Integración Numérica de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Daniel Mejía R[1]

Instituto de Física
Universidad de Antioquia

28 de Septiembre, 2011

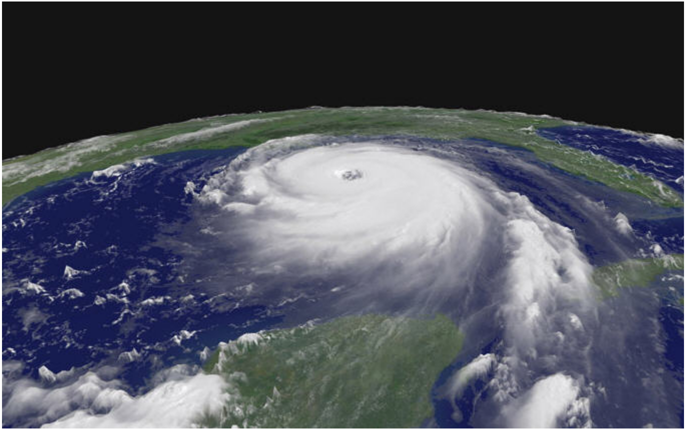
[1]danielmejia55@gmail.com

Contenido

1. Motivación
2. Problemas de Valor Inicial
   - Método 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 Orden 4
   - Yendo Más Allá - Runge-Kutta-Fehlberg
4. Aplicación Práctica
   - Sistemas de EDOs de Primer Orden Acopladas
   - EDO de Orden Superior

Motivación

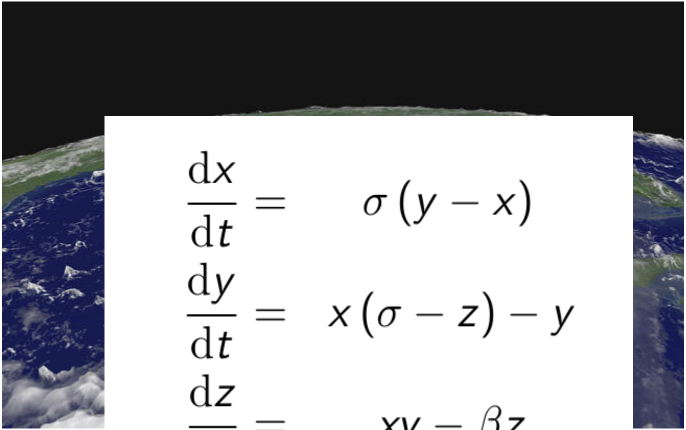
Modelamiento de Sistemas $\Longrightarrow$ Ecuaciones Diferenciales [1]



[1] E.D. Para Abreviar

Motivación

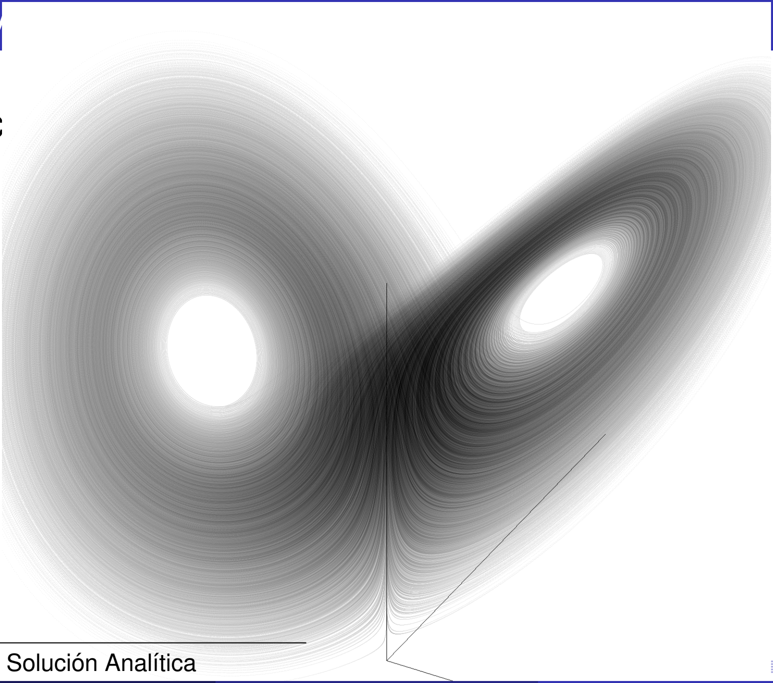
Complejidad inherente a los Modelos $\Longrightarrow$ E.D. Complicadas[2]



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

[2] Sin Solución Analítica

C

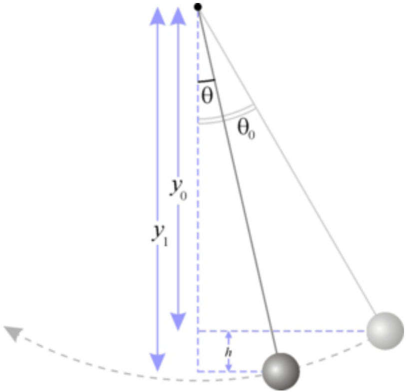


[2] Sin Solución Analítica

Motivación

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

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}t^2} - g\sin\theta = 0 \tag{1}$$



PVI - EDO Primer Orden

Se desea dar solución a una ecuación diferencial de primer orden

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = f(t, y) \qquad y(0) = y_0 \tag{2}$$

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

$$t_j = t_o + jh \tag{3}$$

h es un incremento de la variable dependiente

PVI - EDO Primer Orden

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

$$y(t) \approx y(t_0) + (t - t_0)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}\,|_{t=t_0} \tag{4}$$

Tomando $h = t - t_0$, puedo construir un conjunto de puntos

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \quad y_0 + hf(t_0, y_0) && (5)\\
y_2 &= \quad y_1 + hf(t_1, y_1) && (6)\\
&\vdots && (7)\\
y_{j+1} &= \quad y_j + hf(t_j, y_j) && (8)\\
& && (9)
\end{aligned}
$$

Método de Euler

El método de Euler se utiliza para resolver PVI

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = f\,(t, y) \qquad y(0) = y_0 \tag{10}$$

Donde la solución se obtiene iterando la ecuación

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

El error con el *Método de Euler* se reduce linealmente con h.Lo resumimos diciendo que el Error de Discretización Global[3]=$O(h)$

[3] EDG

Método de Euler - Ejemplo de Aplicación

Suponga que quiere solucionar

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} - g\sin(\theta) = 0; \qquad \theta(0) = g \tag{12}$$

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

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

$$t_j = t_0 + jh \tag{14}$$

la solución analítica de este problema se obtiene con cierta pericia

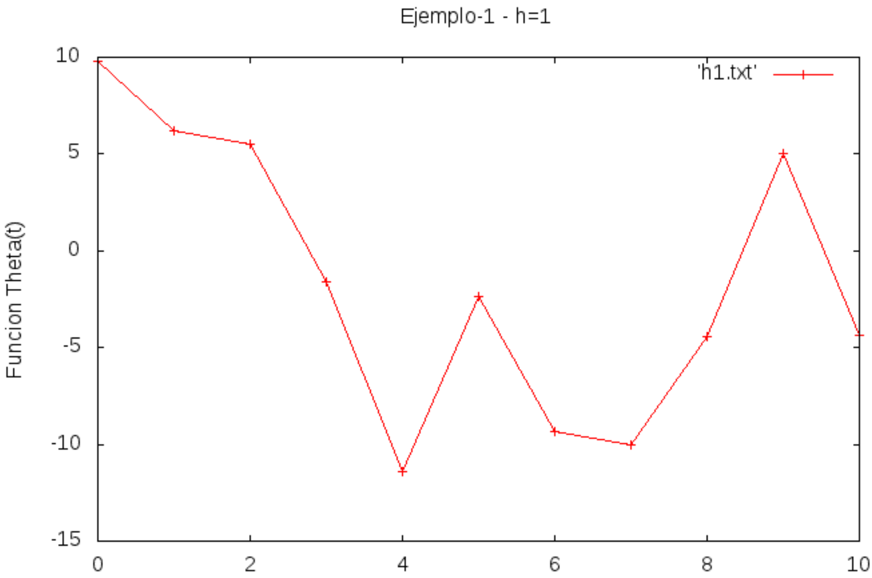
$$\theta(t) = \arccos\left[\frac{1+e^{2gt}}{1-e^{2gt}}\right] \tag{15}$$

Comparación de resultados para diferentes h

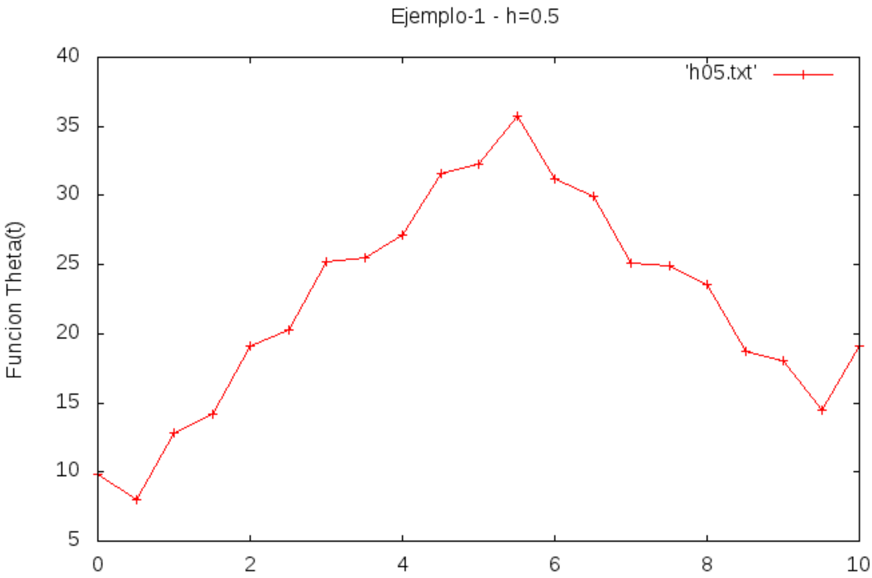
t	θ **h=1**	θ **h**=0.5	θ **h**=0.01	θ **h**=0.0001
0	9.800	9.800	9.800	9.800
1	6.209	1.285	9.425	9.425
2	5.477	1.910	9.425	9.425
3	-1.593	2.519	9.425	9.425
4	-1.139	2.716	9.425	9.425
5	-2.344	3.223	9.425	9.425
6	-9.356	3.117	9.425	9.425
7	-1.003	2.509	9.425	9.425
8	-4.444	2.361	9.425	9.425
9	5.005	1.804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

[4] El código fuente se proporciona al final

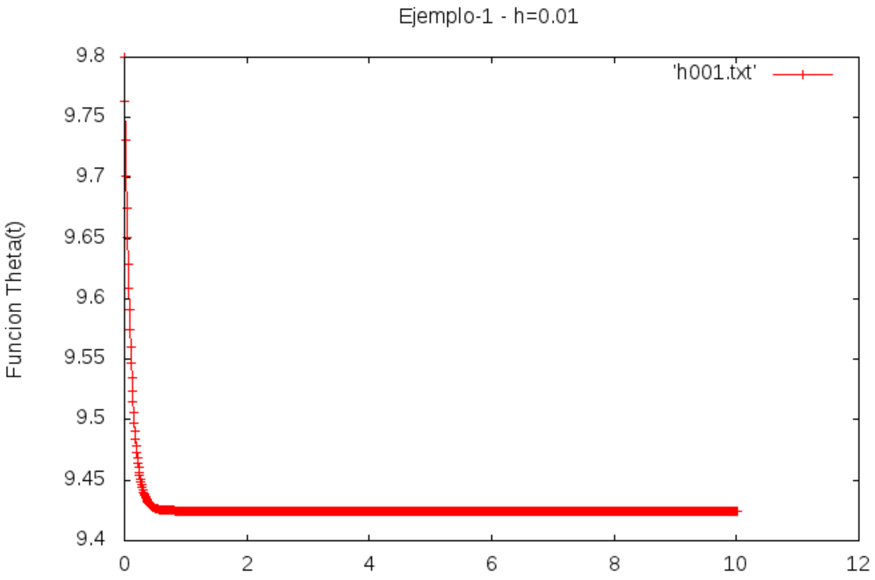
Método de Euler - Ejemplo de Aplicación



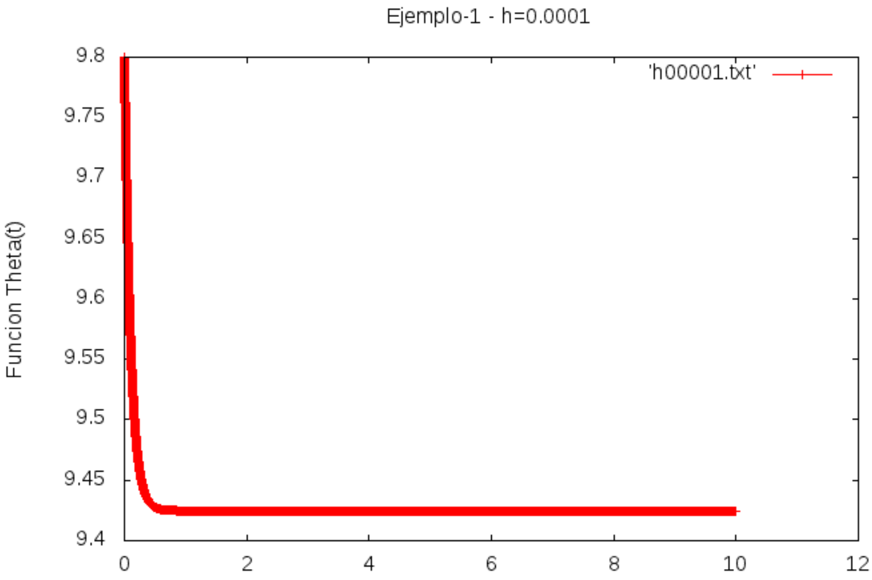
Método de Euler - Ejemplo de Aplicación



Método de Euler - Ejemplo de Aplicación



Método de Euler - Ejemplo de Aplicación



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

$$k_1 = f(t_j, y_j) \tag{16}$$

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

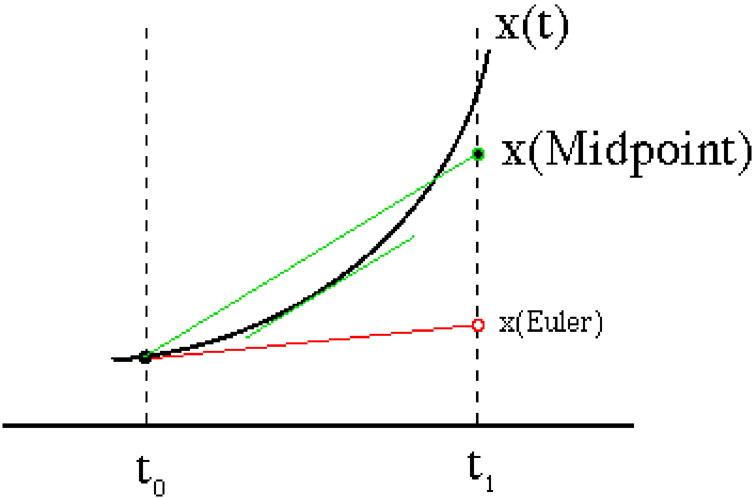
$$k_2 = f(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2} k_1) \tag{18}$$

Finalmente

$$\boxed{y_{j+1} = y_j + hk_2 \qquad \text{EDG} \quad O(h^2)} \tag{19}$$

Se calculan dos constantes intermedias entre cada iteración

Comparación Métodos de Euler y Punto Medio



Método de Heun

En el punto inicial se calcula

$$k_1 = f(t_j, y_j) \tag{20}$$

Luego se calcula un valor tentativo de y

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

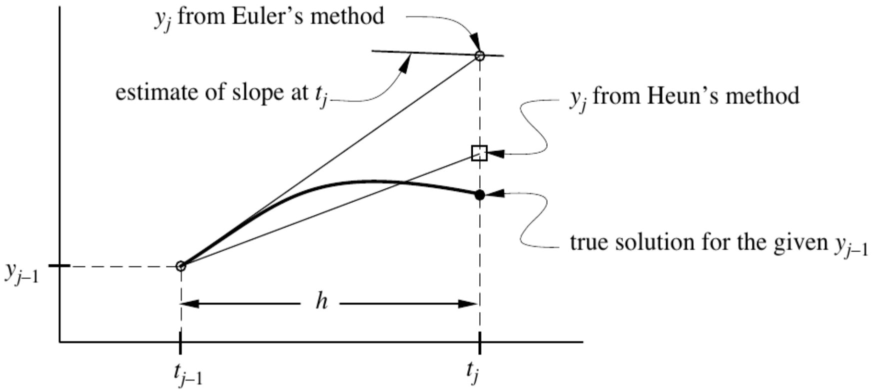
Se calcula la pendiente una vez más

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

El valor de y es un promedio, de modo que

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

Comparación Métodos de Euler y Heun



Resumen Comparativo

- 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 [5]

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

$$\boxed{y_{j+1} = y_j + \sum_{p=1}^{N} \omega_p k_p \qquad \text{RK orden N}} \tag{24}$$

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

[5] RK para abreviar

El Clásico Runge Kutta Orden 4

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

$$k_1 = f(t_j, y_j) \tag{25}$$

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

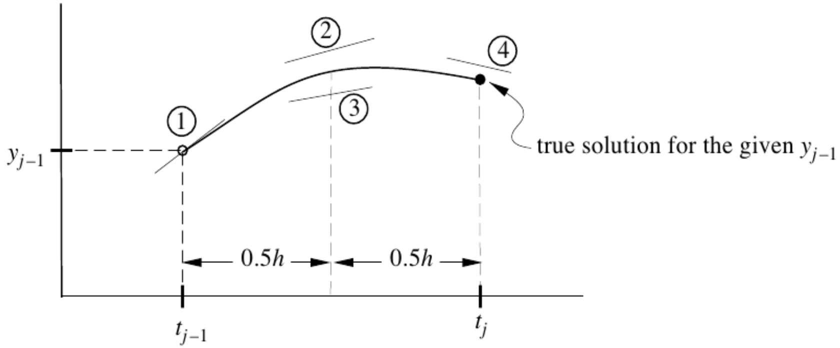
$$k_3 = f(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2}k_2) \tag{27}$$

$$k_4 = f(t_j + h, y_j + hk_3) \tag{28}$$

Para obtener finalmente

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

Runge Kutta Orden 4



El Método RK45[6] utiliza un RK4 y un RK5 al mismo tiempo para dar solución a un PVI.

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f\left(t_j, y_j\right) \\
k_2 &= f\left(t_j + \frac{1}{4}h, y_j + \frac{1}{4}hk_1\right) \\
k_3 &= f\left(t_j + \frac{3}{8}h, y_j + \left(\frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right)h\right) \\
k_4 &= f\left(t_j + \frac{12}{13}h, y_j + \left(\frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right)h\right) \\
k_5 &= f\left(t_j + h, y_j + \left(\frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right)h\right) \\
k_6 &= f\left(t_j + \frac{1}{2}h, y_j + \left(-\frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right)h\right)
\end{aligned}
$$

[6] Léase Runge Kutta 4,5

Yendo Más Allá - Runge-Kutta-Fehlberg ó RK45

Como resultado se tienen dos estimativos de la función dados por

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + \left(\frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4104}k_4 - \frac{1}{5}k_5\right)h \\ z_{j+1} &= z_j + \left(\frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6\right)h \end{aligned}$$

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

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

El EDG$\approx O(h^5)$

Sistemas de EDOs de Primer Orden Acopladas

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

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} &= f_1\left(t, y_1, y_2, \ldots, y_n\right) \\
\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} &= f_2\left(t, y_1, y_2, \ldots, y_n\right) \\
\vdots &= \vdots \\
\frac{\mathrm{d}y_n}{\mathrm{d}t} &= f_n\left(t, y_1, y_2, \ldots, y_n\right)
\end{aligned}
$$

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 $p = 1, 2, \ldots, m$ y $j = 1, 2, \ldots, n$ donde m es el orden del método y n el número de funciones y_j.
Para un RK45

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

Para un total de 10 valores a computar[7]

[7] solo para el método, aparte vienen las C.I. y parámetros

Suponga que usted trabaja para el gobierno y está modelando un escenario de riesgo biológico donde el "Virus-T"[8] Infecta a la Población

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}t} = \alpha_1 SZ - \beta_1 (I + S) - \delta_1 Z \tag{31}$$

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = -\alpha_1 SZ + \beta_2 S - \delta_2 S \tag{32}$$

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = -\alpha_2 IZ + \beta_3 (I + S) - \delta_3 I \tag{33}$$

$$\tag{34}$$

Z - Zombie , S - Sano, I - Inmune

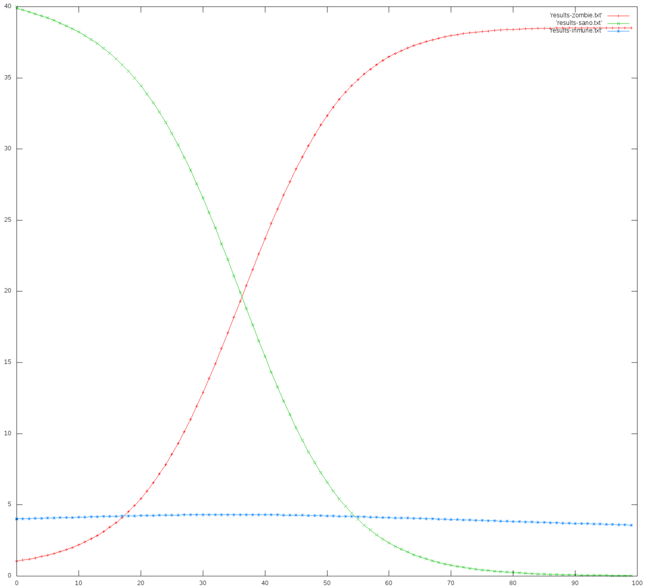
[8] Nombre Tomado de Resident Evil

Aplicación - Ataque Zombie - Primer Scenario - Caos Colectivo

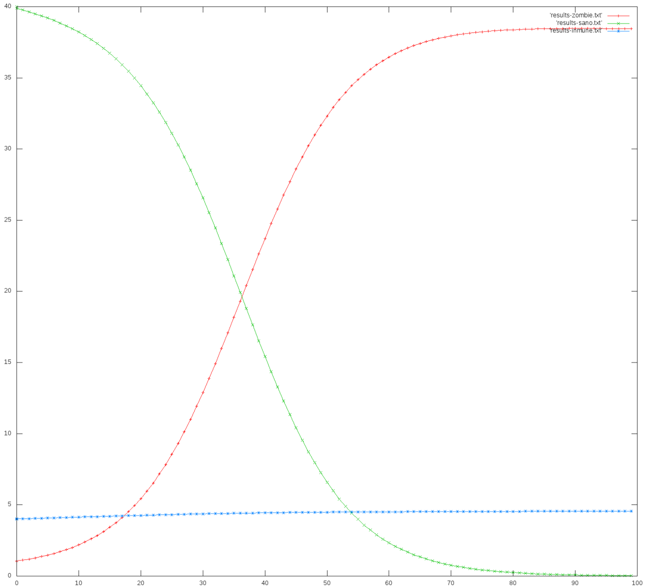
Ajustando parámetros

$$
\begin{aligned}
\alpha_1 &= 3 \quad \text{Infección por mordida} \\
\alpha_2 &= 0{,}1 \quad \text{Muerte en Contienda (inmunes)} \\
\beta_1 &= 1{,}5 \quad \text{Muerte en Contienda (zombies)} \\
\beta_2 &= 0{,}3 \quad \text{Nacimientos (sanos)} \\
\beta_3 &= 0{,}3 \quad \text{Nacimientos (inmunes)} \\
\delta_1 &= 0{,}02 \quad \text{Muerte Natural (zombies)} \\
\delta_2 &= 0{,}02 \quad \text{Muerte Natural (sanos)} \\
\delta_3 &= 0{,}02 \quad \text{Muerte Natural (inmunes)}
\end{aligned}
$$

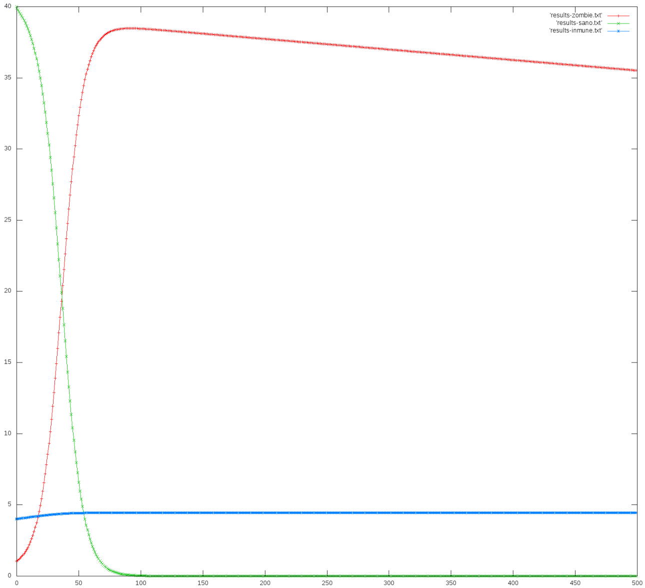
Aplicación - Ataque Zombie - CC



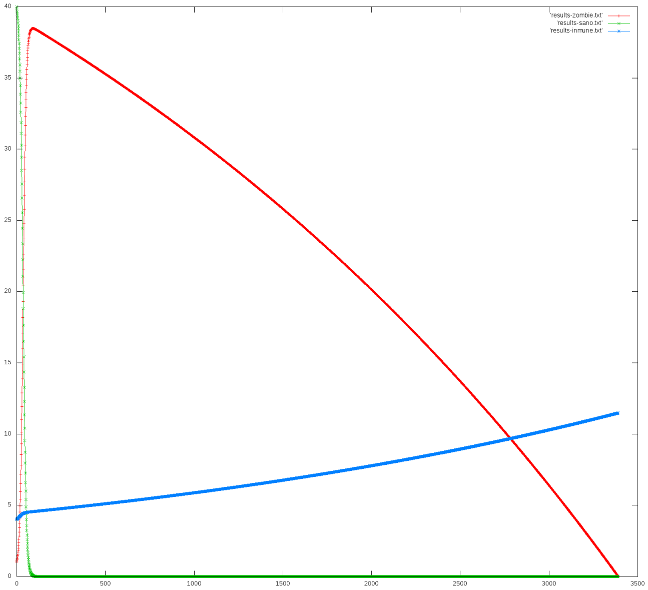
Aplicación - Ataque Zombie - CC + P Inmunes



Aplicación - Ataque Zombie - CC + P Inmunes



Aplicación - Ataque Zombie - CC + P Inmunes

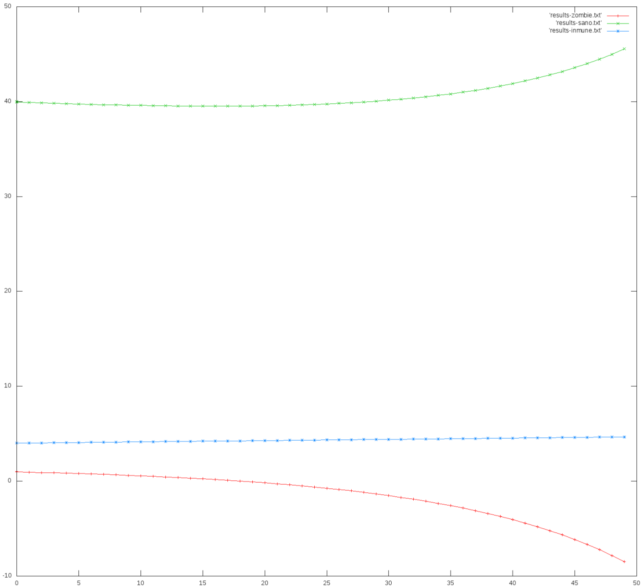


Aplicación - Ataque Zombie - Segundo Scenario

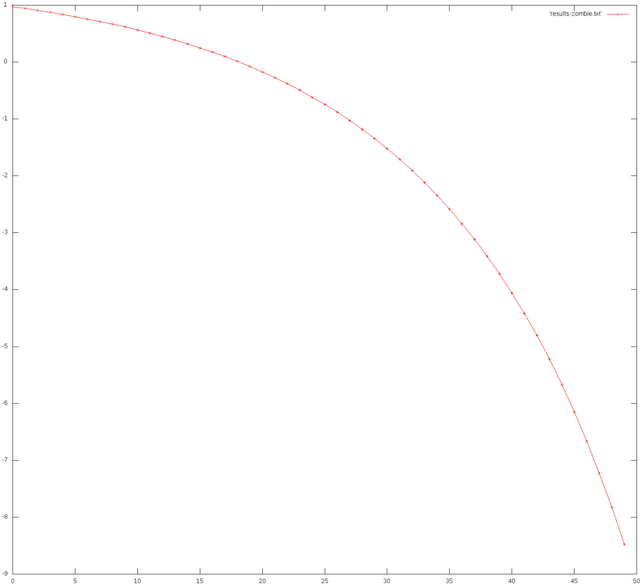
Ajustando parámetros

$$
\begin{aligned}
\alpha_1 &= 1{,}5 \quad \text{Infección por mordida} \\
\alpha_2 &= 0 \quad \text{Muerte en Contienda (inmunes)} \\
\beta_1 &= 2 \quad \text{Muerte en Contienda (zombies)} \\
\beta_2 &= 0{,}3 \quad \text{Nacimientos (sanos)} \\
\beta_3 &= 0{,}3 \quad \text{Nacimientos (inmunes)} \\
\delta_1 &= 0{,}02 \quad \text{Muerte Natural (zombies)} \\
\delta_2 &= 0{,}02 \quad \text{Muerte Natural (sanos)} \\
\delta_3 &= 0{,}02 \quad \text{Muerte Natural (inmunes)}
\end{aligned}
$$

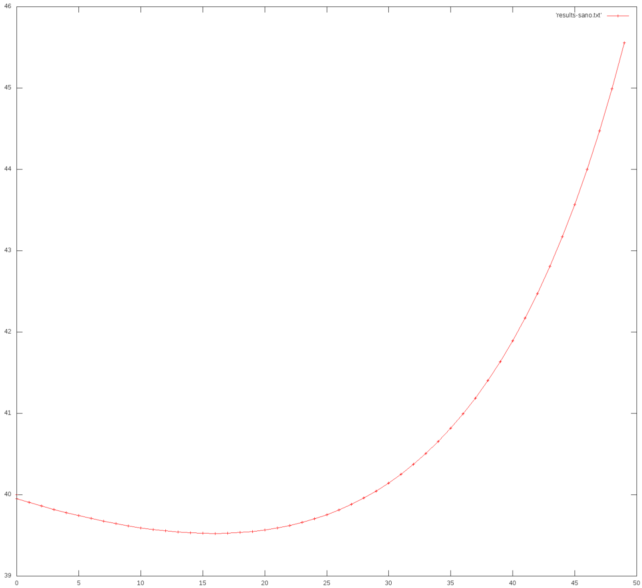
Aplicación - Ataque Zombie



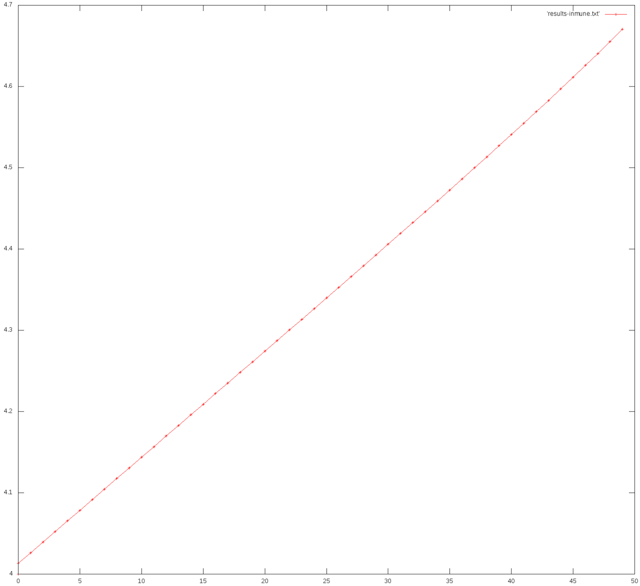
Aplicación - Ataque Zombie



Aplicación - Ataque Zombie



Aplicación - Ataque Zombie



Para resolver un sistema de la forma

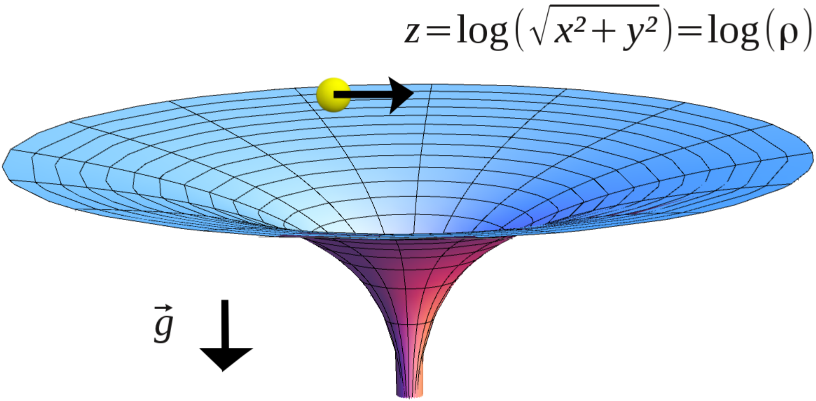
$$\frac{\mathrm{d^n}u}{\mathrm{d}t^n} = f\left(t, u\right) \tag{35}$$

es preciso resolver un sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas

$$\begin{aligned}
y_1 &= u & \frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} &= y_2 \\
y_2 &= \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} & \frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} &= y_3 \\
\vdots &= \vdots \\
y_n &= \frac{\mathrm{d^{n-1}}u}{\mathrm{d}t^{n-1}} & \frac{\mathrm{d}y_n}{\mathrm{d}t} &= f\left(t, u\right)
\end{aligned}$$

Aplicación - Mecánica Clásica

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



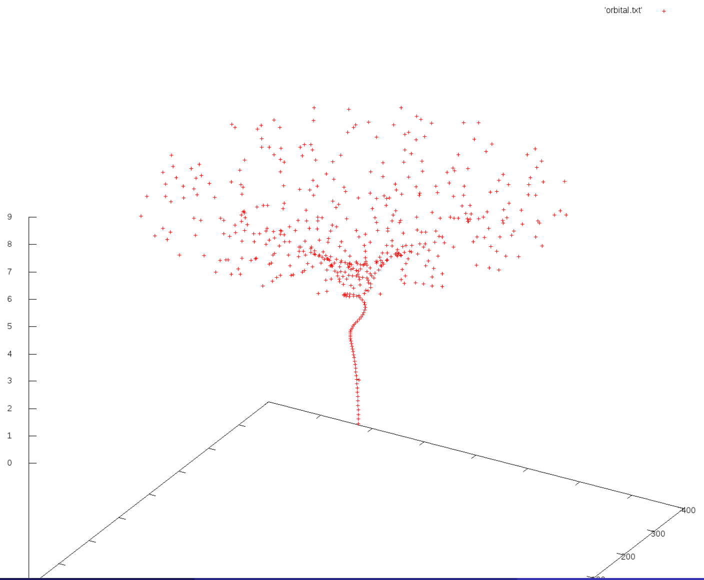
Aplicación - Mecánica Clásica

Luego de usar un poco la cabeza se llega al siguiente sistema de Ecuaciones

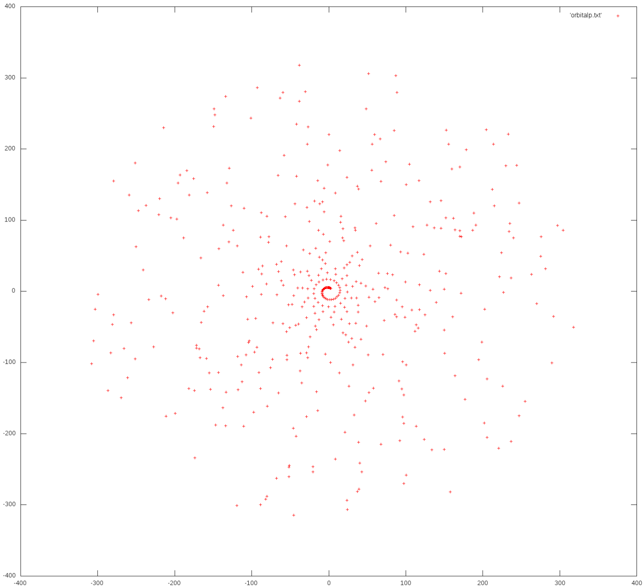
$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} &= \frac{p_z}{m} \\
\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} &= \frac{p_\theta}{m\rho^2} = \frac{l}{m\rho^2} \\
\frac{\mathrm{d}^2\rho}{\mathrm{d}t^2} &= \frac{l^2}{m^2\rho^4} + \frac{g}{\rho}
\end{aligned}
$$

Para este sistema se integran 4 EDO de primer orden.

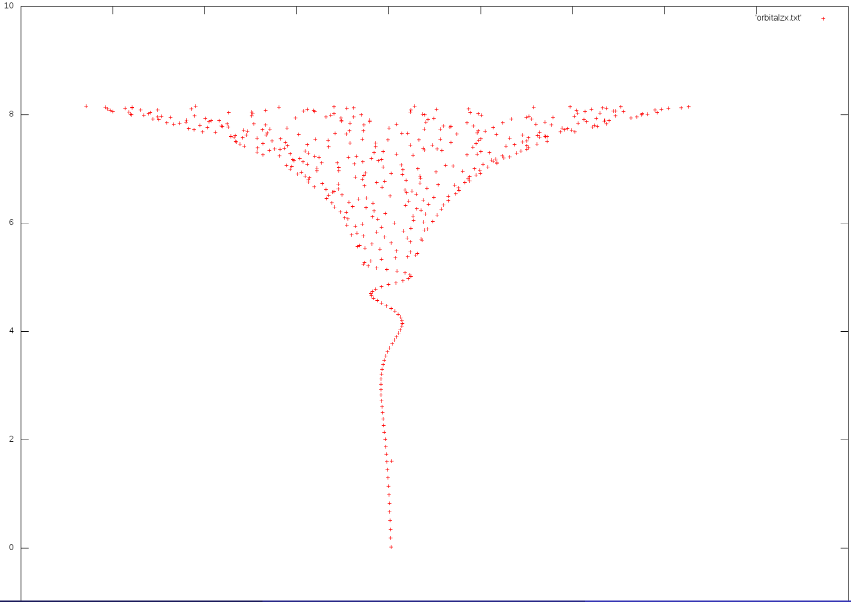
Aplicación - Mecánica Clásica



Aplicación - Mecánica Clásica



Aplicación - Mecánica Clásica



Comentarios Finales

- Exísten 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 tambien librerias incluyen en sus paquetes métodos de solución de EDOs como por ejemplo la librería *GSL*[9]
- **Recomendación Personal**: si desea construir el código usted mismo sea muy cuidadoso con la sintaxis!. Use software de código abierto[10] para que su trabajo sea legal[11]

---

[9] GNU Scientific Library

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

[11] Tener claro licencias GPL, Copyleft y CreativeCommons

Muchas Gracias

Estas diapositivas, al igual que los códigos para generar las imágenes y simulaciones estarán disponibles en la URL del seminario. Igualmente estarńa alojadas en
`http://github.com/Daniel-M/ODE-Seminar`

Muchas Gracias