Cálculo Numérico - Elementos de Cálculo Numérico
Métodos de un paso

Clase dictada por: Mercedes Pérez Millán

(Dto. de Matemática–FCEyN–Universidad de Buenos Aires,
IMAS-CONICET)

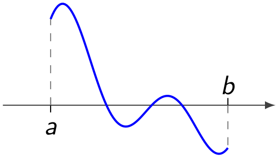
26 de agosto de 2024

Teorema:

f continua, C conexo $\Rightarrow f(C)$ conexo.

Teorema de Bolzano:

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ continua tal que $f(a)f(b) < 0$, entonces existe (al menos) un $r \in (a, b)$ tal que $f(r) = 0$.

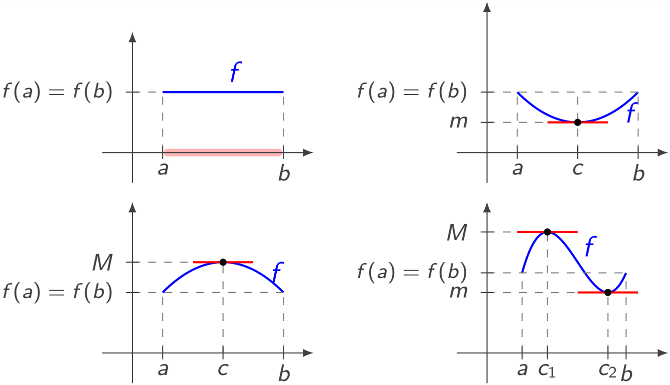


Teorema:

f continua, C compacto $\Rightarrow f(C)$ compacto.

Teorema de Rolle:

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función continua en un intervalo cerrado $[a, b]$, derivable y con derivada continua en el intervalo abierto (a, b), con $a < b$, y tal que $f(a) = f(b)$, entonces existe al menos un valor $c \in (a, b)$ tal que $f'(c) = 0$.

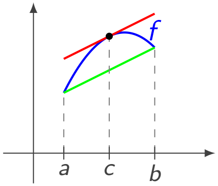


Teorema de Lagrange (o Teorema del Valor Medio):

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función continua en un intervalo cerrado $[a, b]$, derivable y con derivada continua en el intervalo abierto (a, b), con $a < b$, entonces existe al menos un valor $c \in (a, b)$ tal que

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

Se demuestra aplicando el Teorema de Rolle a $g(x) = f(x) - \left(\frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x - a) + f(a)\right)$.



Otra forma del Teorema del Valor Medio (TVM):

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función continua en un intervalo cerrado $[a, b]$, derivable y con derivada continua en el intervalo abierto (a, b), con $a < b$, entonces existe al menos un valor $c \in (a, b)$ tal que

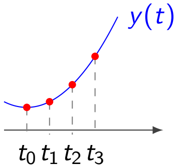
$$\boxed{f(b) - f(a) = f'(c)(b - a).}$$

Problema de valores iniciales

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

Son *pocos* los casos donde podemos encontrar la solución analíticamente, por lo que vamos a estudiar métodos numéricos para aproximar los valores de la solución.

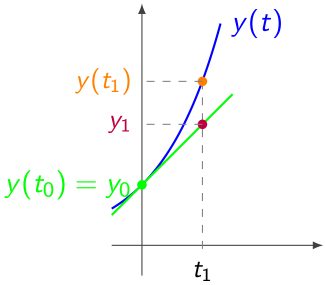
$$(y_0, y_1, y_2, y_3, \ldots) \sim (y(t_0), y(t_1), y(t_2), y(t_3), \ldots)$$



Método de Euler

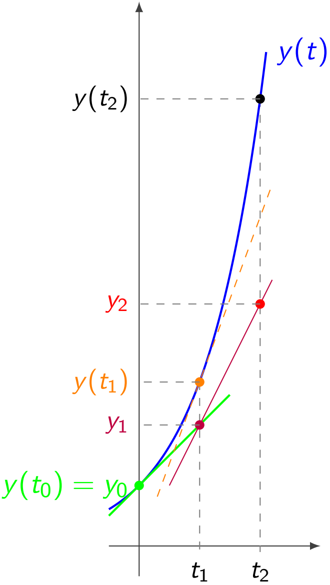
La idea es aproximar el valor de y en t_1 usando el valor de y y su derivada en t_0 por medio del desarrollo de Taylor de primer orden:

$$y(t_1) \sim y_1 = y(t_0) + y'(t_0)(t_1 - t_0) = y(t_0) + f(t_0, y(t_0))(t_1 - t_0)$$



¿Y $y_2 \sim y(t_2)$?

$$y(t_2) \sim t_2 = y_1 + f(t_1, y_1)(t_2 - t_1)$$



Método de Euler

Método:

Sean $h = \frac{T_F - t_0}{N}$, $t_n = t_0 + nh$,

$$\begin{cases} y_0 & = y(t_0) \\ y_{n+1} & = y_n + hf(t_n, y_n) \end{cases}$$

$n = 0, 1, \ldots, N - 1.$

¿Y el error?

Sea

$$\hat{y}_n := y(t_{n-1}) + hf(t_{n-1}, y(t_{n-1})).$$

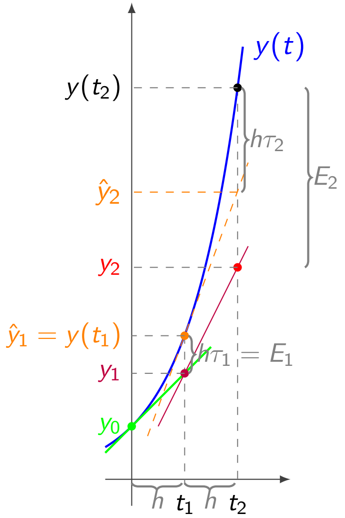
(la recta tangente a y en t_{n-1} evaluada en t_n.)
Definimos

$$h\tau_n := y(t_n) - \hat{y}_n,$$

el *error de truncado local*.
Definimos

$$E_n = y(t_n) - y_n,$$

el *error global*.



Error de truncado local

Recordemos el desarrollo de Taylor de y centrado en t_{n-1}:

$$y(t) = y(t_{n-1}) + y'(t_{n-1})(t - t_{n-1}) + \frac{y''(\theta)}{2}(t - t_{n-1})^2,$$

para θ entre t y t_{n-1}. Como $y'(t_{n-1}) = f(t_{n-1}, y(t_{n-1}))$ y $t_n - t_{n-1} = h$, deducimos:

$$\begin{aligned} h\tau_n &= y(t_n) - \hat{y}_n = y(t_n) - (y(t_{n-1}) + hf(t_{n-1}, y(t_{n-1}))) \\ &= \frac{y''(\theta_n)}{2}h^2, \quad \theta_n \in (t_{n-1}, t_n). \end{aligned}$$

Y podemos acotar

$$|\tau_n| \leq \max_{t\in[t_0,t_F]} |y''(t)| \, \frac{h}{2}, \qquad \text{para } n = 1, \ldots, N.$$

Observemos que

$$t \;\mapsto\; (t, y(t)) \;\overset{f}{\mapsto}\; f(t, y(t))$$

$$\begin{aligned} y''(t) &= \frac{d}{dt} f(t, y(t)) = \frac{\partial f}{\partial t}(t, y(t)).\,1 + \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t)).\, y'(t) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t}(t, y(t)) + \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t)).\, f(t, y(t)) \\ &= f_t(t, y(t)) + f_y(t, y(t)).\, f(t, y(t)). \end{aligned}$$

Si C_{MAX} es tal que $\max\limits_{t \in [t_0, t_F]} |y''(t)| \leq C_{MAX}$, tenemos entonces:

$$|\tau_n| \leq C_{MAX}\, \frac{h}{2}, \qquad \text{para } n = 1, \ldots, N.$$

Métodos de Taylor de orden k

Usamos desarrollos de Taylor de prden k para aproximar el valor de $y(t)$, porque podemos obtener los valores de las derivadas sucesivas de y a partir de f:

$$
\begin{aligned}
y'(t) =& f(t, y(t)) \\
y''(t) =& f_t(t, y(t)) + f_y(t, y(t)) f(t, y(t)) \\
y'''(t) =& f_{tt}(t, y(t)) + f_{ty}(t, y(t)) f(t, y(t)) + \\
& + [f_{yt}(t, y(t)) + f_{yy}(t, y(t))] f(t, y(t)) + \\
& + f_y(t, y(t))[f_t(t, y(t)) + f_y(t, y(t)) f(t, y(t))] \\
\vdots \quad & \quad \vdots
\end{aligned}
$$

Sabiendo lo que vale $y(t)$ se podría aproximar $y(t+h)$ usando las expresiones anteriores:

$$
y(t+h) \sim y(t) + y'h + y''(t)\frac{h^2}{2} + y'''(t)\frac{h^3}{3} + \cdots + y^{(k)}(t)\frac{h^k}{k!}
$$

Método de Taylor de orden 2

Sean $h = \frac{T_F - t_0}{N}$, $t_n = t_0 + nh$,

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2}\Big(f_t(t_n, y_n) + f_y(t_n, y_n) f(t_n, y_n)\Big) \end{cases}$$

para $n = 0, 1, \ldots, N-1$.

Error local:

$$\tau_n = \frac{h^2}{6} y'''(\theta_{n-1}), \quad \theta_{n-1} \in (t_{n-1}, t_n).$$

- Los métodos de Taylor de orden k, comparados con el método de Euler, tienen errores menores (tanto local como global).

- Con los métodos de Taylor se pueden construir métodos de orden arbitrario.
  Usando Taylor de orden k tenemos $\tau_{MAX} = O(h^k)$ y por lo tanto $E_N = O(h^k)$.

- Cada paso es más costoso que el método de Euler: si hago Taylor de órdenes altos ¡tendré demasiadas derivadas a calcular!

- Se deben poder obtener las derivadas de f hasta orden k.

Método de Runge-Kutta

La idea central es conseguir el mismo orden que con los métodos de Taylor pero **sin usar las derivadas** de f.

Proponemos:

$$y_{n+1} = y_n + h\Big(A_1 f(t_n, y_n) + A_2 f(t_n + \alpha h, y_n + \alpha h f(t_n, y_n))\Big)$$

Y buscamos A_1, A_2, α para que el error local sea como el de Taylor de orden 2, $O(h^3)$.

Observaciones:

- Tenemos:

$$
\begin{aligned}
y''(t) &= \lim_{\alpha\to 0} \frac{y'(t+\alpha) - y'(t)}{\alpha} \\
&= \lim_{\alpha\to 0} \frac{f(t+\alpha, y(t+\alpha)) - f(t, y(t))}{\alpha}
\end{aligned}
$$

- $\frac{f(t+\alpha,y(t+\alpha))-f(t,y(t))}{\alpha} = \left(-\frac{1}{\alpha}\right) f(t, y(t)) + \frac{1}{\alpha} f(t+\alpha, y(t+\alpha))$

- Como $y(t+\alpha) \sim y(t) + \alpha f(t, y(t))$, tenemos $y(t_n + \alpha h) \sim y(t_n) + \alpha h f(t_n, y(t_n)) \sim y_n + \alpha h f(t_n, y_n)$.

- Juntando todo:

$$
y''(t_n) \sim \left(-\frac{1}{\alpha h}\right) f(t_n, y_n) + \frac{1}{\alpha h} f(t_n + \alpha h, y_n + \alpha h f(t_n, y_n))
$$

Recordemos el error local de Taylor de orden 2:

$$y(t_{n+1})-[y(t_n)+hf(t_n,y(t_n))+\frac{h^2}{2}\Big(f_t(t_n,y(t_n))+f_y(t_n,y(t_n))f(t_n,y(t_n))\Big)]$$

Para el método propuesto sería:

$$y(t_{n+1})-\Big[y(t_n)+h\Big(A_1f(t_n,y(t_n))+A_2f(t_n+\alpha h,y(t_n)+\alpha hf(t_n,y(t_n)))\Big)\Big]$$

Desarrollamos por Taylor en dos variables:

$$f(t+\alpha h,y+\alpha hf(t,y))=$$
$$f(t,y)+\alpha hf_t(t,y)+\alpha hf(t,y)f_y(t,y)+O(h^2)$$

Reemplazamos y reacomodamos:

$$y(t_{n+1}) - \Big[y(t_n) + h\Big(A_1 f(t_n, y(t_n)) + A_2\Big(f(t_n, y(t_n)) + \alpha h f_t(t_n, y(t_n)) +$$
$$+ \alpha h f(t_n, y(t_n)) f_y(t_n, y(t_n)) + O(h^2)\Big)\Big)\Big]$$

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) - h(A_1 + A_2) f(t_n, y(t_n)) - h^2 \alpha A_2 \Big(f_t(t_n, y(t_n)) +$$
$$+ f_y(t_n, y(t_n)) f(t_n, y(t_n))\Big) + O(h^3)$$

Y comparamos con el de Taylor de orden 2:

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) - h f(t_n, y(t_n)) - \frac{h^2}{2}\Big(f_t(t_n, y(t_n)) + f_y(t_n, y(t_n)) f(t_n, y(t_n))\Big)$$

Pedimos entonces A_1, A_2, α mayores o iguales a 0 tales que:

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 1 \\ \alpha A_2 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Método de Euler modificado

Si $\alpha = \frac{1}{2}$, $A_1 = 0$, $A_2 = 1$, $h = \frac{T_F - t_0}{N}$ y $t_n = t_0 + nh$:

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ y_{n+1} = y_n + hf(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(t_n, y_n)) \end{cases}$$

para $n = 0, 1, \ldots, N-1$.

Método de Heun (o de Runge-Kutta 2)

Si $\alpha = 1$, $A_1 = A_2 = \frac{1}{2}$, $h = \frac{T_F - t_0}{N}$ y $t_n = t_0 + nh$:

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ K_1 = f(t_n, y_n) \\ K_2 = f(t_n + h, y_n + hK_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K_1 + K_2) \end{cases}$$

para $n = 0, 1, \ldots, N-1$.

Método de Runge-Kutta 4

Sean $h = \frac{T_F - t_0}{N}$, $t_n = t_0 + nh$:

$$\begin{cases} y_0 = y(t_0) \\ K_1 = f(t_n, y_n) \\ K_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1) \\ K_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2) \\ K_4 = f(t_n + h, y_n + hK_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \end{cases}$$

para $n = 0, 1, \ldots, N-1$.

El error local de R-K 4 es una $O(h^5)$.

Error global

Decimos que $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ satisface la *condición de Lipschitz en la segunda variable* si existe $L > 0$ tal que

$|f(t,u) - f(t,v)| \leq L|u - v|$ para toda elección posible de t, u, v.

Vamos a considerar mayormente:

$$\max_{\substack{t \in [t_0, t_F] \\ y \in [a,b]}} |f_y(t,y)| \leq L,$$

para algún intervalo $[a, b]$ (*ya veremos...*).
Tenemos entonces la siguiente cota para el error global:

$$\boxed{|E_N| = |y(t_F) - y_N| \leq \frac{e^{L(t_F - t_0)} - 1}{L} \tau_{max}.}$$

Error global para el método de Euler

Veamos cómo se obtiene la cota.

$$E_n = y(t_n) - y_n$$

Método de Euler, que usa para aproximar el valor en t_n el valor *aproximado* en t_{n-1}:

$$\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + hf(t_0, y_0)\\
y_2 &= y_1 + hf(t_1, y_1)\\
y_3 &= y_2 + hf(t_2, y_2)\\
&\vdots\\
y_N &= y_{N-1} + hf(t_{N-1}, y_{N-1})
\end{aligned}$$

Método que tendría si usara para aproximar el valor en t_n el valor *real* en t_{n-1}:

$$\begin{aligned}
\hat{y}_1 &= y(t_0) + hf(t_0, y(t_0))\\
\hat{y}_2 &= y(t_1) + hf(t_1, y(t_1))\\
\hat{y}_3 &= y(t_2) + hf(t_2, y(t_2))\\
&\vdots\\
\hat{y}_N &= y(t_{N-1}) + hf(t_{N-1}, y(t_{N-1}))
\end{aligned}$$

Para comparar $y(t_n)$ con y_n vamos a intercalar $\hat{y}_n$.

$$
\begin{aligned}
E_1 &= y(t_1) - y_1 = h\tau_1 \text{ en el primer paso } \hat{y}_1 = y_1 \\
E_2 &= y(t_2) - y_2 = y(t_2) - \hat{y}_2 + \hat{y}_2 - y_2 \\
&= h\tau_2 + y(t_1) + hf(t_1, y(t_1)) - y_1 - hf(t_1, y_1) \\
&= h\tau_2 + E_1 + h(f(t_1, y(t_1)) - f(t_1, y_1))
\end{aligned}
$$

Tomando módulo y usando que f es Lipschitz en la segunda variable:

$$
\begin{aligned}
|E_2| &\leq |h\tau_2| + |E_1| + h|f(t_1, y(t_1)) - f(t_1, y_1)| \\
&\leq |h\tau_2| + |E_1| + hL|y(t_1) - y_1| \\
&= |h\tau_2| + |E_1| + hL|E_1| = |h\tau_2| + (1 + hL)|E_1| \\
&= |h\tau_2| + (1 + hL)|h\tau_1|
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
E_3 = y(t_3) - y_3 &= y(t_3) - \hat{y}_3 + \hat{y}_3 - y_3 \\
&= h\tau_3 + y(t_2) + hf(t_2, y(t_2)) - y_2 - hf(t_2, y_2) \\
&= h\tau_3 + E_2 + h(f(t_2, y(t_2)) - f(t_2, y_2))
\end{aligned}
$$

Tomando módulo y usando que f es Lipschitz en la segunda variable:

$$
\begin{aligned}
|E_3| &\leq |h\tau_3| + |E_2| + h|f(t_2, y(t_2)) - f(t_2, y_2)| \\
&\leq |h\tau_3| + |E_2| + hL|y(t_2) - y_2| \\
&= |h\tau_3| + |E_2| + hL|E_2| = |h\tau_3| + (1 + hL)|E_2|
\end{aligned}
$$

Usando la cota para $|E_2|$ nos queda

$$
\begin{aligned}
|E_3| &\leq |h\tau_3| + (1 + hL)(|h\tau_2| + (1 + hL)|h\tau_1|) \\
&= |h\tau_3| + (1 + hL)|h\tau_2| + (1 + hL)^2|h\tau_1|
\end{aligned}
$$

Si $\tau_{MAX} = \max_{1 \leq n \leq N} |\tau_n|$, tenemos

$$\begin{aligned} |E_3| &\leq h\tau_{MAX} + (1 + hL)h\tau_{MAX} + (1 + hL)^2 h\tau_{MAX} \\ &= (1 + (1 + hL) + (1 + hL)^2)h\tau_{MAX} \end{aligned}$$

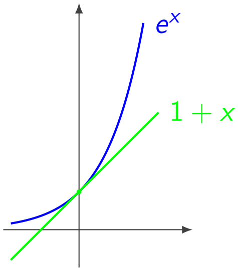
y así...

$$\begin{aligned} |E_N| &\leq (1 + (1 + hL) + (1 + hL)^2 + \cdots + (1 + hL)^{N-1})h\tau_{MAX} \\ &= \left(\sum_{k=0}^{N-1} (1 + hL)^k \right) h\tau_{MAX} \end{aligned}$$

<u>Serie geométrica:</u> Para $R \neq 1$, $\sum_{k=0}^{N-1} R^K = \frac{R^N - 1}{R - 1}$ y nos queda:

$$|E_n| \leq \frac{(1 + hL)^N - 1}{hL} h\tau_{MAX}.$$

Por último usamos que $1 + x \leq e^x$ para todo $x \in \mathbb{R}$:



y por lo tanto $(1 + x)^N \leq e^{Nx}$ para todo $x \in \mathbb{R}$. De esta forma:

$$|E_n| \leq \frac{(1 + hL)^N - 1}{hL} h\tau_{MAX} \leq \frac{e^{NhL} - 1}{L} \tau_{MAX}$$

Y, finalmente, como $h = \frac{t_F - t_0}{N}$, resulta:

$$|E_n| \leq \frac{e^{L(t_F - t_0)} - 1}{L} \tau_{MAX}.$$

Para el método de Euler, $\tau_{MAX} \leq C_{MAX} \frac{h}{2}$ y nos queda:

$$\boxed{|E_N| = |y(t_F) - y_N| \leq \frac{e^{L(t_F - t_0)} - 1}{L} C_{MAX} \frac{h}{2}.}$$

Orden de convergencia

- Decimos que $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ es $\varphi(h) = O(h^k)$ cuando $h \to 0$ si existen $C \geq 0$ y $\delta > 0$ tales que $|\varphi(h)| \leq Ch^k$ cuando $h < \delta$.

  Por ejemplo, si $\varphi(h) = \frac{y^{(k)}(\theta)}{k!} h^k$, puedo tomar $C = \frac{\max\limits_{z} |y^{(k)}(z)|}{k!}$ y entonces $\varphi(h) = O(h^k)$.

- Decimos que un método converge con orden k si el error global, E_N, es una $O(h^k)$.

- En general, si el error de truncado local de un método de un paso es una $O(h^k)$, el error global es una $O(h^k)$.

¿Cómo podemos estimar el orden de un método?

Idea:

$$|E_N| \sim Ch^k \;\Rightarrow\; \log(|E_N|) \sim \log(C) + k\log(h)$$

Si pudiéramos graficar $\log(|E_N|)$ en función de $\log(h)$, tendríamos que k es la pendiente de "la recta".

Método de Euler Implícito

Si desarrollamos Taylor centrado en $t+h$:

$$y(t) = y(t+h) - y'(t+h)h + \cdots = y(t+h) - f(t+h, y(t+h))h + \ldots$$

y deducimos:

$$y(t+h) \sim y(t) + hf(t+h, y(t+h)),$$

surge el método implícito:

Método:

Sean $h = \frac{T_F - t_0}{N}$, $t_n = t_0 + nh$,

$$\begin{cases} y_0 & = y(t_0) \\ y_{n+1} & = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad \text{para } n = 0, 1, \ldots, N-1. \end{cases}$$

Observación: el método implícito requiere resolver una ecuación (en general no lineal) en cada paso.

Por ejemplo, en el primer paso tenemos

$$y_1 = y_0 + hf(t_1, y_1).$$

Si bien y_0, h y t_1 los conocemos, en general no podemos despejar y_1 y hay que resolver la ecuación

$$y_1 - y_0 - hf(t_1, y_1) = 0$$

usando, por ejemplo, el método de Newton-Raphson.

Ejercicio

Considerar el problema de valores iniciales:

$$\begin{cases} y'(t) & = & t\cos^2(y(t)), \\ y(0) & = & 5. \end{cases}$$

- En “papel”:
  1. Escribir la iteración del método de Euler correspondiente a este problema.
  2. Hallar h para que el error al estimar $y(1)$ con el método de Euler sea menor que 10^{-3}.
- Con Python: Escribir un programa que implemente el método de Euler explícito para este PVI y graficar la solución obtenida para distintos valores de h.

Resolución:

1) La iteración del método de Euler con paso $h = \frac{T_F - t_0}{N} = \frac{1-0}{N} = \frac{1}{N}$, $t_n = t_0 + nh = 0 + nh = nh$ es

$$\begin{cases} y_0 & = 5 \\ y_{n+1} & = y_n + hf(t_n, y_n) = y_n + ht_n \cos^2(y_n) \end{cases}$$

$n = 0, 1, \ldots, N-1$.

Resolución:

2) Buscamos h para que $|E_N| < 10^{-3}$. Hallemos C_{MAX} y L para este problema. En este caso, $f(t, y) = t\cos^2(y)$.

$$\begin{aligned} y''(t) &= f_t(t, y(t)) + f_y(t, y(t))f(t, y(t)) \\ &= \cos^2(y(t)) + t.\,2\cos(y(t))(-\operatorname{sen}(y(t)))f(t, y(t)) \\ &= \underline{\cos^2(y(t))} - 2t\cos(y(t))\operatorname{sen}(y(t))t\underline{\cos^2(y(t))} \\ &= \cos^2(y(t))[1 - 2t^2\cos(y(t))\operatorname{sen}(y(t))]. \end{aligned}$$

De esta forma:

$$\begin{aligned} |y''(t)| &\leq |\cos(y(t))|^2[1 + |2t^2||\cos(y(t))||\operatorname{sen}(y(t))|] \\ &\underset{t\in[0,1]}{\leq} 1^2.\,[1 + 2.\,1.\,1] = 3 =: C_{MAX} \end{aligned}$$

Y $|f_y(t, y)| = |t.\,2\cos(y)(-\operatorname{sen}(y))| \leq |2t| \underset{t\in[0,1]}{\leq} 2 =: L$

Resolución:

Sabemos que

$$
\begin{aligned}
|E_N| &\leq \frac{e^{L(t_F - t_0)} - 1}{L} C_{MAX} \frac{h}{2} \\
&= \frac{e^{2(1-0)} - 1}{2} \cdot \frac{3h}{2} = \frac{3h}{4}(e^2 - 1) \leq 6h
\end{aligned}
$$

Ahora busquemos un valor de h para que este error sea menor que 10^{-3}:

$$
6h < 10^{-3} \Leftrightarrow h < \frac{1}{6000} \sim 0{,}0001666\ldots.
$$

Por lo tanto, cualquier $h < 0{,}0001666$ sirve para tal propósito.