Elementos de Cálculo Numérico

Juan Pablo Pinasco (jpinasco@dm.uba.ar//gmail.com)

Departamento de Matemática e IMAS,
FCEyN, UBA - CONICET

2020

Parte I

Próxima clase

Hoy:

- Runge-Kutta: 174-177
- Error de truncado local: 177-179

Próxima:

- Convergencia: 179-184

Parte II

Runge-Kutta

Para el método de Euler,

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + O(h^2)$$

Con Taylor,

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + \frac{h^2}{2}x''(t) + \cdots + \frac{h^k}{k!}x^{(k)}(t) + O(h^{k+1})$$

Si llamamos

$$T_k(t,x,h) = \sum_{j=1}^{k} \frac{h^{j-1}}{j!} D_t^{j-1} F(t,x(t))$$

aproximamos

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

$$x(t+h) \sim x(t) + hT_k(t,x,h)$$

con un error $O(h^{k+1})$

Runge (1896) y Kutta (1901) proponen reemplazar $T_k(t,x,h)$ por una función $\Phi_k(t,x,h)$ tal que

$$T_k(t,x,h) - \Phi_k(t,x,h) = O(h^{k+1})$$

y que no necesite calcular derivadas de F.

Informalmente:

$$\begin{aligned} h \cdot x''(t) &\sim x'(t+h) - x'(t) \\ &= F(t+h, x(t+h)) - F(t, x(t)) \\ &\sim F\Big(t+h, x(t) + hF(t,x(t))\Big) - F(t,x(t)) \end{aligned}$$

También podríamos hacer

$$\begin{aligned} (h/2)x''(t) &\sim x'(t+h/2) - x'(t) \\ &= F(t+h/2, x(t+h/2)) - F(t,x(t)) \\ &\sim F\Big(t+h/2, x(t) + (h/2)F(t,x(t))\Big) - F(t,x(t)) \end{aligned}$$

(hay distintas opciones).

Esa **NO** es la idea de Runge, todo lo contrario: integra!

$$x(t+h) - x(t) = \int_t^{t+h} x' dt = \int_t^{t+h} F(s, x(s)) ds \approx h \cdot F(\hat{t}, x(\hat{t}))$$

Pero si uno elige más puntos para integrar, el error se achica:

$$\int_t^{t+h} F(s, x(s)) ds \approx h \cdot \Big[A_1 F(t,x) + A_2 F(t + \alpha h, x + \alpha h F(t,x) \Big]$$

Proponemos $\Phi(t,x) = \Big[A_1 F(t,x) + A_2 F(t + \alpha h, x + \alpha h F(t,x) \Big]$, con lo cual tenemos el método

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot \Big[A_1 F(t, x(t)) + A_2 F\Big(t + \alpha h, x(t) + \alpha h F(t, x(t))\Big) \Big]$$

El problema es encontrar A_1, A_2, α tal que el error sea $O(h^3)$.

$$x(t+h) = x(t) + h\Big[A_1F(t,x(t)) + A_2F\Big(t+\alpha h, x(t)+\alpha hF(t,x(t))\Big)\Big]$$

- $F(t,x(t)) = x'(t)$
- $F\Big(t+\alpha h, x(t)+\alpha hF(t,x(t))\Big) =$ [hacemos Taylor en $h=0$]

$$\begin{aligned}
&= F(t,x) + F_t(t,x)\alpha h + F_x(t,x)\alpha hF(t,x) + O(h^2)\\
&= x'(t) + \alpha h(F_t + F_xF) + O(h^2)\\
&= x'(t) + \alpha hx''(t) + O(h^2)
\end{aligned}$$

$$x(t+h) = x(t) + hA_1x'(t) + hA_2x'(t) + A_2\alpha h^2x''(t) + O(h^3)$$

$$x(t+h) = x(t) + h(A_1+A_2)x'(t) + A_2\alpha h^2x''(t) + O(h^3)$$

$$x(t+h) = x(t) + h(A_1 + A_2)x'(t) + A_2\alpha h^2 x''(t) + O(h^3)$$
$$x(t+h) = x(t) + \qquad hx'(t) \qquad + \qquad \frac{h^2}{2}x''(t) + O(h^3)$$

Necesitamos

$$A_1 + A_2 = 1 \qquad A_2\alpha = \frac{1}{2}$$

- Si $A_1 = 0, A_2 = 1, \alpha = \frac{1}{2}$, tenemos el *método de Euler modificado*.

$$x(t+h) = x(t) + h\,F\Big(t + \frac{h}{2}, x(t) + \frac{h}{2}F(t, x(t))\Big)$$

- Si $A_1 = A_2 = \frac{1}{2}, \alpha = 1$, es el *método de Heun (1900)*

$$x(t+h) = x(t) + \frac{h}{2}\Big[F(t, x(t)) + F\Big(t + h, x(t) + hF(t, x(t))\Big)\Big]$$

Kutta se pregunta si evaluando en más puntos se puede mejorar todavía más, y extiende el método en general:

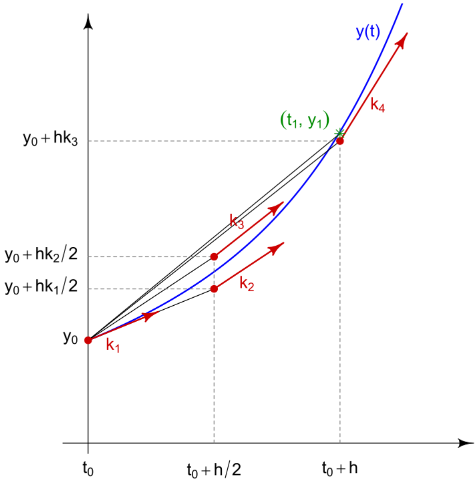
$$\begin{aligned} k_1 &= F(t, x(t)) \\ k_2 &= F(t + h/2, x(t) + h/2 \cdot k_1) \\ k_3 &= F(t + h/2, x(t) + h/2 \cdot k_2) \\ k_4 &= F(t + h, x(t) + hk_3) \end{aligned}$$

$$x(t+h) = x(t) + \frac{h}{6}\Big(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\Big)$$

[Se pueden plantear otros puntos de evaluación, y otros coeficientes, y el error de Taylor es $O(h^4)$.]

Ejercicio: desarrollen en Taylor como antes, y vean que llegan hasta $x'''(t)$, lo cual les da un error de Taylor $O(h^4)$.

8.- Interpretación geométrica



Parte III

Errores

Hasta ahora, nos preocupó el error cometido al pasar de $x(t)$ a $x(t+h)$ usando Euler, Taylor o los métodos de R-K.

Sabemos que en Taylor tiramos un término que se acota $O(h^k)$ si usamos hasta la derivada $k-1$, pero no sabemos cómo afecta la solución, y cómo influye más adelante.

En cada paso se genera un nuevo error, agravado porque no evaluamos en el punto correcto, y, además, sólo aproximamos esa evaluación, así que es de esperar que el error se propague.

Supongamos que queremos resolver una ecuación en $[0, 1]$, y salimos desde $x(0) = x_0$, con un paso h. La pregunta es cuál va a ser el error al calcular $x(1)$, llamado el **error global**.

Esencialmente, podemos pensar que se van a acumular errores de orden $O(h^{k+1})$ al truncar el desarrollo de Taylor.

Pero como iteramos $1/h$ veces, yo esperaría -como mínimo- un error de orden

$$O(h^{k+1}) \times 1/h = O(h^k).$$

¿Será así? ¿Es mucho peor?

Sea $x_{j+1} = x_j + h\Phi(t_j, x_j, h)$

Def: Error de truncamiento local. Llamamos τ_j al error que se comete en el paso j al aproximar $x(jh+h)$ si reemplazamos por la solución exacta $x(t_j)$,

$$x(t_j + h) = x(t_j) + h\Phi(t_j, x(t_j), h) + h\tau_j.$$

Si hacemos Taylor podemos acotar τ_j usando la fórmula del resto.

En realidad, $\tau_j = \tau(t_j, x(t_j), h)$

Si no nos vamos a confundir, lo podemos llamar τ.

Def: Decimos que un método es de orden k si el error de truncamiento local satisface

$$\tau = O(h^k).$$

Teorema

Tenemos los siguientes órdenes:

- *Euler:* $\tau = \frac{h}{2}x''(y) = O(h)$.
- *Taylor:* $\tau = \frac{h^k}{(k+1)!}x^{(k+1)}(y) = O(h^k)$.
- *Runge-Kutta:* $\tau = O(h^4)$ *(no se si lo hicimos, pero lo dejé de ejercicio).*

Dem:

Recordemos que $x(t_j+h) = x(t_j) + h\Phi(t_j,(t_j),h) + h\tau_j$.

Para Euler,

$$x(t_j+h) = x(t_j) + hx'(t_j) + \frac{h^2}{2}x''(y)$$

$$x(t_j+h) = x(t_j) + hF(t_j,x(t_j)) + h\cdot\frac{h}{2}x''(y)$$

Para Taylor es igual

$$x(t_j+h) = x_j + hx'x(t_j) + \cdots + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}x^{(k+1)}(y)$$

$$x(t_j+h) = x_j + hx'(t_j) + \cdots + h\cdot\frac{h^k}{(k+1)!}x^{(k+1)}(y)$$

Para Runge-Kutta les queda de ejercicio.

Def: Error global. Sea $x(t)$ la solución de $x'(t) = F(t, x(t))$, con $x(t_0) = x_0$. Llamamos error global al que se comete al aproximar $x(T)$ con nuestro método, es decir, $x(t_n) - x_n$, para $T = t_0 + nh = t_n$.

Teorema

Sean $t_j = t_0 + jh$, con $h = (T - t_0)/n$. Para el método de un paso

$$x_{j+1} = x_j + h\Phi(t_j, x_j, h),$$

donde Φ es una función Lipschitz en x,

$$\Phi(t, x, h) - \Phi(t, y, h) \leq K|x - y|$$

para todo $x, y \in \mathbb{R}$, $t \in [t_0, T]$. Entonces

$$|x(T) - x_n| \leq \frac{\tau_{max}}{K}\left(e^{K(T-t_0)} - 1\right)$$

donde

$$\tau_{max} = \max_{1 \leq j \leq n} |\tau_j|$$

con τ_j el error de truncamiento local del método en el paso j.

15.- Demostración:

Observemos que el teorema confirma nuestra suposición: se acumula unas $1/h$ veces el error de truncado.

La demostración queda para la próxima clase.