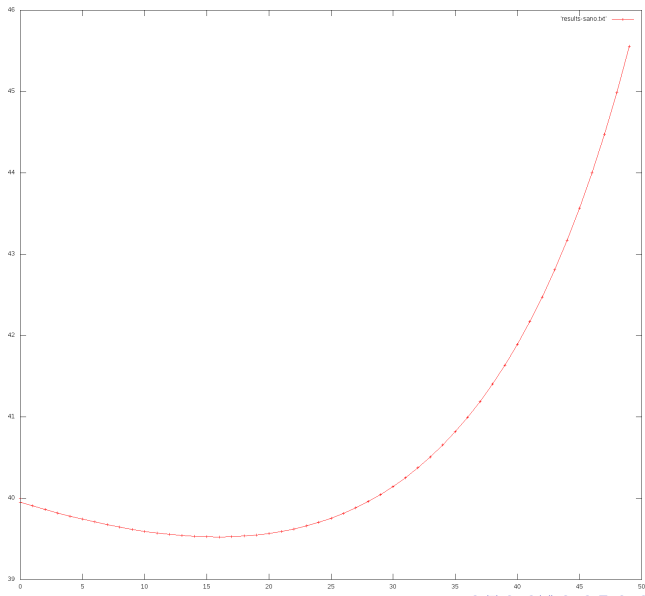
Ataque Zombie - Segundo Scenario



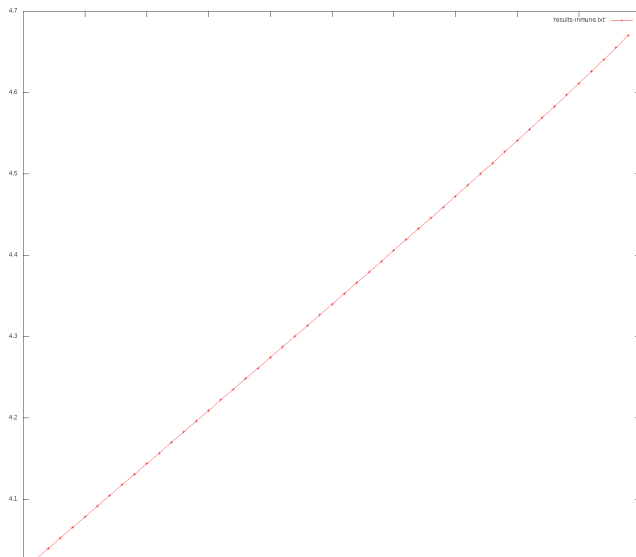
Ataque Zombie - Segundo Scenario - Población Zombie



Ataque Zombie - Segundo Scenario - Población Sanos



Ataque Zombie - Segundo Scenario - Población Inmune



Ataque Zombie - Segundo Scenario

Este modelo sencillo nos permite concluir que en una situación de apocalipsis zombie es posible que la humanidad sobreviva si organiza para tratar de acabar con la mayor cantidad de zombies que pueda a la vez que cada individuo sano se protege de ser infectado reduciendo así la tasa de crecimiento poblacional de los zombies.

Bien, y que hay de EDOs de orden superior?

Para resolver un sistema de la forma

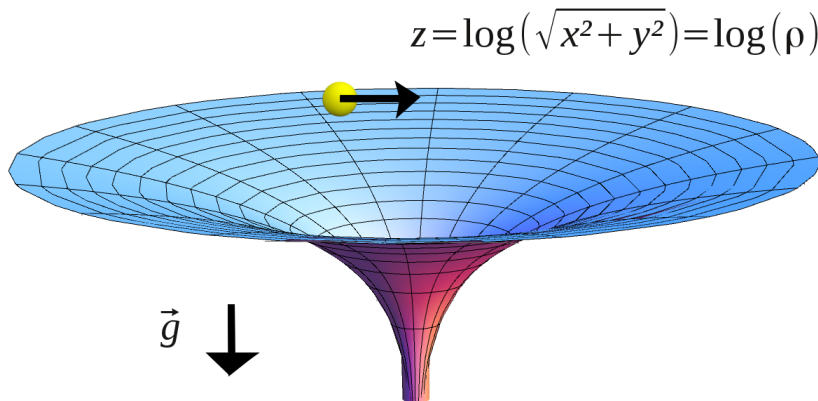
$$\frac{d^n u}{dt^n} = f(t, u) \quad (35)$$

es preciso resolver un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas

$$\begin{aligned} y_1 &= u & \frac{dy_1}{dt} &= y_2 \\ y_2 &= \frac{du}{dt} & \frac{dy_2}{dt} &= y_3 \\ &\vdots & & \\ y_n &= \frac{d^{n-1}u}{dt^{n-1}} & \frac{dy_n}{dt} &= f(t, u) \end{aligned}$$

Aplicación - Mecánica clásica

Suponga que quiere hayar la trayectoria de una bola que se mueve sobre una superficie como la del dibujo

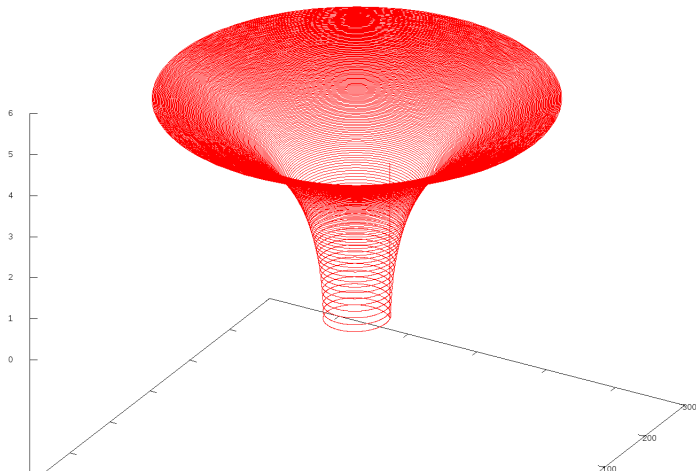


Luego de usar un poco la cabeza, se llega al siguiente sistema de ecuaciones para el caso en que no se disipa energía.

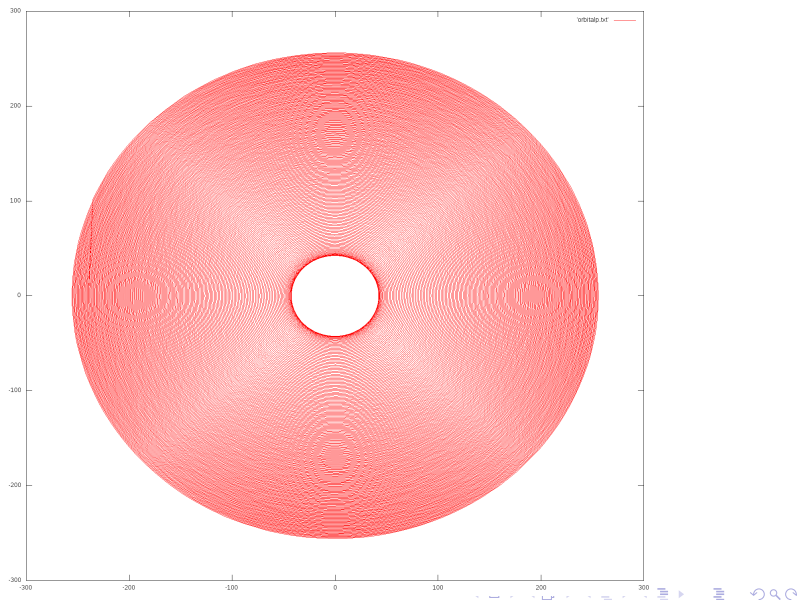
$$\begin{aligned}\frac{dz}{dt} &= \frac{p_z}{m} \\ \frac{d\theta}{dt} &= \frac{p_\theta}{m\rho^2} = \frac{l}{m\rho^2} \\ \frac{d^2\rho}{dt^2} &= \frac{l^2}{m^2\rho^4} + \frac{g}{\rho}\end{aligned}$$

Para este sistema se integran 4 EDO de primer orden.

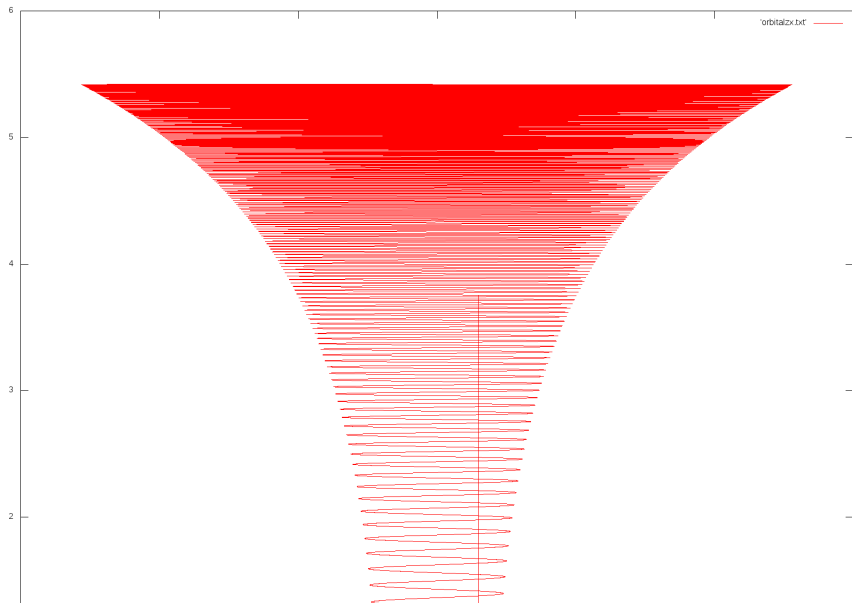
'orbital.txt' —



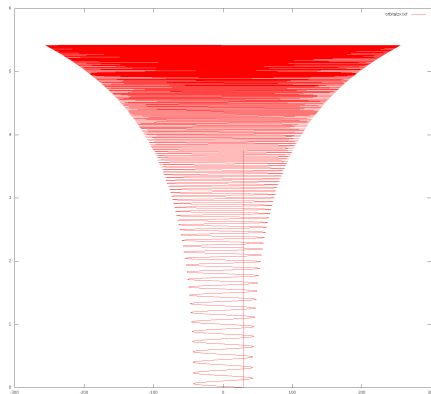
Aplicación - Mecánica clásica - proyección XY



Aplicación - Mecánica clásica - proyección ZX



Aplicación - Mecánica clásica - Curiosidad



La línea vertical que se observa en la gráfica se debe a que la energía se conserva y la partícula regresa a la altura inicial de manera abrupta. Esto puede observarse si se integra el problema por un tiempo suficientemente largo.

- Existen muchos otros métodos para resolver EDO, los principales y más comunes se han enunciado aquí
- El método RK45 es el de uso más común en los programas de computación, por ejemplo el paquete ode45 en Matlab
- Existen también librerías incluyen en sus paquetes métodos de solución de EDOs como por ejemplo la librería *GSL*¹⁴
- **Recomendación Personal:** si desea construir el código usted mismo sea muy cuidadoso con la sintaxis!. Use software de código abierto¹⁵ para que su trabajo sea legal¹⁶

¹⁴GNU Scientific Library

¹⁵Scilab y Octave alternativa a Matlab, Sage y Maxima alternativa a Mathematica, además lenguajes como Python, C y Fortran

¹⁶Tener claro licencias GPL, Copyleft y Creative Commons

Muchas Gracias

Estas diapositivas, al igual que los códigos para generar las imágenes y simulaciones estarán disponibles en la URL del seminario.

Igualmente estarán alojadas en
<http://github.com/Daniel-M/ODE-Seminar>

Esta corresponde a la versión 2.0 de las diapositivas.



Licencia de Creative Commons

Integracion-Numerica-ODE.pdf by Daniel Mejía R is licensed under a Creative Commons

Atribución-NoComercial-CompartirDerivadasIgual 3.0 Unported
License.

Permissions beyond the scope of this license may be available by
mailing danielmejia55@gmail.com. more info about
CreativeCommons licences on <http://creativecommons.org/>

Muchas Gracias