INSTITUTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CHILE

IMT3410: Métodos para ecuaciones diferenciales

Clase 3

Manuel A. Sánchez
2024.08.14

Preguntas

- ¿Es el método de Euler explícito convergente?
- ¿Cual es el orden de precisión del método de Euler?

Preguntas

- ¿Es el método de Euler explícito convergente?
- ¿Cual es el orden de precisión del método de Euler?

El método de Euler es convergente, ya que este es consistente y tiene cota de Lipschitz.

Preguntas

- ¿Es el método de Euler explícito convergente?
- ¿Cual es el orden de precisión del método de Euler?

El método de Euler es convergente, ya que este es consistente y tiene cota de Lipschitz. Observamos que

$$|T_n| = |hy''(\xi_n)| \leq Kh, \quad K \text{ es independiente de } h$$

Método de la Regla del Trapecio

La regla trapezoidal es un método de paso simple definido por la iteración

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}))$$

Observe que el método se deriva de

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)\, dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))\, dx$$

Proposición

El orden de la regla trapezoidal es $p = 2$.

Demostración

Error de truncación:

$$T_n = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - \Phi(x_n, y(x_n); h)$$
$$= \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - \frac{1}{2}(f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1})))$$

Por Taylor

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2}y''(x_n) + O(h^3)$$
$$y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$$
$$f(x_{n+1}, y(x_{n+1})) = y'(x_{n+1}) = y'(x_n) + hy''(x_n) + O(h^2)$$

Demostración

Entonces

$$\begin{aligned} T_n &= (y'(x_n) + \frac{h}{2}y''(x_n) + O(h^2)) - \frac{1}{2}(y'(x_n) + y'(x_n) + hy''(x_n) + O(h^2)) \\ &= O(h^2). \end{aligned}$$

Más específicamente:

$$|T_n| \leq \frac{1}{12} \max_{x\in[x_0,x_M]} |y'''(x)|h^2.$$

Regla trapezoidal

Proposición

La Regla trapezoidal es convergente.

Encontremos la constante de Lipschitz L_Φ. Primero, observemos que:

$$h\,\Phi(x_n, y_n; h) = \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})) = \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_n + h\,\Phi(x_n, y_n; h)))$$

Así

$$\begin{aligned}
&|\Phi(x_n, u; h) - \Phi(x_n, v; h)| \\
&= \frac{1}{2}|f(x_n, u) + f(x_n + h, u + h\,\Phi(x_n, u; h)) - f(x_n, v) - f(x_n + h, v + h\,\Phi(x_n, v; h))| \\
&\leq \frac{1}{2}|f(x_n, u) - f(x_n, v)| + \frac{1}{2}|f(x_n + h, u + h\,\Phi(x_n, u; h)) - f(x_n + h, v + h\,\Phi(x_n, v; h))| \\
&\leq \frac{1}{2}L_f|u - v| + \frac{1}{2}L_f|u + h\,\Phi(x_n, u; h) - v - h\,\Phi(x_n, v; h)|
\end{aligned}$$

Demostración

$$|\Phi(x_n, u; h) - \Phi(x_n, v; h)| \leq \frac{1}{2} L_f |u - v| + \frac{1}{2} L_f |u - v| + \frac{1}{2} L_f h |\Phi(x_n, u; h) - \Phi(x_n, v; h)|$$

De donde tenemos que:

$$|\Phi(x_n, u; h) - \Phi(x_n, v; h)| \leq \frac{L_f}{1 - hL_f/2} |u - v|$$

Por lo tanto, si $1 - hL_f/2 > 0$, podemos tomar $L_\Phi \leq \frac{L_f}{1 - hL_f/2}$.

Consistencia

$$\Phi(x, y; 0) = \frac{1}{2}(f(x, y) + f(x, y)) = f(x, y)$$

Además

$$|e_n| \leq \frac{T}{L_\Phi}(e^{L_\Phi(x_n - x_0)} - 1) \xrightarrow[h \to 0]{} 0$$

Implementación de la regla trapezoidal

La regla trapezoidal:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})\right)$$

Dado la iteración y_n, como resolvemos para y_{n+1}?

Implementación de la regla trapezoidal

La regla trapezoidal:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})\right)$$

Dado la iteración y_n, como resolvemos para y_{n+1}? Este método corresponde a un método **implícito**, necesitamos resolver para y_{n+1}.

Implementación de la regla trapezoidal

La regla trapezoidal:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})\right)$$

Dado la iteración y_n, como resolvemos para y_{n+1}? Este método corresponde a un método **implícito**, necesitamos resolver para y_{n+1}.

Método de Newton-Raphson (encontrar aproximaciones de raíces de una función real):

Resolver para z: $$F(z) = y_n + \frac{h}{2}\left(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, z)\right) - z = 0$$

$$z^{(k+1)} = z^{(k)} - \frac{F(z^{(k)})}{F'(z^{(k)})}, \quad \text{con } z^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

Necesitamos calcular $F'(z^{(k)})$, es decir $\frac{\partial f}{\partial y}(z^{(k)})$.

Problema no lineal, caso vectorial.

Resolver el problema no lineal $F(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$, para $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$.

- Newton-Raphson: $\mathbf{z}^{(k+1)} = z^{(k)} - \left(\nabla F(z^{(k)})\right)^{-1} F(\mathbf{z}^{(\mathbf{k})})$
- Métodos de quasi-Newton: $J_k \approx \nabla F(\mathbf{z}^{(k)})$. Broyden 1965.

$$
\begin{aligned}
\Delta\mathbf{z}^{(k)} &= \mathbf{z}^{(k)} - \mathbf{z}^{(k-1)} \\
\Delta F_k &= F(\mathbf{z}^{(k)}) - F(\mathbf{z}^{(k-1)}) \\
J_k &= J_{k-1} + \frac{\Delta F_k - J_{k-1}\Delta\mathbf{z}_k}{\|\Delta\mathbf{z}_k\|^2}\Delta\mathbf{z}_k^\top \\
J_k^{-1} &= J_{k-1}^{-1} + \frac{\Delta z_k - J_{k-1}^{-1}\Delta F_k}{\|\Delta F_k\|^2}\Delta F_k^\top \\
z^{(k+1)} &= z^{(k)} - J_k^{-1} F(z^{(k)})
\end{aligned}
$$

Problema no lineal, caso vectorial.

- BFGS.

$$J_k = J_{k-1} + \frac{\Delta F_k \Delta F_k^\top}{\Delta F_k^\top \Delta z_k} - \frac{J_{k-1}\Delta z_k (J_{k-1}\Delta z_k)^\top}{\Delta z_k^\top J_{k-1} \Delta z_k}$$

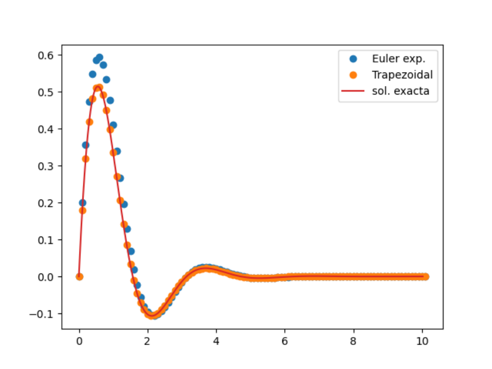
$$J_k^{-1} = \left(I - \frac{\Delta z_k \Delta F_k^\top}{\Delta F_k^\top \Delta z_k}\right) J_{k-1}^{-1} \left(I - \frac{\Delta F_k \Delta z_k^\top}{\Delta z_k^\top \Delta F_k}\right) + \frac{\Delta z_k \Delta z_k^\top}{\Delta F_k^\top \Delta z_k}$$

```
from scipy.optimize import fmin\_bfgs
```

Ejemplo 1. Cuando todo funciona

Consideremos el siguiente PVI: $\quad y' = -y + 2\exp(-t)\cos(2t), \quad y(0) = 0.$
Comparamos los dos métodos vistos hasta ahora

- $y^{n+1} = y^n + h(-y^n + 2\exp(-t_n)\cos(2t_n))$
- $(1 + \frac{h}{2})y^{n+1} = (1 - \frac{h}{2})y^n + \frac{h}{2}(2\exp(-t_n)\cos(2t_n) + 2\exp(-t_{n+1})\cos(2t_{n+1}))$



Ejemplo 2.

Consideremos el siguiente PVI

$$y' = \ln(3)\left(y - \lfloor y \rfloor - \frac{3}{2}\right), \quad y(0) = 0$$

solución exacta: $y(x) = -\lfloor x \rfloor + \frac{1}{2}(1 - 3^{x-\lfloor x \rfloor}), \quad x \geq 0$

Ejercicios

1. Derive la regla del punto medio implícito

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{1}{2}h, \frac{1}{2}(y_n + y_{n+1}))$$

   Pruebe que es de orden 2 y convergente.

2. La forma general, método theta

$$y_{n+1} = y_n + (\Delta t)(\theta f(t_n, y_n) + (1-\theta) f(t_{n+1}, y_{n+1})), \quad \theta \in [0, 1]$$

   1. $\theta = 1 \longrightarrow$ Euler explícito
   2. $\theta = \frac{1}{2} \longrightarrow$ Regla trapezoidal
   3. $\theta = 0 \longrightarrow$ Euler implícito

   es convergente y de orden 1 si $\theta \neq \frac{1}{2}$.

Métodos de Runge-Kutta

Métodos de Runge-Kutta

Carl Runge, Martin Wilhelm Kutta $\sim$ 1900.

Aproximación de orden más alto. Nuestro objetivo es introducir métodos de paso simple con orden precisión mas alto. Para ilustrar su derivación, observemos lo siguiente

$$
\begin{aligned}
y(x_{n+1}) &= y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(\tau, y(\tau))d\tau \\
&= y(x_n) + h\int_0^1 f(x_n + \tau h, y(x_n + \tau h))d\tau
\end{aligned}
$$

Regla de Cuadratura $y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\sum_{i=1}^{s} b_i f(x_n + c_i h, y(x_n + c_i h))$.
En la expresión de arriba aparecen valores desconocidos. La idea de los método de Runge-Kutta es aproximarlos por valores $\xi_j \approx y(x_n + c_j h)$.
Así, escribimos la estructura de la iteración de paso simple con

$$
\Phi(x_n, y_n; h) = \sum_{i=1}^{s} b_i k_i; \qquad k_i = f(x_n + c_i h, \xi_i)
$$

Métodos de Runge-Kutta

Aproximación de orden más alto. Consideremos como primer ejemplo el siguiente esquema

$$\textbf{(RK2)} \qquad y_{n+1} = y_n + h(ak_1 + bk_2), \quad \begin{cases} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + \alpha h, y_n + \beta h k_1) \end{cases}$$

Esto corresponde a un método de paso simple con:

$$\Phi(x_n, y_n; h) = a\, f(x_n, y_n) + b\, f(x_n + \alpha h, y_n + \beta h f(x_n, y_n))$$

Observemos que el método de Euler corresponde a $a = 1$, $b = 0$.

Métodos de Runge-Kutta

Consistencia de RK2:

$$\Phi(x, y; 0) = f(x, y) \longrightarrow \boxed{\text{a + b = 1}}$$

Orden de RK2:

- $y'(x_n) = f(x_n, y(x_n)) = f$
- $y''(x_n) = \dfrac{\partial f}{\partial x} + \dfrac{\partial f}{\partial y} y' = \dfrac{\partial f}{\partial x} + \dfrac{\partial f}{\partial y} f$
- $y'''(x_n) = \dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \left(\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2} f \right) f + \dfrac{\partial f}{\partial y} \left(\dfrac{\partial f}{\partial x} + \dfrac{\partial f}{\partial y} f \right)$

y escribimos

$$\Phi(x_n, y(x_n); h) = af + b\Big(f + \alpha h \frac{\partial f}{\partial x} + \beta h \frac{\partial f}{\partial y} f + \frac{1}{2}(\alpha h)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$
$$+ \alpha\beta h^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{1}{2}(\beta h)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + O(h^3)\Big)$$

Métodos de Runge Kutta

Entonces

$$
\begin{aligned}
T_n &= \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} - \Phi(x_n, y(x_n); h) \\
&= f + \frac{h}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) + \frac{h^2}{6}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} f^2 + \frac{\partial f}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x} f\right)\right) \\
&- (af + b(f + \alpha h \frac{\partial f}{\partial x} + \beta h f \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{1}{2}(\alpha h)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \alpha\beta h^2 f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\
&+ \frac{1}{2}(\beta h)^2 f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2})) + O(h^3).
\end{aligned}
$$

Eliminar $f \longrightarrow 1 - a - b = 0$

Eliminar $h \longrightarrow \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) - b\alpha \frac{\partial f}{\partial x} - b\beta \frac{\partial f}{\partial y} f = 0$

Por lo tanto $b\alpha = b\beta = \frac{1}{2}$.

Métodos de Runge Kutta

El método es de orden $p = 2$ si

$$\beta = \alpha, \quad a = 1 - \frac{1}{2\alpha}, \quad b = \frac{1}{2\alpha}; \quad \alpha \neq 0$$

Pregunta: ¿Puede ser el método de orden $p = 3$?

Ejemplos: Orden $p = 2$

- Euler modificado $(\alpha = \frac{1}{2})$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hf(x_n, y_n))$$

- Euler mejorado $(\alpha = 1)$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n)))$$

Esquema de Runge-Kutta explícitos

Esquemas de Runge-Kutta explícitos

Regla de Cuadratura:

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

No sabemos los valores de $y(x_n + c_j h) \approx \xi_j$. Fórmulas **explícitas**

Aproximaciones:

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= y_n \\
\xi_2 &= y_n + h\, a_{21}\, f(x_n, \xi_1) \\
\xi_3 &= y_n + h\, a_{31}\, f(x_n, \xi_1) + h\, a_{32}\, f(x_n + c_2 h, \xi_2) \\
&\vdots \\
\xi_s &= y_n + h\sum_{i=1}^{s-1} a_{s,i} f(x_n + c_i h, \xi_i)
\end{aligned}$$

para $i = 1, 2, ..., s$, s es el número de pasos del método.

Runge-Kutta explícito

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i$$

$$k_i = f(x_n + c_i h, \xi_i)$$

$$\xi_i = y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(x_n + c_j h, \xi_j)$$

para $i = 1, ..., s.$

Diagrama de Butcher

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

Diagramas de Butchet ERK

$$\sum_{i=1}^{v} a_{ji} = c_j,\ j = 1, \ldots, v, \quad \text{orden } p > 1$$

Ejemplos:

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

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 1/2 & 1/2 & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 2/3 & 2/3 & & \\ 2/3 & 0 & 2/3 & \\ \hline & 1/4 & 3/8 & 3/8 \end{array} \qquad \begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/2 & 1/2 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6 \end{array}$$

Ejercicio

A partir de los diagramas de Butcher anterior escriba los métodos de Runge-Kutta asociados.

Métodos de Runge-Kutta implícitos

Métodos de Runge-Kutta implícitos

$$\xi_j = y_n + h \sum_{i=1}^{s} a_{ji} f\left(x_n + c_i h, \xi_i\right), j = 1, \ldots, v$$

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

Ejemplo:

$$\xi_1 = y_n + \frac{h}{4}(f(x_n, \xi_1) - f(x_n + \frac{2}{3}h, \xi_2))$$

$$\xi_2 = y_n + \frac{h}{12}(5f(x_n, \xi_1) + 5f(x_n + \frac{2}{3}h, \xi_2))$$

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

Diagrama de Butcher

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

INSTITUTO DE INGENIERÍA
MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE