

Resolución numérica de ecuaciones diferenciales

En muchas aplicaciones aparecen modelos descritos por ecuaciones diferenciales ordinarias que, debido a su complejidad, es necesario recurrir a métodos numéricos para resolverlas.

Problema 1

Consideremos el *problema con valores iniciales de primer orden*,

$$(PVI) \begin{cases} y' = f(x, y), & a \leq x \leq b, \\ y(x_0) = y_0, \end{cases}$$

donde $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función continua. Bajo ciertas hipótesis sobre la función f es posible garantizar la existencia de una única solución del problema PVI.

Teoremas de existencia y unicidad

Teorema 1

(Existencia de solución)

Sea $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua en

$D = \{(x, y) : |x - x_0| \leq \alpha, |y - y_0| \leq \beta\}$, entonces el problema PVI tiene una solución $y(x)$ para todo x tal que $|x - x_0| \leq \min\left(\alpha, \frac{\beta}{M}\right)$ con

$M = \max |f(x, y)|$ para todo $(x, y) \in D$.

Teorema 2

(Unicidad)

Si f y $\frac{\partial f}{\partial y}$ son continuas en D , entonces el PVI tiene una única solución en el intervalo $|x - x_0| \leq \min\left(\alpha, \frac{\beta}{M}\right)$.

Método de Taylor

Un método numérico que resuelve un *PVI* genera una sucesión de puntos $\{(x_i, \tilde{y}(x_i))\}$, donde $\tilde{y}(x_i)$ es un valor aproximado de la solución exacta de *PVI* en x_i .

Método de Taylor

Sea $f(x, y)$ una función con derivadas parciales de orden $m + 1$ continuas en $[a, b]$. Se considera una partición n de la variable independiente igualmente espaciada por h , tal que $x_i = a + hi, i = 1, 2, \dots, n - 1$, entonces la función $y(x_{i+1})$ puede ser aproximada por la serie de Taylor alrededor de x_i ,

$$y_{i+1} = y_i + hy'_i + \frac{h^2}{2}y''_i + \frac{h^3}{3!}y'''_i + \dots + \frac{h^m}{m!}y^{(m)}_i + E_m^T, \quad (1)$$

donde $E_m^T = \frac{h^{m+1}}{(m+1)!}y^{m+1}(c_i)$, $x_i < c_i < x_{i+1}$ es el error de truncado local.

Método de Euler

Método de Euler

Si $n = 1$, entonces

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + E_1^T, \quad (2)$$

donde $E_1^T = \frac{h^2}{2} f'(c_i, y(c_i))$, $x_i < c_i < x_{i+1}$.

Ejemplo 1

Se aproxima la solución al problema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden a valores iniciales:

$$(PVI) \begin{cases} y' = y - t^2 + 1, & 0 \leq t \leq 1, \\ y(0) = 0.5, \end{cases}$$

con el método de Euler y un espaciado $h = 0.2$.

Método de Euler

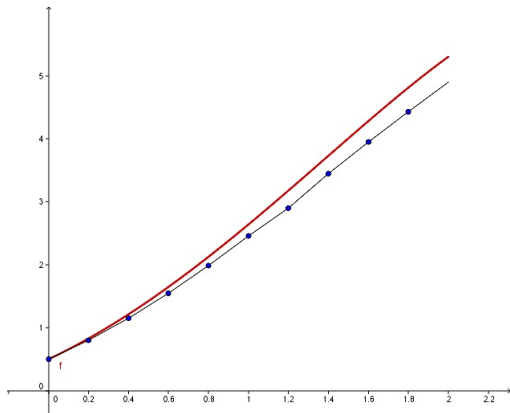
La solución exacta es $y(t) = (t + 1)^2 - 0,5e^t$. En la tabla se resumen los resultados obtenidos con Euler .

t_i	$f(x_{i-1}, y_{i-1})$	\tilde{y}_i	$ y_i - \tilde{y}_i $
0.2000	1.5000	0.8000	0.0293
0.4000	1.7600	1.1520	0.0621
0.6000	1.9920	1.5504	0.0985
0.8000	2.1904	1.9885	0.1387
1.0000	2.3485	2.4582	0.1827
1.2000	2.4582	2.9498	0.2301
1.4000	2.5098	3.4518	0.2806
1.6000	2.4918	3.9501	0.3334
1.8000	2.3901	4.4282	0.3870
2.0000	2.1882	4.8658	0.4397

El error local de truncado es $\mathcal{O}(h^2)$ mientras que el error global de truncado es la suma de los errores locales y es $\mathcal{O}(h)$.

Método de Euler

Gráficamente,



Métodos de Runge Kutta (RK)

¿Se podrá evitar el cálculo de las derivadas sucesivas en los métodos de Taylor preservando la exactitud en la solución aproximada?

Familia de Runge Kutta

Combinar en forma inteligente los valores de $f(x, y(x))$ para evitar el cálculo de las derivadas de orden superior. Se propone una aproximación para evaluar y_{i+1} a partir de y_i en función de parámetros indeterminados, haciendo que la aproximación sea del mayor orden posible, usando evaluaciones de funciones $f(x, y)$ en el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$.

La forma general de la familia de métodos de Runge-Kutta es,

$$y_{i+1} = y_i + h \underbrace{\sum_{j=1}^s w_j k_j}_{\text{pendiente ponderada}}, \quad (3)$$

Métodos de Runge Kutta (RK)

donde w_j son coeficientes de peso a determinar, s es el número de evaluaciones de $f(x, y)$ y k_j satisfacen la siguientes fórmulas recursivas,

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i), \\ k_j &= f\left(x_i + c_j h, y_i + h \sum_{r=1}^{j-1} a_{jr} k_r\right), \quad j = 2, \dots, s, \end{aligned} \quad (4)$$

donde los valores de a_{jr} , c_j , $j = 2, \dots, s$, $r = 1, \dots, j-1$, deben determinarse.

Para caracterizar un método de Runge-Kutta en especial, se comparan la expresión (1) con (3) y (4) y se obtiene un sistema de ecuaciones no lineales cuyas incógnitas son los parámetros w , a , c .

Si $s = 1$ y $w_1 = 1$ se tiene el [método de Euler](#).

Métodos de Runge Kutta de orden 2

La familia de los métodos de Runge-Kutta de segundo orden ($s = 2$) se obtiene resolviendo el sistema de ecuaciones no lineales,

$$\begin{cases} w_1 + w_2 = 1, \\ w_2 c_2 = \frac{1}{2}, \\ w_2 a_{21} = \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (5)$$

La solución del sistema (5) depende obviamente de la elección de w_2 .

- Si $w_2 = \frac{1}{2}$ entonces $w_1 = \frac{1}{2}$, $c_2 = a_{21} = 1$, se tiene el **método Euler mejorado**;
- si $w_2 = 1$ entonces $w_1 = 0$, $c_2 = a_{21} = \frac{1}{2}$, se tiene el **método de Euler modificado o del punto medio**;
- si $w_2 = \frac{3}{4}$ resulta $w_1 = \frac{1}{4}$, $c_2 = a_{21} = \frac{2}{3}$ se tiene **el método de Huen**.

Métodos de Runge Kutta de orden 2

Euler Mejorado	$y_{i+1} = y_i + h \frac{k_1 + k_2}{2},$ $k_1 = f(x_i, y_i),$ $k_2 = f(x_i + h, \underbrace{y_i + hk_1}_{\text{Euler}}).$
Euler Punto Medio	$y_{i+1} = y_i + hk_2,$ $k_1 = f(x_i, y_i),$ $k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1).$
Huen	$y_{i+1} = y_i + h \frac{k_1 + 3k_2}{4},$ $k_1 = f(x_i, y_i),$ $k_2 = f(x_i + \frac{2}{3}h, y_i + \frac{2}{3}hk_1).$

Métodos de Runge Kutta de orden 2

Gráficamente,

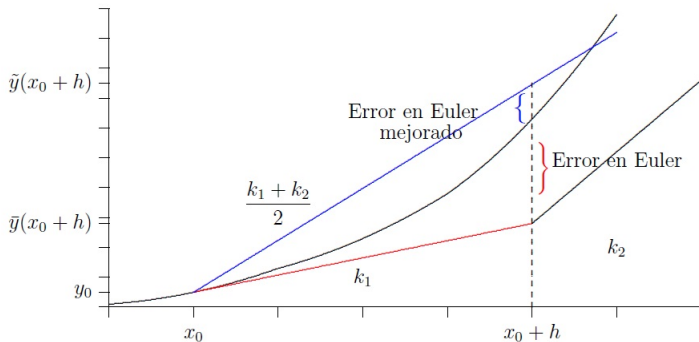


Figura : Método de Euler mejorado (Runge-Kutta de 2º orden)

Métodos de Runge Kutta de orden superior

Análogamente se obtienen los métodos de Runge-Kutta de orden superior. Entre estos definitivamente el más popular es el **método de Runge-Kutta de orden cuatro** que tiene la siguiente expresión:

$$y_{i+1} = y_i + h \underbrace{\frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}}_{\text{pendiente ponderada}},$$

donde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i), \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{h}{2}k_1\right), \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{h}{2}k_2\right), \\ k_4 &= f(x_i + h, y_i + hk_3) \end{aligned}.$$

Métodos de Runge Kutta de orden superior

Gráficamente,

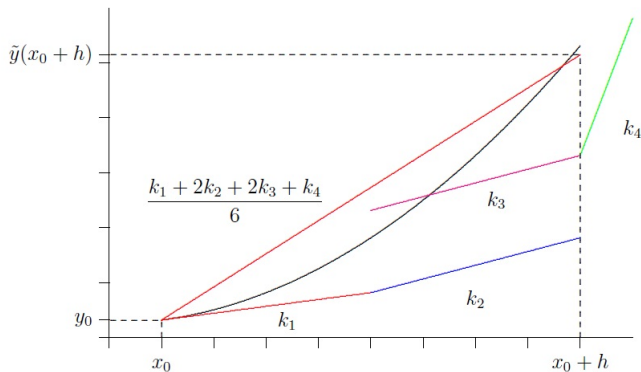


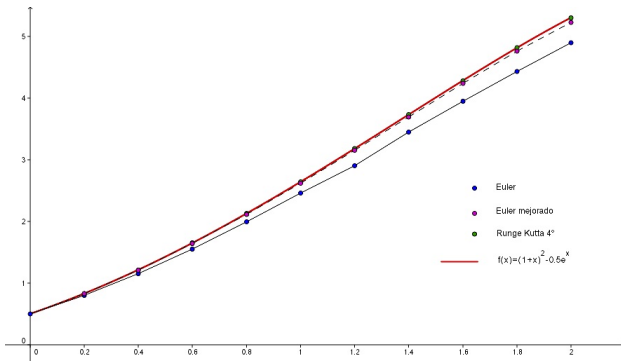
Figura : Método de Runge-Kutta de 4º orden.

Ejemplos

... continua el ejemplo

$$(PVI) \begin{cases} y' = y - t^2 + 1, & 0 \leq t \leq 1, \\ y(0) = 0.5, \end{cases}$$

con los métodos de RK y un espaciado $h = 0.2$.



Errores y costo computacional

Mejor error local	Evaluaciones de $f(x, y)$
$\mathcal{O}(h^2)$	2
$\mathcal{O}(h^3)$	3
$\mathcal{O}(h^4)$	4
$\mathcal{O}(h^{n-1})$	$5 \leq n \leq 7$
$\mathcal{O}(h^{n-2})$	$8 \leq n \leq 9$
$\mathcal{O}(h^{n-3})$	$10 \leq n$

Observaciones:

- Para cada orden hay una familia de métodos de RK.
- El número de evaluaciones de funciones aumenta más que el orden del método.
- Los métodos de Runge-Kutta más usados son los de orden no mayor que 5.
- La elección del tamaño del paso h es muy importante.

Elección del paso

Si se trabaja con un paso suficientemente pequeño se comete menos error de truncamiento pero peligrosamente pueden aumentar los errores de redondeo. Por ello se debe elegir un paso que permita mantener el error total cerca de su valor mínimo E_{min} .

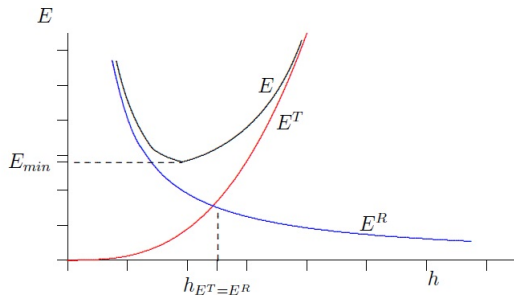


Figura : Distintos tipos de errores.

Ejemplos

... continua el ejemplo

$$(\text{PVI}) \begin{cases} y' = y - t^2 + 1, & 0 \leq t \leq 1, \\ y(0) = 0.5, \end{cases}$$

usando Euler con $h = 0.025$, RK-2 con $h = 0.05$ y RK-4 con $h = 0.1$.

Como el método RK-4 requiere cuatro evaluaciones por paso h , deberá dar respuestas más exactas que Euler con paso $\frac{h}{4}$ o que el RK-2 con paso $\frac{h}{2}$ para considerarlo mejor

t_i	y_i	Euler ($h = 0.025$)	RK-2 ($h = 0.05$)	RK-4 ($h = 0.1$)
0.0	0.50000	0.50000	0.50000	0.50000
0.1	0.65741	0.65550	0.65731	0.65741
0.2	0.82930	0.82534	0.82908	0.82930
0.3	1.01507	1.00893	1.01473	1.01507
0.4	1.21409	1.20563	1.21361	1.21409
0.5	1.42564	1.41473	1.42501	1.42564

Métodos de Runge Kutta de paso variable

Métodos de Runge Kutta Fehlberg

Combinar un método de RK de 4^o orden con 5 evaluaciones de funciones y un RK de 5^o orden con 6 evaluaciones utilizando los mismos puntos de evaluación, ajustando los parámetros de las expresiones:

$$y(x+h) = y(x) + \sum_{i=1}^6 a_i F_i, \quad (6)$$

$$\bar{y}(x+h) = y(x) + \sum_{i=1}^6 b_i F_i, \quad (7)$$

$$F_i = hf(x + c_i h, y + \sum_{j=1}^{i-1} d_{ij} F_j), \quad i = 1, 2, \dots, 6.$$

Usar estas expresiones para seleccionar el paso manteniendo acotado los errores de truncamiento.

Métodos de Runge Kutta de paso variable

La diferencia entre las fórmulas de 5^o orden y de 4^o orden se interpreta como una estimación del error de truncamiento asociado a la fórmula de menor orden y se usa para escoger el tamaño del paso,

$$E = y(x + h) - \bar{y}(x + h) = \sum_{i=1}^6 (a_i - b_i) F_i. \quad (8)$$

Un criterio para modificar el paso h es:

- Si con un paso h el error de truncamiento estimado con (8) es mayor que cierta tolerancia específica, entonces el paso se reduce, usualmente a la mitad,
- caso contrario el paso se aumenta, generalmente al doble.

Métodos de Runge Kutta de paso variable

Se llaman **métodos de Runge-Kutta adaptativos** a aquellos compuestos por dos fórmulas de RK de órdenes p y q (usualmente $q = p + 1$) que utilizan las mismas evaluaciones de funciones para resolver en forma eficiente el PVI.

En Matlab se dispone de diferentes funciones para resolver el *PVI*, entre ellas los «*solvers*» ode23 y ode45 que corresponden a los métodos adaptativos de RK 2^o y 3^o propuesto por Bogacki y Shampine y el método de RK 4^o y 5^o de Prince y Dormand.

Se invocan:

$$[T,Y] = \text{solver}(\text{odefun},\text{tspan},y_0)$$

siendo *odefun* la función del lado derecho del *PVI*, *tspan* en vector de valores intermedios de la variable independiente entre un valor inicial x_0 y un valor final x_f e y_0 es el valor inicial de y .