

INSTITUTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE



IMT3410: Métodos para ecuaciones diferenciales

Clase 6

Manuel A. Sánchez 2024.08.26

A-estabilidad de métodos de Runge-Kutta

A-estabilidad de métodos de Runge-Kutta

Consideremos el siguiente problema de valor inicial, donde $f(x, y) = \lambda y$, esto es,

$$y' = \lambda y, \qquad y(0) = 1.$$

Sea

$$\xi_{j} = y_{n} + h\lambda \sum_{i=1}^{s} a_{ij}\xi_{i}$$
 , $j = 1, 2, ..., s$

Si definimos
$$\xi=egin{bmatrix} \xi_1 \ dots \ \xi_s \end{bmatrix}$$
, $\mathbf{1}=egin{bmatrix} 1 \ dots \ \end{bmatrix}\in\mathbb{R}^s$ y $A=(a_{ij})$, entonces

$$\xi = \mathbf{1}y_n + h\lambda A\xi \implies \xi = (I - h\lambda A)^{-1}\mathbf{1}y_n$$

Asuma que $(I - h\lambda A)$ es no singular (si no, no se podrá resolver!). Entonces

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda \sum_{i=1}^{s} b_i \xi_i = (1 + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} \mathbf{1}) y_n$$

Aproximaciones racionales y RK

Definición

Definimos el conjunto de funciones racionales como

$$\mathbb{P}_{\alpha/\beta} := \{p/q \text{ funciones racionales, con } p \in \mathbb{P}_{\alpha}, \ q \in \mathbb{P}_{\beta}\}$$

Lema

Para cada método de Runge-Kutta de s-etapas existe $r \in \mathbb{P}_{s/s}$ tal que

$$y_n = (r(h\lambda))^n$$
, $n = 0, 1, ...$

Además, si el método es explícito, entonces $r \in \mathbb{P}_s$ (i.e., r no es racional, sino que un polinomio de grado s).

Demostración

Anteriormente teniamos: $y_{n+1} = y_n + h\lambda \sum_{j=1}^s b_j \xi_j = \left(1 + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} \mathbf{1}\right) y_n$

Entonces $r: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$:

$$r(z) := 1 + zb^{\mathsf{T}}(I - zA)^{-1}\mathbf{1}$$
, $z \in \mathbb{C}$

satisface $y_n = (r(h\lambda))^n$. Debemos demostrar que $r \in \mathbb{P}_{s/s}$. Recuerde que:

$$\square (I-zA)^{-1} = \frac{\operatorname{adj}(I-zA)}{\det(I-zA)}$$

$$lacksquare$$
 $b^T \operatorname{\mathsf{adj}}(\mathit{I} - \mathit{zA}) 1 \in \mathbb{P}_{s-1}$ y que $\det(\mathit{I} - \mathit{zA}) \in \mathbb{P}_s$

Por lo tanto $r(z) \in \mathbb{P}_{s/s}$.

Por último si A es estrictamente triangular inferior, entonces I - zA es triangular inferior con 1s en la diagonal, y así $\det(I - zA) = 1$.

Lema

Lemma

Suponga que una aplicación de un método numérico a la ecuación $y'=\lambda y$ produce una sucesión

$$y_n = (r(h\lambda))^n$$
 , $n = 0, 1, ...$

donde r es una función arbitraria. Entonces la región de estabilidad del método está dado por:

$$\mathcal{D} = \{ z \in \mathbb{C} : |r(z)| < 1 \}$$

La demostración de este lema es trivial por la definición de A-estabilidad.

Runge-Kutta explícito

Corollary

Ningún ERK (método de Runge-Kutta explícito) es A-estable.

Demostración Sabemos que para ERK, $r \in \mathbb{P}_s$ y además que r(0) = 1. Sin embargo, los polinomios no puedes ser acotados por 1, excepto el polinomio constante r(z) = c, $c \in (-1,1)$. Por lo tanto, no puede ser A-estable.

Ejemplos

Considere la siguiente forma general para el método de Runge-Kutta:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(x_n + c_j h, \xi_j), \qquad \xi_j = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{jj} f(x_n + c_i h, \xi_i)$$

1) Euler explícito

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$
 \Rightarrow $s = 1$ $\frac{c_1 | a_{11}}{|b_1|} = \frac{0 | 0}{|1|}$

Como el método tiene un solo término de f, entonces s=1. Igualando la forma de Euler explícito vemos que $f(x_n,y_n)=b_1f(x_n+c_1h,\xi_1)$, por lo que se debe cumplir que $b_1=1$, $x_n+c_1h=x_n \Rightarrow c_1=0$ y que $\xi_1=y_n$. Para esto último, se debe tener $a_{11}=0$. De ahí los valores del diagrama de arriba.

Aquí la función racional r sería

$$r(z) = 1 + zb^{T}(I - zA)^{-1}\mathbf{1} = 1 + z$$

Ejemplos

2) Regla trapezoidal
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f_n + f_{n+1}), \quad \xi_1 = y_n, \quad \xi_2 = y_{n+1}$$

Entonces: $s = 2, \quad \frac{0 \mid 0 \quad 0}{1 \mid 1/2 \quad 1/2}, \quad y \quad r(z) = 1 + zb^T (I - zA)^{-1} = \frac{1 + \frac{1}{2}z}{1 - \frac{1}{2}z}$

En efecto, $(I - zA)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -z/2 & 1 - z/2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{z/2}{1 - z/2} & \frac{1}{1 - z/2} \end{bmatrix}$

$$r(z) = 1 + z \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{z/2}{1 - z/2} & \frac{1}{1 - z/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 + \frac{z}{2} \left(1 + \frac{z}{2} \left(\frac{1}{1 - z/2} \right) + \frac{1}{1 - z/2} \right)$$

$$= 1 + \frac{z}{2} \left(1 + \left(1 + \frac{z}{2} \right) \left(\frac{1}{1 - z/2} \right) \right) = \left(1 + \frac{z}{2} \right) + \left(1 + \frac{z}{2} \right) \left(\frac{z/2}{1 - z/2} \right)$$

$$= \left(1 + \frac{z}{2} \right) \left(1 + \frac{z/2}{1 - z/2} \right) = \frac{1 + z/2}{1 - z/2}.$$

Ejemplos

3) Runge-Kutta implícito.

$$\frac{0}{2/3} \frac{1/4}{1/4} \frac{-1/4}{5/12} \qquad x(1-z/4) + y(z/4) = 1 \\
-xz/4 + y(1-5z/12) = 0$$

$$(I-zA)^{-1} = \begin{pmatrix} 1-z/4 & z/4 \\ -z/4 & 1-5z/12 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{2(z^2-4z+6)} \begin{pmatrix} 12-5z & -3z \\ 3z & 12-3z \end{pmatrix}$$

$$r(z) = 1+z \begin{pmatrix} 1/4 \\ 3/4 \end{pmatrix}^T \frac{1}{2(z^2-4z+6)} \begin{pmatrix} 12-5z & -3z \\ 3z & 12-3z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= 1+\frac{z/8}{z^2-4z+6} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 12-8z \\ 12 \end{pmatrix} = 1-\frac{z/2}{z^2-4z+6} (3-2z+9)$$

$$= \frac{z^2-4z+6+6z-z^2}{z^2-4z+6} = \frac{2z+6}{z^2-4z+6} = \frac{1+z/3}{1-2z/3+z^2/6}$$

Ejemplo 3 continuación

A-estabilidad:
$$z = \rho e^{i\theta} = \rho(\cos\theta + i\sin\theta)$$
, entonces $r(z) = \frac{1+\rho e^{i\theta}/3}{1-2/3(\rho e^{i\theta})+\rho^2 e^{2i\theta}/6}$ $|r(z)| < 1 \rightarrow |1+\rho e^{i\theta}/3| < |1-2/3(\rho e^{i\theta})+\rho^2 e^{2i\theta}/6|$ $|1+\rho e^{i\theta}/3|^2 = (1+\frac{\rho}{3}\cos\theta)^2 + (\frac{\rho}{3}\sin\theta)^2$ $= 1+\frac{2}{3}\rho\cos\theta + \frac{\rho^2}{9}\cos^2\theta + \frac{\rho^2}{9}\sin^2\theta = 1+\frac{2}{3}\rho\cos\theta + \frac{\rho^2}{9}$ $|1-2/3(\rho e^{i\theta})+\rho^2 e^{2i\theta}/6| = \left(1-\frac{2}{3}\rho\cos(\theta)+\frac{\rho^2}{6}\cos(2\theta)\right)^2 + \left(-\frac{2}{3}\rho\sin(\theta)+\frac{\rho^2}{6}\sin(2\theta)\right)^2$ $= 1+2\left(-\frac{2}{3}\rho\cos(\theta)+\frac{\rho^2}{6}\cos(2\theta)\right) + \left(-\frac{2}{3}\rho\cos(\theta)+\frac{\rho^2}{6}\cos(2\theta)\right)^2 + \frac{4}{9}\rho^2\sin^2(\theta) - 2\cdot\frac{2}{3}\rho\sin(\theta)\cdot\frac{\rho^2}{6}\sin(2\theta) + \frac{\rho^4}{36}\sin^2(2\theta)$

Ejemplo 3 continuación

$$\begin{split} |1-2/3(\rho e^{i\theta}) + \rho^2 e^{2i\theta}/6| &= 1 - \frac{4}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{\rho^2}{3}\cos(2\theta) + \frac{4}{9}\rho^2\cos^2(\theta) - \frac{2}{9}\rho^3\cos(\theta)\cos(2\theta) \\ &+ \frac{\rho^4}{36}\cos^2(2\theta) + \frac{4}{9}\rho^2\sin^2(\theta) - \frac{2}{9}\rho^3\sin(\theta)\sin(2\theta) + \frac{\rho^4}{36}\sin^2(2\theta) \\ &= 1 + \frac{4}{9}\rho^2 + \frac{\rho^4}{36} - \frac{4}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{\rho^2}{3}\cos(2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3(\cos(\theta)\cos(2\theta) + \sin(\theta)\sin(2\theta)) \\ &= 1 + \frac{4}{9}\rho^2 + \frac{\rho^4}{36} - \frac{4}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{\rho^2}{3}\cos(2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3\cos(\theta)(\cos(2\theta) + 2\sin^2(\theta)) \\ &= 1 + \frac{4}{9}\rho^2 + \frac{\rho^4}{36} - \frac{4}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{\rho^2}{3}\cos(2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3\cos(\theta)(\cos(2\theta) + 1 - \cos(2\theta)) \\ &= 1 + \frac{4}{9}\rho^2 + \frac{1}{36}\rho^4 - \frac{4}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{1}{3}\rho^2\cos(2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3\cos(\theta) \end{split}$$

Ejemplo 3 continuación

Por lo tanto $|r(z)| = |r(\rho e^{i\theta})| < 1$ si

$$1 + \frac{2}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{\rho^2}{9} < 1 + \frac{4}{9}\rho^2 + \frac{1}{36}\rho^4 - \frac{4}{3}\rho\cos(\theta) + \frac{1}{3}\rho^2\cos(2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3\cos(\theta)$$

$$\cos(\theta) \left(\frac{2}{3}\rho + \frac{4}{3}\rho + \frac{2}{9}\rho^3\right) < \frac{\rho^2}{3}\left(1 + \cos(2\theta)\right) + \frac{1}{36}\rho^4$$

$$\underbrace{\cos(\theta)}_{<0} \left(1 + \frac{\rho^2}{9}\right) 2\rho < \frac{\rho^2}{3}\underbrace{\left(1 + \cos(2\theta)\right)}_{>0} + \frac{1}{36}\rho^4 \quad \checkmark\checkmark$$

Se tiene A-estabilidad si $|\theta + \pi| < \pi/2$, y en este rango se cumple que $\cos(\theta) < 0$, por lo que podemos afirmar que el método es A-estable.

Ejercicio

4) Analice la A-estabilidad del siguiente método de Runge-Kutta implícito

RK

Nota: Observamos que no es necesario verificar que para todo $z \in \mathbb{C}^-$ una función r racional dada origina a un método A-estable. (Decimos esta última propiedad que r es **A-aceptable**).

Lema

Sea r una función racional que no es constante. Entonces, |r(z)| < 1 para todo $z \in \mathbb{C}^-$ si y solo si todos los polos de r tienen parte real positiva $y |r(ix)| \le 1$ para todo $x \in \mathbb{R}$.

Ejemplo:

Considere $r(z) = \frac{1+z/3}{1-2z/3+z^2/6}$. Veamos que satisface las condiciones del Lema. Calculamos los polos:

$$(1 - \frac{2z}{3} + \frac{z^2}{6}) = 0 \implies z = \frac{2/3 \pm \sqrt{4/9 - 4/6}}{2} = \frac{2/3 \pm 1/3 \cdot i\sqrt{2}}{2/6} = 2 \pm i\sqrt{2}$$

$$|r(ix)| \le 1 \iff |1 + ix/3| \le |1 - 2ix/3 - x^2/6|$$

$$\iff 1 + x^2/9 \le (1 - x^2/6)^2 + (2x/3)^2$$

$$\iff 1 + x^2/9 \le 1 - x^2/3 + x^4/36 + 4x^2/9$$

$$\iff 1 + x^2/9 \le 1 + x^2/9 + x^4/36$$

Métodos IRK (Runge-Kutta implícito) de

Gauss-Legendre

Métodos de Runge-Kutta implícitos

$$\xi_j = y_n + h \sum_{i=1}^s a_{ji} f(x_n + c_i h, \xi_i), \quad y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(t_n + c_j h, \xi_j)$$

Observe que la condición $\sum_{i=1}^{s} a_{ji} = c_{j}, \quad j = 1, 2, ..., s,$

es necesaria para que el método converja con orden mayor o igual que 1.

Ejemplo IRK de dos fases

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 1/4 & -1/4 \\
2/3 & 1/4 & 5/12 \\
\hline
& 1/4 & 3/4
\end{array}$$

Es convergente de orden 3.

$$\xi_1 = y_n + h\left(\frac{1}{4}f(t_n, \xi_1) + -\frac{1}{4}f(t_n + \frac{2}{3}h, \xi_2)\right)$$

$$\xi_2 = y_n + h\left(\frac{1}{4}f(t_n, \xi_1) + \frac{5}{12}f(t_n + \frac{2}{3}h, \xi_2)\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{1}{4}f(t_n, \xi_1) + \frac{3}{4}f(t_n + \frac{2h}{3}, \xi_2)\right)$$

Métodos IRK de Gauss-Legendre

Este tipo de métodos rienen s fases y son de orden 2s. Considere el PVI

$$y' = f(x, y)$$
 , para $x \ge x_0$; $y(x_0) = y_0$

Teniendo (x_n, y_n) queremos (x_{n+1}, y_{n+1}) , con $x_{n+1} = x_n + h$. Buscamos un polinomio $u \in \mathbb{P}_s$ tal que

$$u(x_n) = y_n$$

 $u'(x_n + c_j h) = f(x_n + c_j h, u(x_n + c_j h))$, $j = 1, 2, ..., s$

Un método de **colocación** consiste en encontrar un *u* y hacer

$$y_{n+1}=u(x_{n+1})$$

Manuel A. Sánchez 20/

Colocación

Lema

Sean

$$q(x) := \prod_{i=1}^s (x-c_i), \qquad q_\ell(x) = rac{q(x)}{x-c_\ell} \qquad ; \; \ell=1,...,s$$

y sean

$$a_{ji}:=\int_0^{c_j}rac{q_i(au)}{q_i(c_i)}d au, \qquad b_j:=\int_0^1rac{q_j(au)}{q_j(c_j)}d au \qquad ; \ i,j=1,...,s.$$

El método de colocación es idéntico al método IRK.

Manuel A. Sánchez 21/

Demostración

Sea el polinomio de interpolación de **Lagrange** $r(x) := \sum_{\ell=1}^{3} \frac{q_{\ell}((x-x_n)/h)}{q_{\ell}(c_{\ell})} w_{\ell}.$

Este satisface $r(x_n + c_{\ell}h) = w_{\ell}$, $\ell = 1, 2, ..., s$.

Si escogemos $w_\ell = u'(x_n + c_\ell h)$, $\ell = 1, 2, ..., s$, entonces r y u', dos polinomios de \mathbb{P}_{s-1} , coinciden en s-puntos, por lo tanto r = u', es decir

$$u'(x) = \sum_{\ell=1}^{s} \frac{q_{\ell}((x-x_n)/h)}{q_{\ell}(c_{\ell})} f(x_n + c_{\ell}h, u(x_n + c_{\ell}h))$$

Integramos u:

$$u(x) = y_n + \int_{x_n}^{x} \sum_{l=\ell}^{s} f(x_n + c_{\ell}h, u(x_n + c_{\ell}h)) \frac{q_{\ell}((\tau - x_n)/h)}{q_{\ell}(c_{\ell})} d\tau$$

$$= y_n + h \sum_{\ell=1}^{s} f(x_n + c_{\ell}h, u(x_n + c_{\ell}h)) \int_{0}^{(x-x_n)/h} \frac{q_{\ell}(\tau)}{q_{\ell}(c_{\ell})} d\tau$$

Demostración

Sea $\xi_j := u(x_n + c_j h)$, para j = 1, 2, ..., s. Si reemplazamos $x = x_n + c_j h$ obtenemos que:

$$\xi_j = y_n + h \sum_{l=1}^s f(x_n + c_l h, u(x_n + c_l h)) a_{ji}$$

Finalmente, al reemplazar en $x = x_{n+1}$ obtenemos que

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^{s} b_j f(x_n + c_j h, \xi_j)$$

Todos los RK son de colocación?

Remark

No todo método de Runge-Kutta se origina a partir de un método de colocación.

Por ejemplo, para s=2 y $c_1=0$, $c_2=2/3$. Esto implica que

$$q(t) = t(t-2/3), \quad q_1(t) = t-2/3, \quad q_2(t) = t$$

De donde el diagrama de Butcher del método tiene que ser

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 \\
2/3 & 1/3 & 1/3 \\
\hline
& 1/4 & 3/4
\end{array}$$

Por lo tanto el método del comienzo de esta sección no puede ser de colocación.

Orden método de colocación

Teorema

Suponga que

$$\int_0^1 q(\tau) \tau^j d\tau = 0, \qquad j = 0, 1, ..., m-1$$

para algún $m \in \{0, ..., s\}$. Entonces el método de colocación es de orden s + m.

Corollary

Sean c_1 , c_2 , ..., c_s los ceros del polinomio $\tilde{P}_s \in \mathbb{P}_s$ que son ortogonal con respecto a la función peso $w(x) \equiv 1$. Entonces el método de colocación es de orden 2s.

Polinomios de Gauss-Legendre en [0, 1]:

$$\tilde{P}_s(x) = \frac{(s!)^2}{(2s)!} \sum_{k=0}^{s} (-1)^{s-k} {s \choose k} {s+k \choose k} x^k$$

Ejemplos: Métodos de Gauss-Legendre

$$ightharpoonup s=1, \quad ilde{P}_1(x)=x-rac{1}{2}.$$
 Aśi $c_1=rac{1}{2}, \ \mathbf{y} - rac{1/2 \ | \ 1/2}{| \ 1}$ Regla del punto medio implícito.

Manuel A. Sánchez 26/32

Lema auxiliar para probar oden

Lema

Suponga que la sucesión $\{y_n\}$ la cual es generada aplicando un método de orden p a la ecuación lineal

$$y' = \lambda y, \qquad y(0) = 1$$

con paso constante y con $y_n = r(\lambda h)^n$. Entonces

$$r(z) = \exp(z) + \mathcal{O}(z^{p+1}), \quad z \to 0$$

Demostración Lema

Como $y_{n+1} = r(\lambda h)y_n$, y la solución exacta, comenzando en $y(t_n) = y_n$, es $\exp(\lambda h)y_n$, entonces

$$r(z) = \exp(z) + \mathcal{O}(z^{p+1})$$

por definición de orden. Así, decimos que r es de orden p.

Teorema

Teorema

Dados los enteros $\alpha, \beta \geq 0$, existe una única función $\hat{r}_{\alpha/\beta}$ tal que:

$$\hat{r}_{lphaeta}=rac{\hat{p}_{lphaeta}}{\hat{q}_{lphaeta}}, \qquad \hat{q}_{lpha/eta}(0)=1,$$

y $\hat{r}_{\alpha/\beta}$ es de orden $\alpha + \beta$. Las fórmulas de los polinomios del numerador y denominador son

$$\hat{p}_{\alpha/\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\alpha} {\alpha \choose k} \frac{(\alpha+\beta-k)!}{(\alpha+\beta)!} z^k$$

$$\hat{q}_{\alpha/\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\beta} \frac{(\alpha+\beta-k)!}{(\alpha+\beta)!} (-z)^k = \hat{p}_{\alpha/\beta}(-z)$$

Además, $\hat{r}_{\alpha/\beta}$ es el único elemento de $\mathbb{P}_{\alpha/\beta}$ de orden $\alpha+\beta$ y ninguna función en $\mathbb{P}_{\alpha/\beta}$ puede exceder este orden

Observación: aproximaciónes de Padé

Las funciones $\hat{r}_{\alpha/\beta}$ son llamadas aproximaciones de Padé de la exponencial. Muchas de las funciones r que hemos visto son de este tipo:

$$\hat{r}_{1/0}(z) = 1 + z, \qquad \hat{r}_{1/1}(Z) = \frac{1 + z/2}{1 - z/2}, \qquad \hat{r}_{1/2}(z) = \frac{1 + z/3}{1 - 2z/2 + z^2/6}.$$

Definición

Decimos que una función r es llamada **A-aceptable** si esta origina un método A-estable

Las aproximaciones de Padé pueden ser clasificadas de acuerdo a esta definición. De inmediato observaos que la condición $\alpha \leq \beta$ es necesaria. Pero observe que esta condición no es suficiente. Por ejemplo, $\hat{r}_{0/3}$ no es A-aceptable.

Teorema de Wanner - Hairer - Norsett

Teorema

La aproximación de Padé $\hat{r}_{\alpha/\beta}$ es A-estable si y sólo si $\alpha \leq \beta \leq \alpha + 2$.

Corollary

Los métodos IRK de Gauss-Legendre son A-estables para cada $s \ge 1$.

Demostración.

Un método de Gauss-Legendre de s-fases es de orden 2s. Así, la función r asociado pertenece a $\mathbb{P}_{s/s}$ y luego aproxima a la exponencial a orden 2s. Así, este



INSTITUTO DE INGENIERÍA Matemática y computacional

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE