INSTITUTO DE INGENIERÍA
MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CHILE

IMT3410: Métodos para ecuaciones diferenciales

Clase 7

Manuel A. Sánchez

2024.08.28

Integración numérica geométrica

Integración numérica geométrica

Este contenido se ve abordado en el libro: **A first course in the numerical analysis of differential equations**, *Iserles Capítulo 5*.

Otra referencia importante es el libro: **Geometric numerical integration**, *Hairer, Lubich, Wanner*.

Integración numérica geométrica

En muchos problemas físicos es de crucial importancia mantener ciertas propiedades de la solución exacta del PVI. En ciertas ocasiones, se pueden perder al buscar la solución más precisa con el menor costo computacional.

Ejemplo:

$$
\begin{aligned}
y_1' &= y_2 y_3 \sin t - y_1 y_2 y_3 \\
y_2' &= -y_1 y_3 \sin t + \frac{1}{20} y_1 y_3 \\
y_3' &= y_1^2 y_2 - \frac{1}{20} y_1 y_2
\end{aligned}
$$

Observe que

$$y_1 y_1' + y_2 y_2' + y_3 y_3' = 0$$

Por lo tanto:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 \right) = 0$$

Sistemas Hamiltonianos

Sistemas Hamiltonianos

Algunos campos científicos donde son altamente utilizados:

- mecánica
- dinámica molecular
- mecánica de fluidos
- mecánica cuántica
- procesamiento de imágenes
- mecánica celestial
- ingeniería nuclear

Los sistemas Hamiltonianos son una forma de representar la energía que tiene un sistema, siendo la más común la energía mecánica expresada en forma una suma de energía cinética y potencial:

$$H = E_m = T + U$$

Sistemas Hamiltonianos

Ecuaciones de Hamilton: Sean $p(t), q(t) \in \mathbb{R}^d$ solución

$$\dot{p}_i := \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(p,q)}{\partial q_i}$$
$$\dot{q}_i := \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H(p,q)}{\partial p_i}$$

para $i = 1, 2, ..., d$, donde $H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ es el **Hamiltoniano** (energía).

Hamiltoniano constante

Lema

El Hamiltoniano $H(p(t), q(t))$ se mantiene constante a lo largo de la trayectoria de la solución.

Demostración.

$$\frac{\partial H}{\partial t}(p(t), q(t)) = \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \sum_{i=1}^{d} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0$$

Decimos que el Hamiltoniano es invariante.

Ejemplo

Consideremos la familia de ecuaciones diferenciales de orden 2

$$\ddot{y} + a(y) = 0$$

Si definimos las variables $q = y$, $p = \dot{y}$ entonces reescribimos la ecuación como

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p \\ \dot{p} &= -a(q) \end{aligned}$$

Hamiltoniano:

Ejemplo

Consideremos la familia de ecuaciones diferenciales de orden 2

$$\ddot{y} + a(y) = 0$$

Si definimos las variables $q = y$, $p = \dot{y}$ entonces reescribimos la ecuación como

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p \\ \dot{p} &= -a(q) \end{aligned}$$

Hamiltoniano: $$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \int_0^q a(x)dx$$

Ejemplo

Consideremos la familia de ecuaciones diferenciales de orden 2

$$\ddot{y} + a(y) = 0$$

Si definimos las variables $q = y$, $p = \dot{y}$ entonces reescribimos la ecuación como

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p \\ \dot{p} &= -a(q) \end{aligned}$$

Hamiltoniano: $$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \int_0^q a(x)dx$$

Pregunta: La función H es un invariante para la ODE ¿Podemos tener métodos numéricos que lo preservan?

Intuición Geométrica: Método simpléctico

Los sistemas Hamiltonianos tienen otra característica, aún más importante, su flujo es **simpléctico**. Consideremos la ecuación

$$y' = f(y), \quad \text{mapeo de flujo} \quad \varphi_t(y_0) : \; y_0 \to y(t)$$

Esta definición se extiende a conjuntos medibles $\Omega \subset \mathbb{R}^d$:

$$\varphi_t(\Omega) = \{y(t) : y(0) \in \Omega\}$$

Ilustración. Consideremos el la ecuación $y'' + \sin y = 0$, y el conjunto $\Omega := \{y(t) : y(0) \in \Omega\}$

¡Área constante!

Esto es una *manifestación* de la geometría simpléctica; el mapeo de flujo para sistemas Hamiltonianos $d = 1$ preserva área.

Simplecticidad

Definición

Una función $\varphi : \Omega \to \mathbb{R}^{2d}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ *se dice simpléctica si*

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y}(y)^T J \frac{\partial \varphi}{\partial y}(y) = J$$

donde el operador $J \in \mathbb{R}^{2d \times 2d}$ *es el operador antisimétrico canónico* $J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix}$.

Teorema de Poincaré

Teorema

Si $H \in C^2$, entonces el mapeo de flujo φ_t del sistema Hamiltoniano es simpléctico.

Demostración

Reescribimos el sistema Hamiltoniano: $y' = J^{-1}\nabla H(y)$, donde $y = \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$.

Denotamos el Jacobiano de $\varphi_t(y)$ por $\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}$. Observamos que

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi_t(y) = J^{-1}\nabla H(\varphi_t(y)) \implies \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \varphi_t}{\partial y} = J^{-1}\nabla^2 H(\varphi_t(y))\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \varphi_t^T}{\partial y} J \frac{\partial \varphi_t}{\partial y}\right) &= \left(\frac{\partial}{\partial}\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}\right)^T J \frac{\partial \varphi_t}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_t^T}{\partial y} J \left(\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}\right) \\
&= \frac{\partial \varphi_t}{\partial y}(\nabla^2 H(\varphi_t(y)))^T J^{-T} J \frac{\partial \varphi_t}{\partial y} + \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}\right)^T J J^{-1}\nabla^2 H(\varphi_t)\frac{\partial \varphi_t}{\partial y} \\
&= -\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}^T \nabla^2 H(\varphi_t)\frac{\partial \varphi_t}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_t}{\partial y}\nabla^2 H(\varphi_t)\frac{\partial \varphi_t}{\partial y} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Demostración

Entonces

$$\frac{\partial \varphi_t}{\partial y}^T J \frac{\partial \varphi_t}{\partial \varphi} = \frac{\partial \varphi_0}{\partial y}^T J \frac{\partial \varphi_0}{\partial \varphi} = J$$

$\blacksquare$

Observación: Se puede demostrar que si φ_t es un mapeo simpléctico entonces este es el flujo de algún sistema Hamiltoniano.

Métodos numéricos simplécticos

Definición

Un método numérico de paso simple

$$y^{n+1} = \Phi_h(y^n)$$

*se dice **simpléctico** si la función Φ_h es un mapeo simpléctico.*

Observación: Si discretizamos un sistema Hamiltoniano por un método numérico simpléctico entonces este es una solución exacta de algún sistema Hamiltoniano.

$$\ddot{y} + \sin y = 0 \quad \Longrightarrow \quad \begin{bmatrix} p^{n+1} \\ q^{n+1} \end{bmatrix} = \Phi_h\left(\begin{bmatrix} p^{n} \\ q^{n} \end{bmatrix}\right)$$

Con $h = 0.1$ y $t = 10$

Runge-Kutta simplécticos

Teorema

Dado un método de Runge-Kutta con coeficientes

$$A = (a_{ij});\ b = (b_j);\ c = (c_j)$$

definimos $M = (m_{ij})$ *por*

$$m_{ij} = b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j,\ \ i, j = 1, ..., v$$

Entonces si $M = 0$ *el método de RK es* ***simpléctico***.

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

Demostración

Método de RK a $y' = J\nabla H(y)$

$$\xi_k = f(t_n + c_k h, y_n + h\sum_{l=1}^{s} a_{kl}\xi_l),\ k = 1, ..., s, \quad y_{n+1} = y_n + h\sum_{k=1}^{s} b_k\xi_k$$

Sea $\varphi_n = \frac{\partial y_n}{\partial y_0}$, simplecticidad significa que: $\quad \varphi_{n+1}^T J\varphi_{n+1} = \varphi_n^T J\varphi_n,\ n = 0, 1, \ldots$

Sea $x_k = \frac{\partial \xi_k}{\partial y_0}$, $G_k = \nabla^2 H(t_n + c_k h, y_n + h\sum_{l=1}^{s} a_{kl}\xi_l)$ no singulares.

Como $\varphi_{n+1} = \varphi_n + h\sum_{k=1}^{s} b_k x_k$, se sigue que

$$\begin{aligned}\varphi_{n+1}^T J\varphi_{n+1} &= (\varphi_n + h\sum_{k=1}^{s} b_k x_k)^T J(\varphi_n + h\sum_{k=1}^{s} b_k x_k) \\ &= \varphi_n^T J\varphi_n + h\sum_{k=1}^{s} b_k x_k^T J\varphi_n + \sum_{l=1}^{s} b_l\varphi_n^T Jx_l + h^2\sum_{k=1}^{s}\sum_{l=1}^{s} b_k b_l x_k^T Jx_l\end{aligned}$$

Demostración

Observe que $x_K = J^{-1}G_k(\varphi_n + h\sum_{l=1}^{v} a_{kl}x_l)$. Así $\varphi_n = G_k^{-1}Jx_k - h\sum_{l=1}^{s} a_{kl}x_l$

Por lo tanto:

$$\sum_{k=1}^{s} b_k x_k^T J\varphi_n = \sum_{k=1}^{n} b_k x_k^T JG_k^{-1}Jx_k - h\sum_{k=1}^{s}\sum_{l=1}^{s} b_k a_{kl} x_k^T Jx_l$$

$$\sum_{l=1}^{s} b_l \varphi_n^T Jx_l = \sum_{l=1}^{s} b_l x_l^T J^T G_l^{-1}Jx_l - h\sum_{k=1}^{s}\sum_{l=1}^{s} b_l a_{lk} x_k^T Jx_l$$

Como $J^T = -J$ obtenemos que

$$\varphi_{n+1}^T J\varphi_n = \varphi_n^T J\varphi_n - h^2\sum_{k=1}^{s}\sum_{l=1}^{s}(b_k a_{kl} + b_l a_{lk} - b_k b_l)x_k^T Jx_l = \varphi_n^T J\varphi_n$$

Sistemas Hamiltonianos separables

Sistemas Hamiltonianos separables

Consideramos $H(p,q) = T(p) - V(q)$

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q} \\ \dot{q} &= -\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial T}{\partial p} \end{aligned}$$

Es posible discretizar estas ecuaciones usando dos métodos de RK, uno aplicado a la ecuación de $\dot{p}$ y el otro a la de $\dot{q}$.

Ejemplos

1. Euler simpléctico orden 1:

$$p^{n+1} = p^n - h\frac{\partial H}{\partial q}(t^n, p^{n+1}, q^n)$$
$$q^{n+1} = q^n + h\frac{\partial H}{\partial p}(t^n, p^{n+1}, q^n)$$

$$p^{n+1} = p^n - h\frac{\partial H}{\partial q}(t^n, p^n, q^{n+1})$$
$$q^{n+1} = q^n - h\frac{\partial H}{\partial p}(t^n, p^n, q^{n+1})$$

Demostrar que estos métodos son simplécticos.

Ejemplos

1. Stormer-Verlet orden 2

$$
\begin{aligned}
p^{n+1/2} &= p^n - \frac{h}{2}\frac{\partial}{\partial q}H(p^{n+1/2}, q^n) \\
q^{n+1} &= q^n - \frac{h}{2}\left(\frac{\partial}{\partial q}H(p^{n+1/2}, q^n) + \frac{\partial}{\partial q}H(p^{n+1/2}, q^{n+1})\right) \\
p^{n+1} &= p^{n+1/2} - \frac{h}{2}\frac{\partial}{\partial q}H(p^{n+1}, q^{n+1/2})
\end{aligned}
$$

Ejemplos

1. Stormer-Verlet orden 2

$$q^{n+1/2} = q^n + \frac{h}{2}\frac{\partial}{\partial p}H(p^n, q^{n+1/2})$$
$$p^{n+1} = p^n - \frac{h}{2}\left(\frac{\partial}{\partial q}H(p^n, q^{n+1/2}) + \frac{\partial}{\partial q}H(p^{n+1}, q^{n+1/2})\right)$$
$$q^{n+1} = q^n + \frac{h}{2}\frac{\partial}{\partial p}H(p^{n+1}, q^{n+1/2})$$

Ejercicios

Demuestre que los siguientes métodos son simplécticos:

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

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

INSTITUTO DE INGENIERÍA
MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE