

Temporal_schemes.py Milestones/M_PYTHON/ODES

```
1
    from numba import njit
2
    from scipy.optimize import newton
3
    from numpy import matmul, array, zeros, float64, dot, empty
    from numpy.linalg import norm
4
5
 6
7
8
9
    0.00
10
11
      Temporal_schemes
12
13
        Inputs:
14
                U : state vector at tn
15
               dt: time step
16
                t: tn
17
                F(U,t): Function dU/dt = F(U,t)
18
19
        Return:
20
                U state vector at tn + dt
    0.00
21
22
23
24
    @njit
25
    def Euler(U, dt, t, F):
26
        return U + dt * F(U, t)
27
28
29
30
    def Inverse_Euler(U, dt, t, F):
31
32
        def Residual(X):
33
              return X - U - dt * F(X, t)
34
35
        return newton(func = Residual, x0 = U)
36
37
    @njit
38
    def Crank_Nicolson(U, dt, t, F):
39
40
        def Residual_CN(X):
41
42
             return X - a - dt/2 * F(X, t + dt)
43
44
        a = U + dt/2 * F(U, t)
45
        return newton( Residual_CN, U )
1.6
```

```
47
   @njit
48
   def RK4(U, dt, t, F):
49
50
        k1 = F(U, t)
51
       k2 = F(U + dt * k1/2, t + dt/2)
52
       k3 = F(U + dt * k2/2, t + dt/2)
53
       k4 = F(U + dt * k3,
                            t + dt
54
55
       return U + dt * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4)/6
56
57
58
59
60
   @njit
61
   def Embedded_RK( U, dt, t, F, q, Tolerance):
62
63
       \#(a, b, bs, c) = Butcher\_array(q)
64
       #a, b, bs, c = Butcher_array(q)
65
66
       N_{stages} = \{ 2:2, 3:4, 8:13 \}
67
       Ns = N_stages[q]
68
       a = zeros( (Ns, Ns), dtype=float64)
69
       b = zeros(Ns); bs = zeros(Ns); c = zeros(Ns)
70
71
       if Ns==2:
72
73
       a[0,:] = [0, 0]
74
       a[1,:] = [1, 0]
75
       b[:] = [1/2, 1/2]
76
       bs[:] = [1, 0]
77
       c[:] = [0, 1]
78
79
       elif Ns==13:
80
         c[:] = [0., 2./27, 1./9, 1./6, 5./12, 1./2, 5./6, 1./6, 2./3, 1./3,
81
               82
83
         a[1,:]
                84
                85
         a[3,:]
                86
         a[4,:]
                = [5./12, 0., -25./16, 25./16., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.]
87
                = [ 1./20, 0., 0., 1./4, 1./5, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.]
         a[5,:]
88
         a[6,:]
                = [-25./108, 0., 0., 125./108, -65./27, 125./54, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.]
89
                = [31./300, 0., 0., 0., 61./225, -2./9, 13./900, 0., 0., 0., 0., 0., 0]
90
                = [2., 0., 0., -53./6, 704./45, -107./9, 67./90, 3., 0., 0., 0., 0., 0]
         a[8,:]
91
                = [-91./108, 0., 0., 23./108, -976./135, 311./54, -19./60, 17./6, -1./12
92
         a[10,:] = [2383./4100, 0., 0., -341./164, 4496./1025, -301./82, 2133./4100, 45.
         a[11,:] = [3./205, 0., 0., 0., -6./41, -3./205, -3./41, 3./41, 6./41, 0., 0]
93
94
         a[12,:] = [-1777./4100, 0., 0., -341./164, 4496./1025, -289./82, 2193./4100, 51]
95
96
              = [ 41./840, 0., 0., 0., 0., 34./105, 9./35, 9./35, 9./280, 9./2<u>80. 41</u>./84
97
         bs[:] = [ 0., 0., 0., 0., 0., 34./105, 9./35, 9./35, 9./280, 9./280, 0
                                                                              /840
98
99
```

```
k = RK_stages(F, U, t, dt, a, c)
102
         Error = dot( b-bs, k )
103
104
         dt_min = min( dt, dt * ( Tolerance / norm(Error) ) **(1/q) )
         N = int( dt/dt_min ) + 1
105
106
         h = dt / N
107
         Uh = U.copy()
108
109
         for i in range(0, N):
110
111
             k = RK_{stages}(F, Uh, t + h*i, h, a, c)
             Uh += h * dot(b, k)
112
113
114
         return Uh
115
116
     @njit
117
     def RK_stages( F, U, t, dt, a, c ):
118
119
          k = zeros((len(c), len(U)), dtype=float64)
120
121
          for i in range(len(c)):
122
123
             for j in range(len(c)-1):
124
               Up = U + dt * dot(a[i, :], k)
125
126
             k[i, :] = F(Up, t + c[i] * dt)
127
128
          return k
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
     @njit
140
     def Butcher_array(q):
141
142
         N_{stages} = \{ 2:2, 3:4, 8:13 \}
143
144
         N = N_stages[q]
145
         a = zeros((N, N), dtype = float64);
146
         b = zeros((N)); bs = zeros((N)); c = zeros((N))
```

```
148
       if q==2:
149
150
        a[0,:] = [0, 0]
151
        a[1,:] = [1, 0]
152
        b[:] = [1/2, 1/2]
153
        bs[:] = [1, 0]
154
        c[:] = [0, 1]
155
156
       elif q==3:
157
158
         c[:] = [0., 1./2, 3./4, 1.]
159
160
         a[0,:] = [0., 0., 0., 0]
161
         a[1,:] = [1./2, 0., 0., 0]
                                       ]
162
         a[2,:] = [0., 3./4, 0., 0]
         a[3,:] = [2./9, 1./3, 4./9, 0]
163
                                        ]
164
                        1./3, 4./9,
165
         b[:] = [2./9,
                                    0.]
                        1./4, 1./3,
166
         bs[:] = [7./24,
                                     1./8]
167
168
       elif q==8:
169
170
          c[:] = [0., 2./27, 1./9, 1./6, 5./12, 1./2, 5./6, 1./6, 2./3, 1./3,
171
172
          a[0,:]
                173
                a[1,:]
174
          a[2,:]
                175
                a[3,:]
176
          a[4,:]
                = [5./12, 0., -25./16, 25./16., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0]
177
          a[5,:]
                = [1./20, 0., 0., 1./4, 1./5, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.]
178
          a[6,:]
                = [-25./108, 0., 0., 125./108, -65./27, 125./54, 0., 0., 0., 0., 0.,
179
                = [ 31./300, 0., 0., 0., 61./225, -2./9, 13./900, 0., 0., 0., 0., 0.,
          a[7,:]
180
                = [2., 0., 0., -53./6, 704./45, -107./9, 67./90, 3., 0., 0., 0., 0.,
          a[8,:]
181
          a[9,:]
                = [-91./108, 0., 0., 23./108, -976./135, 311./54, -19./60, 17./6, -1.
182
          a[10,:] = [2383./4100, 0., 0., -341./164, 4496./1025, -301./82, 2133./4100,
183
          a[11,:] = [3./205, 0., 0., 0., 0., -6./41, -3./205, -3./41, 3./41, 6./41, 0.
184
          a[12,:] = [-1777./4100, 0., 0., -341./164, 4496./1025, -289./82, 2193./4100,
185
186
          b[:] = [41./840, 0., 0., 0., 34./105, 9./35, 9./35, 9./280, 9./280, 41.
187
          bs[:] = [0., 0., 0., 0., 34./105, 9./35, 9./35, 9./280, 9./280, 0., 41./
188
189
       else:
190
               print("Butcher array not avialale for order =", q)
191
               exit()
192
193
       #return (a, b, bs, c)
                                                                         83
194
       return a, b, bs, c
```

Esquemas temporales

Un esquema temporal es una forma de avanzar en el tiempo para resolver ecuaciones diferenciales, como por ejemplo, como cambia la posición y la velocidad de un objeto que se está moviendo. En vez de calcularlo todo de golpe lo hacemos paso a paso en intervalos de tiempo pequeños.

En este código se implementan diferentes esquemas temporales:

- Euler: toma el estado actual y avanza un paso usando las derivadas actuales
- Euler inverso: Versión mas avanzada, en lugar de usar el estado actual para calcular el siguiente estado, usa un método iterativo para encontrar el próximo estado, lo que lo hace más preciso
- Crank-Nicolson: Esquema mas complej que promedia la tasa de cambio entre el estado actual y el siguiente
- Runge-Kutta de 4º orden (RK4): Toma varias aproximaciones dentro de un mismo paso de tiempo(4aproximaciones),calculando promedios de varias derivadas intermedias. No tienen control de error adaptativo, por lo que no ajusta automáticamente el tamaño de dt.
- Runge-Kutta embebido: es una variante mas avanzada que calcula dos soluciones simultáneamente en cada paso, una
 de mayor orden y otra de menor orden, usa estos dos resultados para estimar el error del paso actual y ajustar el tamaño
 del paso de tiempo dt. Si el error es muy grande reduce dt, si es pequeño puede aumentarlo, lo que lo hace mas eficiente
 y estable

Código

El código implementa **esquemas numéricos** (como Euler, Runge-Kutta, etc.) para resolver **ecuaciones diferenciales** mediante la integración temporal. Estos métodos permiten simular cómo evoluciona un sistema dinámico (como órbitas, sistemas físicos, etc.) avanzando en pequeños pasos de tiempo. El usuario elige el esquema que quiere usar y define la función que describe el sistema a resolver.

En el código no está incluida la **función que describe el sistema** (la ecuación diferencial). El código espera que esa función se pase como un argumento cuando uses los **esquemas temporales**.