

Discretización de ecuaciones diferenciales no lineales unimodales

Francisco Solís y Graciela Castro

CIMAT, Apartado postal 402
Guanajuato Gto. 36000, México
Tel.: 473 271 55; Fax: 473 257 49
e-mail: solis@cimat.mx
e-mail: graciela@cimat.mx

Resumen

Se proporciona un método de discretización de ecuaciones diferenciales que consiste en combinaciones lineales paramétricas convexas de un conjunto de funciones de iteración dado. Usamos este método para generar discretizaciones de ecuaciones diferenciales unimodales con funciones de iteración de un subconjunto de los métodos explícito de Runge–Kutta con tamaño de paso fijo. Mostramos de manera numérica que las discretizaciones obtenidas extienden de manera significativa el rango de validez de las soluciones asintóticas con respecto al obtenido al usar los métodos en forma individual. Una ventaja de las combinaciones óptimas es que son métodos de bajo orden por lo que su costo computacional no es significativo. Usamos la ecuación logística como función de prueba y se dan los resultados numéricos con detalle de las combinaciones óptimas.

DISCRETIZATION OF UNIMODAL NON LINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS

Summary

We give a method of discretization of differential equations that consists in parametric linear convex combinations of a given set of iteration functions. We use this method to generate discretizations of unimodal differential equation using iteration functions of explicit Runge–Kutta methods with fixed step size. We show numerically that these combinations extend the range of validity of the approximations than when the methods are used separately. An advantage of the optimal combinations is that they are of lower order and thus the computational time is not significant. The logistic equation is used as a benchmark to give detailed quantitative data of the optimal combinations.

INTRODUCCIÓN

Uno de los principales objetivos de la teoría de ecuaciones diferenciales no lineales consiste en estudiar el comportamiento asintótico de sus soluciones, es decir cuál es el comportamiento de las soluciones en un futuro lejano o en un distante pasado. Durante los últimos sesenta años ha habido un enorme interés en la aplicación de las técnicas de esta teoría a modelos en física, biología e ingeniería.

Una manera concreta de estudiar el comportamiento asintótico de las ecuaciones diferenciales es usando métodos analíticos. Desafortunadamente en la mayoría de los casos esto no es posible, por lo cual uno tiene que usar métodos cualitativos (geométricos) o aproximar las soluciones usando métodos numéricos. En este trabajo se estudiará, de manera numérica, el comportamiento asintótico de una familia de ecuaciones diferenciales no lineales unidimensionales usando algunas discretizaciones muy particulares. Aunque el comportamiento asintótico de las ecuaciones diferenciales en una dimensión es conocido, sus versiones discretas son bastante difíciles de analizar sólo para casos muy sencillos es posible lograr una plena descripción. Los resultados de este trabajo se pueden extender sin dificultad al caso multidimensional para el cual los estados asintóticos son de alta complejidad.

Uno de los principales problemas que han surgido al discretizar una ecuación diferencial unimodal dependiendo de uno o varios parámetros es que las aproximaciones únicamente son válidas hasta un valor finito de uno de sus parámetros. Para valores mayores del parámetro, el comportamiento de las aproximaciones puede diferir drásticamente del comportamiento de las soluciones del sistema. Este tipo de aproximaciones satisfacen a la ecuación en diferencias pero no a la ecuación diferencial y son conocidas como *soluciones asintóticas artificiales*. En las referencias 6 y 2 se muestra que que las discretizaciones por medio de los métodos de Runge–Kutta tienen bifurcaciones y se producen soluciones asintóticas artificiales. Una alternativa para evitar estas soluciones artificiales es obtener discretizaciones que permitan extender el rango de la validez de las aproximaciones para mayores valores del parámetro. Para lograr este objetivo proporcionamos un método de discretización que consiste en combinaciones lineales parámetricas convexas de un conjunto de funciones de iteración dado. Usaremos en este trabajo varias discretizaciones, dadas por combinaciones lineales convexas de un subconjunto de los métodos explícitos de Runge–Kutta con tamaño de paso fijo (MERKS). Aunque existen otras discretizaciones que proporcionan buenos resultados en algunos casos particulares⁴, nuestro principal interés consiste en explorar las propiedades de los MERKS, así como su desarrollo e implementación. La aplicación al estudio asintótico de los MERKS ha sido desarrollado en otros trabajos^{2,6}, aunque de forma diferente de como lo haremos aquí.

Primero describiremos algunas de las características de las ecuaciones de nuestro interés e introduciremos a los MERKS, después analizaremos la aplicación de estas técnicas.

Ecuaciones diferenciales unimodales

Las ecuaciones diferenciales lineales han sido profundamente estudiadas y se conocen todas las propiedades de sus soluciones. Para las ecuaciones no lineales el panorama cambia totalmente, ya que las técnicas analíticas de solución conocidas son muy escasas y además sólo pueden ser empleadas para ejemplos muy particulares. Peor aun, los modelos más realistas en la mayoría de las aplicaciones son de naturaleza no lineal. Nos restringiremos al tipo de ecuaciones no lineales más sencillas, ecuaciones unimodales, ya que poseen dos puntos fijos: uno repulsor y el otro atractor. Estas propiedades hacen que el análisis de la ecuación sea sencillo, pero sus discretizaciones no comparten su sencillez. A continuación se definen las ecuaciones diferenciales unimodales.

Definición 1 Las ecuaciones diferenciales unimodales son de la forma

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(y, \lambda) \quad (1)$$

donde $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ satisface las siguientes propiedades:

1. f depende continuamente de y y de λ .
2. Existe un intervalo $(0, b)$ en el dominio de f de tal manera que $f(y, \lambda) \geq 0$ con $f(0, \lambda) = 0 = f(b, \lambda)$.
3. Existe $y_M \in (0, b)$ de tal manera que $f(y, \lambda)$ es monótona creciente para $y \in (0, y_M)$ y monótona decreciente para $y \in (y_M, b)$.
4. Hay un único punto fijo, y_f de $f(y, \lambda)$, con $y_f \in (0, b)$.
5. $f(y, \lambda) > y$ para $(0, y_f)$.

Las propiedades 1, 2, 3, 4 y 5 se cumplen para cada valor de λ .

En una técnica numérica se tiene que discretizar a la ecuación bajo estudio. ¿Cómo saber que tales discretizaciones proporcionan una buena aproximación al problema de valor inicial? Una versión discreta del teorema de existencia y unicidad de ecuaciones diferenciales ordinarias nos proporciona la posibilidad de obtener una óptima discretización⁹. La discretización óptima solamente para algunos casos particulares se puede encontrar. En la referencia 4 se dan condiciones necesarias que las discretizaciones óptimas deben cumplir, pero establecer un algoritmo para encontrar la discretización óptima es un problema abierto.

Ejemplo 1 La ecuación logística

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y(1 - y) \quad (2)$$

es una ecuación diferencial unimodal que ha sido usada para modelar poblaciones donde la tasa intrínseca de crecimiento es una función decreciente de la densidad de población⁷. Además es una de las pocas ecuaciones en donde su solución analítica es conocida. La discretización óptima (obtenida de su solución) a la ecuación logística está dada por

$$y_{n+1} = \frac{e^{\lambda} y_n}{(e^{\lambda} - 1)y_n + 1} \quad (3)$$

por lo que $y_n \rightarrow 1$ cuando $n \rightarrow \infty$ para cada condición inicial en $(0,1]$ y $y(t) \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$ si $y(0) = 0$. En un caso general se desea conocer el comportamiento asintótico de cada ecuación sin tener que usar su solución. Para la ecuación logística los siguientes dos modelos habían sido considerados como sus modelos discretos asociados¹¹

$$y_{n+1} = (1 + \lambda)y_n(1 - y_n) \quad y \quad y_{n+1} = y_n \exp(\lambda - (1 + \lambda)y_n) \quad (4)$$

Ahora ya se ha descubierto¹³ que los modelos en (4) son obtenidos al usar un método numérico de un solo paso a la ecuación logística con un tamaño de paso igual a uno.

Dado que los elementos de la familia unimodal conservan sus propiedades cualitativas⁵, usaremos la ecuación logística como ecuación de prueba para mostrar algunos resultados cuantitativos, los cuales dependerán de cada ecuación en particular. Cabe notar que los resultados en general pueden depender de las condiciones iniciales cuando las funciones de iteración de las discretizaciones obtenidas no son funciones unimodales. Para dichos casos se escoge una condición inicial que no esté cerca de la cuenca de atracción del punto fijo y que sus resultados sean válidos para cualquier otra condición inicial.

Métodos de Runge–Kutta

Métodos de Runge–Kutta de s estados de orden p consisten en dado y_{n-1} como aproximación a la ecuación (1) en el tiempo t_{n-1} , la aproximación a y_n está dada por

$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^s c_j F_j \quad (5)$$

donde $F_i = f(K_i, \lambda)$ y K_i se define como

$$K_i = y_{n-1} + h \sum_{j < i} b_{ij} F_j(y_n) \quad (6)$$

con h como tamaño de paso del método. Los coeficientes b_{ij} son los elementos de una matriz denotada por \mathbf{B} , conocida como matriz de estados y los coeficientes c_j son los elementos

del vector de estados \mathbf{c} ; tanto \mathbf{B} como \mathbf{c} son escogidos para obtener el orden deseado. La relación (5) puede escribirse de la forma $y_n = \phi(y_{n-1}, \lambda)$ donde al lado derecho se le conoce como *función de iteración*. Para órdenes $k \leq 4$ se tienen métodos de orden k con k estados. Para $k > 4$, métodos de orden k requieren de más de k estados. En nuestro trabajo usaremos métodos de orden k para $k = 1, \dots, 8$, por ejemplo usaremos un método de orden siete con 9 estados y un método de orden ocho con 11 estados. Los métodos particulares que usaremos han sido escogidos por sus propiedades asintóticas y además los de menor orden se escogieron por su popularidad. En el apéndice mostramos cuáles métodos fueron usados, dando solamente como datos las matrices y vectores de estados \mathbf{B} y \mathbf{c} .

Ejemplo 2 El método RK de orden uno (denotado por RK1), conocido como *método de Euler*, aplicado a la ecuación logística tiene como expresión

$$y_n = y_{n-1} + h\lambda y_{n-1}(1 - y_{n-1}) \quad n = 1, 2, \dots \quad (7)$$

Al producto $h\lambda$ lo podemos expresar como un nuevo parámetro $\tilde{\lambda}$. Esta propiedad la conservan todos los métodos de Runge–Kutta aplicados a la ecuación logística, por lo que sin pérdida de generalidad podemos suponer que $h = 1$. Con la ecuación en diferencias (7) aproximaremos a la solución asintótica de la ecuación logística.

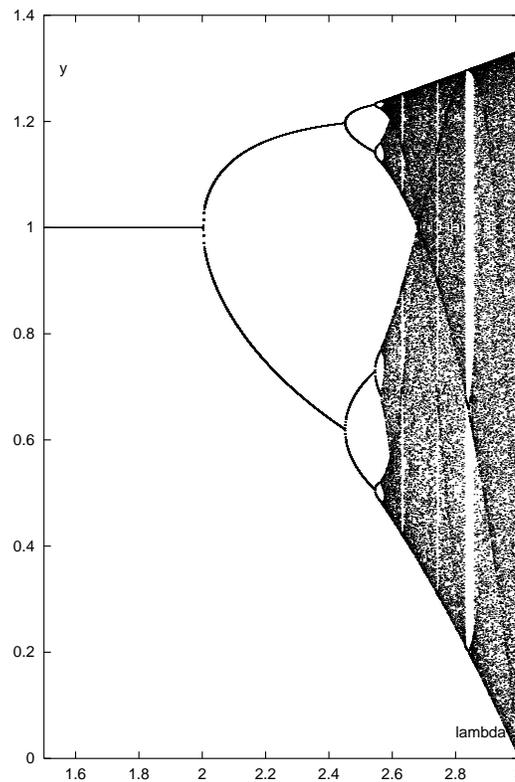


Figura 1. Diagrama de bifurcación para la ecuación logística

El diagrama visual que se tiene en la Figura 1 es conocido como *diagrama de bifurcación*, en el cual se grafica la solución asintótica contra el parámetro λ . La aproximación asintótica se obtiene desechando, para cada valor de λ , cierto número de iteraciones (estados transitorios) y finalmente se despliegan en el gráfico un número limitado de puntos que definen

a un conjunto límite conocido como atractor. La cota de desecho depende de cada función de iteración, en el caso de la ecuación logística tomamos 1000 iteraciones, en algunas otras ecuaciones se tienen que tomar hasta diez veces más puntos. Existen familias de ecuaciones llamadas familias de convergencia lenta, las cuales requieren de hasta 100 000 iteraciones en la vecindad de puntos de bifurcación¹². La condición inicial usada fue de 0,5 y se observó un comportamiento asintótico correcto de (7) hasta el valor del parámetro $\lambda = 2,0$. Este valor de λ es muy importante porque nos está delimitando no sólo el comportamiento asintótico correcto para la ecuación en diferencias, sino que también a partir de este punto surge la primera bifurcación (el punto de equilibrio $x(t) = 1$ pierde su estabilidad). Las aproximaciones se empiezan a bifurcar en dos ramas (punto periódico de periodo dos), después en cuatro, en ocho, dieciséis, $\dots, 2^n, \dots$ etc. hasta llegar a un punto de acumulación en $\lambda \approx 2.7$ (punto caótico). En $\lambda = 3$ (punto de crisis) el punto de equilibrio $x(t) = 0$ se intercepta con el atractor caótico produciendo la desaparición del atractor. A partir de este valor de λ las aproximaciones tienden a decaer a menos infinito. Las soluciones de (7) dadas después de la primer bifurcación son soluciones asintóticas artificiales.

Definición 2 Un valor óptimo para un método numérico aplicado a una ecuación de la forma (1) es el máximo valor del parámetro para el cual la solución asintótica es exacta.

Para el método RK1 aplicado a la ecuación logística su valor óptimo es igual a dos. Con este resultado surge una pregunta bastante obvia. Usando métodos RK de mayor orden se obtendrán mejores valores óptimos? Para responder esta pregunta haremos el mismo análisis con los MERKS de mayor orden descritos en el apéndice.

DISCRETIZACIONES DE ECUACIONES VÍA MERKS

El principal esfuerzo computacional que realiza un método de Runge–Kutta es la evaluación de las funciones. Butcher¹ estableció la relación existente entre el error de truncamiento local y las evaluaciones por paso del método. En consecuencia de esta relación, existe un antagonismo entre la precisión y el costo computacional en las evaluaciones de la función. Es por esta razón que un método de Runge–Kutta de orden cuarto es muy bueno, cuatro evaluaciones de función por paso y un error de truncamiento local de orden cuarto, es decir con un ligero costo computacional y un tamaño de paso no tan pequeño se obtienen resultados satisfactorios. Por otro lado, el método RK1 no tiene un costo elevado computacionalmente, sin embargo necesita un tamaño de paso pequeño para dar resultados aceptables. La relación de ser un mejor método de acuerdo al orden (con un tamaño de paso fijo) para los métodos RK's no se preserva en el estudio asintótico, lo cual lo comprobaremos a continuación.

Al aplicar los métodos MERKS a ecuaciones diferenciales unimodales, el primer punto a observar es que las versiones discretas de estas ecuaciones no preservan la propiedad de unimodalidad, sólo el método RK1 la mantiene. Los diagramas de bifurcación obtenidos presentan diferentes características dependiendo de la ecuación bajo estudio. Se obtiene en algunos casos la existencia de soluciones artificiales mucho antes de las previstas por su linealización⁶, no en todos los casos se tiene la doble periodicidad seguida de caos como en el ejemplo 1, el atractor en algunos casos es un conjunto disconexo, se obtuvo en casos muy excepcionales el fenómeno de reversibilidad, no todos los casos fueron caóticos, etc.

El mínimo valor óptimo (Tabla I) al aplicar los MERKS a la ecuación logística fue de $\lambda = 2,0$, el cual correspondió a los métodos RK1 y RK2, lo cual parece razonable, pues se trata de los métodos de menor orden. El valor de $\lambda = 2$ se debe a que es el valor de λ donde el punto de equilibrio pierde su estabilidad para ambos métodos. El máximo valor óptimo, $\lambda = 3,3$, correspondió al método RK5, lo cual puede parecer sorprendente, ya que

Método	Valor óptimo
RK-1	2,0
RK-2	2,0
RK-3	2,5
RK-4	2,7
RK-5	3,3
RK-6	2,4
RK-7	2,15
RK-8	2,9

Tabla I. Valores óptimos de la ecuación logística

mejoró a algunos métodos de orden mayor. Cabe aclarar que el método RK5 fue escogido dentro de los mejores del mismo orden, ya que existen métodos dentro de esta familia que no mejoran al método RK4.

De lo anterior surge el siguiente problema:

Problema Dada una colección finita de métodos numéricos encontrar una buena discretización, en el sentido que el rango de validez de las soluciones asintóticas sea lo mayor posible.

Proponemos una solución como sigue:

Solución Sea \mathcal{C} la familia de funciones continuas de \mathbb{R} a $[0,1]$ y sea $\{f_i\}_{i=1}^N$ una colección de funciones de iteración obtenida por discretizaciones de una ecuación diferencial dada. Escoger $\beta_i \in \mathcal{C}$ para $i = 1, \dots, N$ con la propiedad que $\sum_{i=1}^N \beta_i(\lambda) = 1$ y asociemos la discretización dada por

$$y_{n+1} = \sum_{i=1}^N \beta_i(\lambda) f_i(y_n, \lambda) \quad (8)$$

En este trabajo se usa a la familia de métodos dada por los MERKS, y la familia de funciones β son funciones constantes en el intervalo $[0,1]$. Falta por encontrar condiciones sobre las funciones β para poder encontrar un algoritmo eficiente y práctico para encontrar la discretización óptima.

COMBINACIONES DE DOS MÉTODOS

Anteriormente se mostró la finitud del rango de validez de los métodos RK's, a los que llamaremos *métodos puros*. Ahora se busca mejorar los resultados de esos métodos y para lograr este propósito usaremos discretizaciones dadas por *combinaciones lineales convexas* de los métodos puros. Tomando este tipo de combinaciones de los métodos puros se garantiza que el peor escenario que se tendrá es obtener el mismo rango de validez que se obtiene al usar los métodos puros por separado; pero en un mejor escenario se puede esperar una extensión en el rango. ¿Cuántos métodos combinar?, ¿qué métodos? y ¿qué porcentaje tomar de cada uno de los métodos para lograr la combinación óptima? Comenzaremos primero por tomar sólo dos métodos en cada combinación y realizaremos un estudio detallado de todas las posibles combinaciones de dos métodos, ya que los costos computacionales no son significativamente elevados.

El nuevo método con dos combinaciones está dado por

$$y_n = \beta f_i(y_{n-1}, \lambda) + (1 - \beta) f_j(y_{n-1}, \lambda) \quad (9)$$

donde f_i y f_j (con $i < j$) son las dos funciones de iteración correspondientes a los métodos elegidos. Geométricamente, la nueva función de iteración tiene como gráfica una curva que

está a distancia constante β de la gráfica de f_i y a distancia $1 - \beta$ de la de f_j . La ecuación (9) se puede escribir como

$$y_n = \psi_{ij}(y_{n-1}, \lambda, \beta) \quad (10)$$

la cual depende de los métodos puros RK_i , RK_j y de un nuevo parámetro, β , que es el factor de peso o porcentaje de los métodos seleccionados.

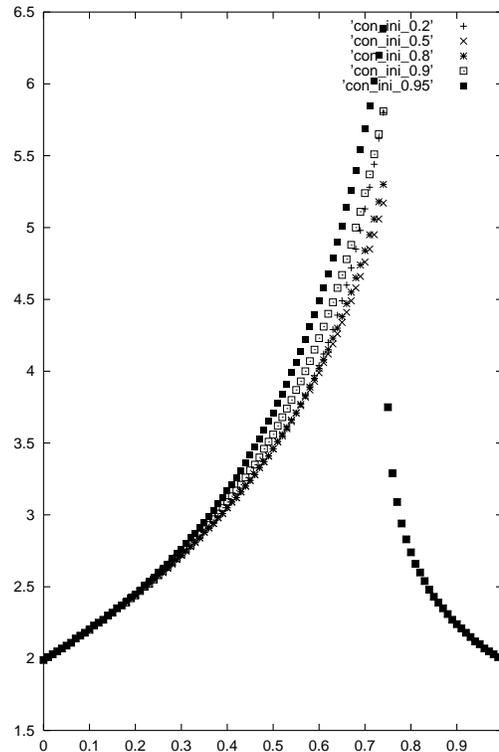


Figura 2. Curvas de valores óptimos para varias condiciones iniciales

En el caso de dos combinaciones se obtiene una curva de valores óptimos parametrizada por β . Esta curva en general no es una curva suave aunque se obtiene de la unión de dos curvas suaves, las cuales determinan la estabilidad global del punto de equilibrio de la ecuación unimodal. En general esta curva difiere de la obtenida al elaborar estudio de estabilidad local lineal del método (10). Sólo para las combinaciones con métodos de bajo orden (< 3) se tiene coincidencia. En la Figura 2 se muestran las curvas óptimas para la combinación de los métodos RK1 y RK2 para diferentes condiciones iniciales ($y_0 = 0, 2; 0, 5; 0, 8; 0, 9; 0, 95$). Notemos que existe una región ($\beta \in (0, 3; 0, 7)$) donde las curvas óptimas dependen de la condición inicial. En esta región la función de iteración no da origen a un sistema dinámico discreto unimodal. Es por esto que se la condición inicial igual a $y_0 = 0, 5$ en la ecuación logística para garantizar que los valores óptimos den una aproximación correcta independientemente de la condición inicial.

El método RK1 tiene una propiedad interesante, al combinarlo con los demás métodos puros (excepto el RK3) siempre se obtienen mejores resultados. Esta propiedad no la tiene ninguno de los restantes métodos puros, lo cual reafirma una conjetura que establece que el método óptimo debe de ser de primer orden. Un resultado sorprendente es que la mejor estrategia con dos combinaciones consiste en combinar a los dos métodos de más bajo orden (el RK1 y el RK2). Reduciendo de esta manera el costo computacional a tres evaluaciones

de la función por paso. El peso de cada método depende de la ecuación bajo estudio.

Para el caso de la ecuación logística, un estudio de estabilidad local manifiesta el hecho de que es posible extender el rango de validez de las soluciones asintóticas. Más aun, las funciones de iteración tienden a acercarse mejor a la discretización óptima dada por (3), por lo cual esperamos obtener buenos resultados. Del total de las 28 combinaciones posibles, 12 casos presentan mejores resultados que al usar los métodos por separado. Se tomaron en cada caso valores de β en una malla con refinamiento no equidistante de cien puntos. En algunos casos el avance porcentual en la extensión del rango es significativo. En la Figura 3 mostramos un diagrama de bifurcación de una combinación de los métodos RK3 y RK4 usando $\beta = 0,5$. La extensión del rango de validez para las diferentes combinaciones comprende un rango desde el 3 % hasta el 155 %.

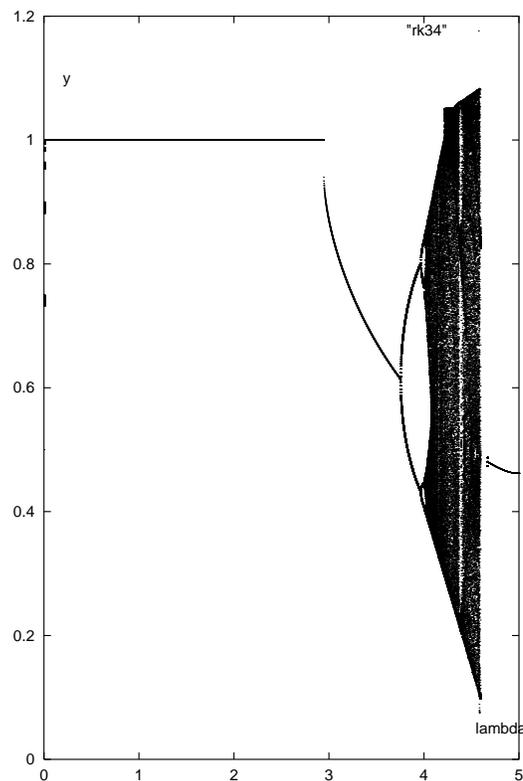


Figura 3. Diagrama de bifurcación para la ecuación logística usando ψ_{34}

Realmente son halagadores estos resultados. Sin embargo, la meta en el caso de dos combinaciones es mejorar el rango del método puro RK5. En este sentido, el caso ψ_{12} con $\beta = 0,734694$ es la mejor combinación con una ganancia del 54 % y un gasto de sólo tres evaluaciones de la función por paso. Recordar que el método RK5 tenía un costo de seis evaluaciones de la función por paso. La combinación ψ_{14} con $\beta = 0,510204$ proporciona un 21 % de ganancia con cinco evaluaciones por paso. Y la combinación ψ_{15} con $\beta_1 = 0,122449$ proporciona un 6 % de ganancia con un costo de siete evaluaciones de la función. Para el caso ψ_{14} la curvas de valores óptimos y la dada por la linealización local difieren totalmente. Los resultados obtenidos para la ecuación logística se encuentran detallados en la Tabla II.

ψ_{ij}	Valor óptimo	β
ψ_{12}	5,1	0,734694
ψ_{13}	2,5	0,000000
ψ_{14}	4,0	0,510204
ψ_{15}	3,5	0,122449
ψ_{16}	3,3	0,428571
ψ_{17}	2,5	0,367347
ψ_{18}	3,1	0,204082
ψ_{23}	2,9	0,204082
ψ_{24}	2,7	0,000000
ψ_{25}	3,3	0,000000
ψ_{26}	2,4	0,000000
ψ_{27}	2,1	0,000000
ψ_{28}	2,9	0,000000
ψ_{34}	3,1	0,510204
ψ_{35}	3,3	0,000000
ψ_{36}	3,3	0,612245
ψ_{37}	2,5	0,7955918
ψ_{38}	3,0	0,142857
ψ_{45}	3,3	0,000000
ψ_{46}	2,7	0,877551
ψ_{47}	2,7	1,000000
ψ_{48}	2,9	0,000000
ψ_{56}	3,3	1,000000
ψ_{57}	3,3	1,000000
ψ_{58}	3,3	1,000000
ψ_{67}	2,4	0,959184
ψ_{68}	3,0	0,224490
ψ_{78}	2,9	0,000000

Tabla II. Dos combinaciones para la ecuación logística

COMBINACIONES DE TRES O MÁS MÉTODOS

Se ha logrado un significativo avance en el objetivo planteado. La idea ahora es aumentar el número de combinaciones lineales. La simulación numérica que es efectuada con las discretizaciones de tres o más métodos, tiene el inconveniente del costo computacional. Más aun, al aumentar el número de combinaciones, el número de casos por estudiar aumenta de manera considerable. También se tiene un incremento en la dimensión del lugar geométrico dado por los valores óptimos. Es decir, ahora se tiene una hipersuperficie de valores óptimos para cada caso, la cual ya no es fácil de estudiar analíticamente ni numéricamente. Por ejemplo, con tres combinaciones se tienen 56 casos de estudio y para cada caso el conjunto de valores óptimos forma una superficie en el espacio tridimensional.

Una mejor estrategia es usar la experiencia obtenida con dos combinaciones, es decir se espera obtener resultados positivos en las combinaciones dadas por los casos ψ_{12j} , ψ_{14j} y ψ_{15j} . En el caso de tres combinaciones bastaría con estudiar a sólo trece del total de los casos. El nuevo método para la combinación que usa s métodos está dado ahora por

$$y_{n+1} = \psi_{k_1 k_2 \dots k_s} = \sum_{i=1}^N \beta_i(\lambda) f_{k_i}(y_n, \lambda) \quad (11)$$

Por razones de completes, serán exhibidas todos los casos con tres combinaciones para la ecuación logística. Poniendo atención en particular a los casos particulares sugeridos. En la Tabla III mostramos los resultados obtenidos. La mejor extensión del rango con tres combinaciones es dada por la combinación óptima de dos combinaciones más la participación del método RK4. En este caso particular la ganancia real que es obtenida es del 1 %, elevando el costo de las evaluaciones en un 100 % (de tres a seis evaluaciones por paso). De hecho, esta combinación es una de las combinaciones sugeridas anteriormente. Para el caso de cuatro combinaciones no es posible encontrar de manera analítica la hipersuperficie de valores óptimos y la búsqueda numérica del vector β de parámetros consume una gran cantidad en el procesamiento. Por ejemplo, para una malla con nodos equidistantes de $50 \times 50 \times 50$, el tiempo de computo en una Sparc 5 está en el orden de días de procesamiento (50 horas). Se probó la combinación ψ_{1245} y el valor óptimo es el mismo valor obtenido que al usar únicamente tres combinaciones. De hecho, si consideramos la sucesión de valores óptimos, $S_n(y_0)$, donde n es el número de combinaciones y y_0 es la condición inicial,

RK_{ijk}	Valor óptimo	β_1	β_2
ψ_{123}	5,1	0,734694	0,265306
ψ_{124}	5,3	0,734694	0,224490
ψ_{125}	5,1	0,734694	0,265306
ψ_{126}	5,1	0,734694	0,265306
ψ_{127}	5,1	0,734694	0,265306
ψ_{128}	5,1	0,734694	0,265306
ψ_{134}	4,1	0,530612	0,040816
ψ_{135}	3,5	0,122449	0,000000
ψ_{136}	3,5	0,306122	0,265306
ψ_{137}	2,5	0,000000	0,795918
ψ_{138}	3,1	0,061224	0,387755
ψ_{145}	4,4	0,571429	0,306122
ψ_{146}	4,0	0,510204	0,489796
ψ_{147}	4,0	0,510204	0,489796
ψ_{148}	4,0	0,510204	0,489796
ψ_{156}	3,8	0,367347	0,510204
ψ_{157}	3,5	0,122449	0,877551
ψ_{158}	3,5	0,122449	0,877551
ψ_{167}	3,3	0,428571	0,571429
ψ_{168}	3,4	0,591837	0,387755
ψ_{178}	3,1	0,204082	0,000000
ψ_{234}	3,1	0,000000	0,510204
ψ_{235}	3,3	0,000000	0,000000
ψ_{236}	3,3	0,000000	0,612245
ψ_{237}	2,9	0,204082	0,795918
ψ_{238}	3,0	0,000000	0,142857
ψ_{245}	3,3	0,000000	0,000000
ψ_{246}	2,7	0,000000	0,877551
ψ_{247}	2,7	0,000000	1,000000
ψ_{248}	3,0	0,020408	0,081633
ψ_{256}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{257}	3,3	0,000000	1,000000

RK_{ijk}	Valor óptimo	β_1	β_2
ψ_{258}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{267}	2,4	0,000000	0,959184
ψ_{268}	3,0	0,000000	0,224490
ψ_{278}	2,9	0,000000	0,000000
ψ_{345}	3,3	0,000000	0,000000
ψ_{346}	3,4	0,632653	0,183673
ψ_{347}	3,1	0,510204	0,489796
ψ_{348}	3,3	0,591837	0,387755
ψ_{356}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{357}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{358}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{367}	3,3	0,612245	0,387755
ψ_{368}	3,3	0,612245	0,387755
ψ_{378}	3,0	0,142857	0,000000
ψ_{456}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{457}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{458}	3,3	0,000000	1,000000
ψ_{467}	2,7	0,877551	0,122449
ψ_{468}	3,0	0,000000	0,224490
ψ_{478}	2,9	0,000000	0,000000
ψ_{567}	3,3	1,000000	0,000000
ψ_{568}	3,3	1,000000	0,000000
ψ_{678}	3,0	0,224490	0,000000

Tabla III. Tres combinaciones para la ecuación logística $\beta_3 = 1 - \beta_2$ (continuación)

observamos que $S_n(0, 5) = 3, 3; 5, 2; 5, 3; 5, 3; \dots$, lo cual parece indicar que la sucesión de valores óptimos converge exponencialmente, lo cual es una conjetura que se intentará probar en un futuro trabajo.

Es notorio destacar que se aplicaron las combinaciones convexas a otras familias de ecuaciones como la familia senoidal $\dot{y} = \lambda \sin(\pi y)$, una familia (no unimodal) cúbica $\dot{y} = \lambda y(1 - y)(0, 5 - y)$ y se obtuvieron los mismos resultados cualitativos que para la ecuación logística, aunque los resultados cuantitativos obviamente fueron diferentes. Para la ecuación senoidal se obtiene una ganancia que va del 4 % al 28 % al pasar de una a dos combinaciones. Para la ecuación cúbica los avances porcentuales van del 2 % al 28 %. Para esta familia se observa que las combinaciones que usan el método RK3 mejoran de manera significativa su avance porcentual con respecto de las otras familias.

CONCLUSIONES

1. El método RK1, a pesar de no ser un método muy exacto, al usar combinaciones produce métodos con bastante precisión. De hecho, su presencia hace que el método resultante sea de primer orden, lo cual apoya la conjetura de que para ecuaciones unidimensionales el método óptimo debe de ser de primer orden.
2. El uso de combinaciones con métodos de bajo orden brinda excelentes resultados; mejores que al combinar métodos de alto orden.
3. Al usar combinaciones de $N > 6$ métodos la hipersuperficie de valores óptimos puede ser aproximada por medio de variaciones normales de la superficie de valores óptimos

generada por las combinaciones de los $N - 1$ métodos que no incluyen al de máximo orden.

4. La parte central del trabajo no es estimar los valores óptimos, sino más bien elegir los métodos que brindan combinaciones óptimas, aunque se dieron los detalles numéricos que uno debe de tomar en cuenta para el estudio de un caso particular.
5. Las soluciones artificiales se pueden detectar fácilmente al usar combinaciones de métodos, ya que su existencia depende exclusivamente del método de discretización.
6. En un caso particular se recomienda el uso de una combinación que use métodos de orden uno, dos cuatro y cinco. Si esto representa un gasto importante, se puede prescindir del método de orden quinto.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a los censores de este trabajo por sus comentarios críticos y sugerencias.

REFERENCIAS

- 1 J.C. Butcher, “On the attainable order of Runge–Kutta methods”, *Mathematics of Computation*, Vol. **19**, pp. 408–417, (1965).
- 2 B. Chen y F. Solís, “Discretizations of nonlinear equations using explicit finite order methods”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. **90**, pp. 171–183, (1998).
- 3 B. Chen y F. Solís, “Explicit mixed finite order Runge–Kutta methods”, *Applied Numerical Mathematics*, Vol. **44**, pp. 21–30, (2003).
- 4 B. Chen y F. Solís, “Nonstandard methods”, por publicar en *Applied Numerical Mathematics*.
- 5 R. Devaney, “*An introduction to chaotic dynamical systems*”, Addison-Wesley, Redwood City, California, (1985).
- 6 D.F. Griffiths, P.K. Sweby y H.C. Yee, “On spurious asymptotic numerical solutions of explicit Runge–Kutta methods”, *IMA Journal of Numerical Analysis*, Vol. **12**, pp. 319–338, (1992).
- 7 R. May, “Biological populations with nonoverlapping generations: stable points, stable cycles and chaos”, *Science*, Vol. **186**, pp. 645–647, (1974).
- 8 R. May, “Biological populations obeying difference equations: stable points, stable cycles and chaos”, *J. Theor. Biol.*, Vol. **51**, pp. 511–524, (1975).
- 9 K.E. Mickens, “*Difference equations models of differential equations having zero local truncation error, differential equations*”, I.W. Knowlwey y R.T. Lewis (Eds.), North Holland Amsterdam, pp. 445–449, (1984).
- 10 K.E. Mickens, “Exact solutions to a finite difference model of nonlinear reaction–advection equation: implications for numerical analysis”, *Numer. Methods Partial Diff. Eqn.*, Vol. **5**, pp. 313–325, (1989).
- 11 S. Sinha y S. Parthasarathy, “Unusual dynamics of extinction in a simple ecological model”, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, Vol. **93**, pp. 1504–1508, (1996).
- 12 F. Solís y R. Felipe, “Slow convergence of maps”, *Nonlinear Studies*, Vol. **8**, N° 3, pp. 389–493, (2001).
- 13 F. Solís y M. Moreles, “Discretizations of a perturbed logistic equations”, *Discrete Dynamics in Nature and Society*, Vol. **4**, pp. 125–131, (2000).

APÉNDICE

Método de Runge–Kutta de primer orden (Método de Euler)

$$\begin{aligned}c &= (1) \\ B &= (0)\end{aligned}$$

Método de Runge–Kutta de segundo orden (Método de Euler mejorado)

$$\begin{aligned}c &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ B &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Método de Runge–Kutta de tercer orden

$$\begin{aligned}c &= \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right) \\ B &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Método de Runge–Kutta de cuarto orden

$$\begin{aligned}c &= \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}\right) \\ B &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Método de Runge–Kutta de quinto orden

$$\begin{aligned}c &= \left(\frac{13}{200}, 0, \frac{11}{120}, \frac{11}{60}, \frac{2}{75}, \frac{2}{15}\right) \\ B &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{3} & \frac{-1}{12} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{25}{48} & \frac{-55}{24} & \frac{35}{48} & \frac{15}{8} & 0 & 0 \\ \frac{3}{20} & \frac{-11}{24} & \frac{-1}{8} & \frac{1}{2} & \frac{1}{10} & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Método de Runge–Kutta de sexto orden

$$c = \left(\frac{13}{200}, 0, \frac{11}{40}, \frac{11}{40}, \frac{4}{25}, \frac{4}{25}, \frac{13}{200} \right)$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{3} & \frac{-1}{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{25}{48} & \frac{-55}{24} & \frac{35}{48} & \frac{15}{8} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{20} & \frac{-11}{24} & \frac{-1}{8} & \frac{1}{2} & \frac{1}{10} & 0 & 0 \\ \frac{-261}{260} & \frac{33}{13} & \frac{43}{156} & \frac{-118}{39} & \frac{32}{195} & \frac{80}{39} & 0 \end{pmatrix}$$

Método de Runge–Kutta de sétimo orden

$$c = \left(\frac{1}{20}, 0, 0, 0, 0, \frac{49}{180}, \frac{16}{45}, \frac{49}{180}, \frac{1}{20} \right)$$

Los elementos diferentes de cero de la matriz **B** son:

$$\begin{aligned} b_{21} &= \frac{7,1}{42}, b_{32} = \frac{7,1}{21}, b_{41} = \frac{7,1}{56}, b_{43} = \frac{21,3}{56}, b_{51} = \frac{8,-1}{16}, b_{53} = \frac{-21,6}{16}, b_{54} = \frac{21,-5}{16}, \\ b_{61} &= \frac{-1687,374}{196}, b_{63} = \frac{969,-210}{28}, b_{64} = \frac{-381,83}{14}, b_{65} = \frac{84,-20}{49}, b_{71} = \frac{583,-131}{128}, b_{73} = \frac{-2373,501}{128}, \\ b_{74} &= \frac{4221,-914}{288}, b_{75} = \frac{-9,4}{18}, b_{76} = \frac{189,35}{576}, b_{81} = \frac{-623,169}{392}, b_{83} = \frac{435,-81}{56}, b_{84} = \frac{-1437,307}{252}, \\ b_{85} &= \frac{-2028,-1468}{7497}, b_{86} = \frac{-21,4}{126}, b_{87} = \frac{384,80}{833}, b_{91} = \frac{579,-131}{24}, b_{93} = \frac{-791,167}{8}, b_{94} = \frac{8099,-1765}{108}, \\ b_{95} &= \frac{-1976,784}{459}, b_{96} = \frac{70,7}{54}, b_{97} = \frac{160,-80}{153}, b_{98} = \frac{49,-7}{18}. \end{aligned}$$

Método de Runge–Kutta de octavo orden

$$c = \left(\frac{1}{20}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \frac{49}{180}, \frac{16}{45}, \frac{49}{180}, \frac{1}{20} \right)$$

Los elementos diferentes de cero de la matriz **B** son:

$$\begin{aligned} b_{21} &= \frac{1}{2}, b_{31} = \frac{1}{4}, b_{32} = \frac{1}{4}, b_{41} = \frac{1}{7}, b_{42} = \frac{-7,-3}{98}, b_{43} = \frac{21,5}{49}, b_{51} = \frac{11,-1}{84}, b_{53} = \frac{18,4}{63}, \\ b_{54} &= \frac{21,1}{252}, b_{61} = \frac{5,1}{48}, b_{63} = \frac{9,1}{36}, b_{64} = \frac{-231,14}{360}, b_{65} = \frac{63,-7}{80}, b_{71} = \frac{10,-1}{42}, b_{73} = \frac{-432,92}{315}, \\ b_{74} &= \frac{633,-145}{90}, b_{75} = \frac{-504,115}{70}, b_{76} = \frac{63,-13}{35}, b_{81} = \frac{1}{14}, b_{85} = \frac{14,-3}{126}, b_{86} = \frac{13,-3}{63}, b_{8,7} = \frac{1}{9}, \\ b_{91} &= \frac{1}{32}, b_{95} = \frac{91,-21}{576}, b_{96} = \frac{11}{72}, b_{9,7} = \frac{-385,-75}{1152}, b_{9,8} = \frac{63,13}{128}, b_{10,1} = \frac{1}{14}, b_{10,5} = \frac{1}{9}, b_{10,6} = \frac{-733,147}{2205}, \\ b_{10,7} &= \frac{515,111}{504}, b_{10,8} = \frac{-51,-11}{56}, b_{10,9} = \frac{132,28}{245}, b_{11,5} = \frac{-42,7}{18}, b_{11,6} = \frac{-18,28}{45}, b_{11,7} = \frac{-273,-53}{72}, \\ b_{11,8} &= \frac{301,53}{72}, b_{11,9} = \frac{28,-28}{45}, b_{11,10} = \frac{49,-7}{18}. \end{aligned}$$

Tanto en Runge–Kutta de sétimo y octavo órdenes $\frac{a,b}{c}$ es la forma estándar para $\frac{a+b\sqrt{21}}{c}$