# Métodos Runge-Kutta

Matteo Bonforte, Rafael Orive
Universidad Autónoma de Madrid

Madrid, Octubre 2020

**Objetivo: Definir y analizar la familia unipaso de los métodos Runge-Kutta**

- Métodos RK explícitos
- Tablero de Butcher
- Métodos RK implícitos
- Orden. Barreras
- Estabilidad.
- Conservación de propiedades geométricas
- Elección de paso

# Definición

Extendemos fórmulas de cuadratura a ODEs. Por TF Cálculo Integral:

$$
\begin{aligned}
Y(t_{n+1}) &= Y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, Y(s))\, ds \\
&= Y(t_n) + h \int_0^1 f(t_n + sh, Y(t_n + sh))\, ds
\end{aligned}
$$

y reemplazamos esta integral por una regla de cuadratura

$$Y(t_{n+\frac{1}{2}}) \approx y_n + \frac{1}{2} h f_n$$

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

$$y_{n+1} = y_n + h f(t_n + \frac{h}{2}, Y(t_n + \frac{1}{2})) + 0 h f_n$$

donde los $b_i$, $c_i$ son independientes de la función $f$ que se conocen como pesos y nodos de la cuadratura.

**Recordar:** Cuadratura Gaussiana, métodos de Newton-Cotes (equiespaciados), polinomios ortogonales (Chebyshev, Legendre,...)

- $y_n$, valor aproximado de $Y(t_n)$ (dato inicial, por un algoritmo).
- $y_{n+1}$, valor aproximado de $Y(t_{n+1})$ obtenido por la cuadratura.
- $Y(t_n + c_j h)$, $j = 1, \ldots, s$, valores desconocidos que precisamos aproximar por unos valores $\xi_j$.

**Nota**: $\{y_n\}$, valores que estamos interesados en guardar.

Algoritmo explícito: Precisamos que $c_1 = 0$

- Tomo $\xi_1 = y_n$.
- Tomo $\xi_2 = y_n + h\, a_{21} f(\underbrace{t_n + c_1 h, \xi_1}_{= k_1})$. $a_{21} = \frac{1}{2}$ $\quad \xi_2 = y_n + \frac{h}{2} f_n$
- Tomo $\xi_3 = y_n + h\, a_{31} f(\underbrace{t_n + c_1 h, \xi_1}_{= k_1}) + h\, a_{32} f(\underbrace{t_n + c_2 h, \xi_2}_{k_2})$.
- Hasta llegar

$$\xi_s = y_n + h \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}\, f(\overbrace{t_n + c_j h, \xi_j}^{= k_j}).$$

- Para finalizar

$b_1 = 0 \quad b_2 = 1$

Runge

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{s} b_j\, f(\underbrace{t_n + c_j h, \xi_j}_{= k_j}). \quad j = 1, \ldots, s$$

# RK explícito

Reformulamos el anterior algoritmo para evaluar menos veces $f$:

- Calculo $k_1 = f(t_n, y_n)$, (notar que $c_1 = 0$).
- Calculo $k_2 = f(t_n + c_2 h, \xi_2) = f(t_n + c_2 h, y_n + h\, a_{21} k_1)$.
- Hasta llegar

$$k_s = f(t_n + c_s h, y_n + h \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj} k_j).$$

- Para finalizar

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^{s} b_j\, k_j.$$

Notar que $k_j$ es función explícita de $(t_n, y_n; h)$ y

$$\phi_f(t_n, y_n; h) = \sum_{j=1}^{s} b_j\, k_j(t_n, y_n; h).$$

**Observación**: $\phi_f$ satisface las tres hipótesis $(H_{MN})$. Además...

# Convergencia de RK explícitos

1) $\phi_f$ es continua $\Leftrightarrow$ $k_j$ son continuos

$k_1(t_n, y_n; h) = f(t_n, y_n) \Rightarrow k_1$ es continua

$k_2(t_n, y_n, h) = f(t_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1) \Rightarrow k_2$ es continua

...

$k_s$ es continua

2) Vamos que las $k_j(t_n, y_n; h)$ son Lipschitz en $y_n$

$k_1(t_n, y_n; h) - k_1(t_n, \hat{y}_n; h) = f(t_n, y_n) - f(t_n, \hat{y}_n)$

$| \quad | \leq L |y_n - \hat{y}_n|$ $\quad k_1$ es Lipschitz

$k_2(t_n, y_n; h) - k_2(t_n, \hat{y}_n; h) = f(t_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1(t_n, y_n)) - f(t_n + c_2 h, \hat{y}_n + h a_{21} k_1(t_n, \hat{y}_n))$

$| \quad | \leq L | y_n + h a_{21} k_1(t_n, y_n) - (\hat{y}_n + h a_{21} k_1(t_n, \hat{y}_n)) |$

$\leq L |y_n - \hat{y}_n| + L h |a_{21}| |k_1(t_n, y_n) - k_1(t_n, \hat{y}_n)| \leq L_2 |y_n - \hat{y}_n|$

3) $f \equiv 0 \Rightarrow k_j \equiv 0 \quad \forall j = 1, \dots, s \Rightarrow \phi_f \equiv 0$

- Criterio de la raíz $\alpha_1 = 1 \quad \alpha_0 = -1$

  $\rho(x) = x - 1 \Rightarrow 1$ es la única raíz $\Rightarrow$ sí se satisface.

- $\sum \alpha_i = 1 - 1 = 0 \rightarrow$ (C1) de consistencia.

- (C2) $\phi_f(t, y; 0) = (\sum i \underbrace{\alpha_i}_{1}) f(t, y) \quad \forall t \in [t_0, T] \quad \forall y \in \mathbb{R}^d$

$$\phi_f(t, y, 0) = \sum_{i=1}^{s} b_i k_i(t, y; 0) = \left(\sum_{i=1}^{s} b_i\right) f(t, y) \Rightarrow \boxed{\sum_{i=1}^{s} b_i = 1} \text{ Orden 1}$$

$k_1 = f(t, y) \qquad k_2(t, y, 0) = f(\underbrace{t + c_2 \cdot 0}_{t}, y + 0 a_{21} k_1) = f(t, y)$

$$k_i(t, y; 0) = f\left(t + c_i \cdot 0, y + 0\left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j(t, y; 0)\right)\right) = f(t, y)$$

Todo método Runge-Kutta se identifica con $\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \end{array}$

- Vector $c \in \mathbb{R}^s$ de coeficientes los nodos de la cuadratura, $c_i$.
- Vector $b \in \mathbb{R}^s$ de coeficientes los pesos de la cuadratura, $b_i$.
- Matriz cuadrada $A$ de tamaño $s$ de coeficientes $a_{ij}$.

Todo Runge-Kutta explícito $c_1 = 0$ y $A$ es triangular inferior de diagonal principla nula, $a_{ij} = 0$ si $j \geq i$.

**Método Runge**: $y_{n+1} = y_n + h_n \underbrace{f\left(t_n + \frac{h_n}{2}, y_n + \frac{h_n}{2} \overset{k_1}{f_n}\right)}_{k_2} + 0\, h_n \overset{k_1}{f(t_n, y_n)}$

$\Rightarrow c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$

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

$a_{22} = 0$

$a_{21} = \frac{1}{2}$

$k_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{h}{2}k_1)$

Calcular alguno (o todos) de los $s$ pasos implica resolver un problema no explícito, o en general no lineal. $\xi = F_2(\xi)$

| | |
|---|---|
| $k_1 = f\left(t_n + c_1 h, y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{1j}k_j\right)$ | $\xi_1 = y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{1j} f\left(t_n + hc_j, \xi_j\right)$ |
| (1) $\cdots \quad \cdots$ | $\cdots \quad \cdots$ (2) |
| $k_s = f\left(t_n + c_s h, y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{sj}k_j\right)$ | $\xi_s = y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{sj} f\left(t_n + hc_j, \xi_j\right)$ |
| $y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=1}^{s} b_j\, k_j(t_n, y_n; h)$ $\Longleftrightarrow$ | $y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=1}^{s} b_j\, f\left(t_n + hc_j, \xi_j\right)$ |

**Ejemplo**: Trapecio, $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1})$

$y' = f(t, y)$

$f_n = f(t_n, y_n) = k_1$ $\qquad f_{n+1} = f(t_n + h, y_{n+1}) = k_2$

$c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$

$k_1 = f(t_n, y_n) \qquad k_2 = f(t_n + h, y_{n+1}) = f\left(t_n + h, y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)\right)$

$$y_{n+1} = y_n + h f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_{n+\frac{1}{2}}\right) \qquad \text{donde } y_{n+\frac{1}{2}} ?$$

$y_n = Y(t_n)$ $\quad \hookrightarrow$ Método RK implícito de un paso

- $c = \frac{1}{2}$ , $b = 1$
- $k_1 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_{n+\frac{1}{2}}\right) = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} k_1\right) \Rightarrow a = \frac{1}{2}$

$$Y(t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{Y(t_n) + Y(t_{n+1})}{2} + O(h^2)$$

$$y_{n+\frac{1}{2}} = \frac{y_n + y_{n+1}}{2} \text{ en orden } h^2 \Rightarrow y_{n+1} = 2y_{n+\frac{1}{2}} - y_n$$

$$2y_{n+\frac{1}{2}} - y_n = y_n + h k_1 \Rightarrow \boxed{y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{h}{2} k_1}$$

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

Tablero de Butcher

Métodos de colocación

## $k = F_1(k)$, $\xi = \widehat{F_2}(\xi)$

- $\|F_1(k) - F_1(\hat{k})\| \le K \, \|k - \hat{k}\|$ $\quad K < 1$ $\qquad k = (k_1, \dots, k_s)$

$\|k - \hat{k}\| = \sum_{i=1}^{s} |k_i - \hat{k}_i|$ norma en $\mathbb{R}^{ds}$

$i = 1, \dots, s$ $\quad \left| f\left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j\right) - f\left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \hat{k}_j\right) \right|$

Lipschitz $\le L \left| \cancel{y_n} + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j - \left( \cancel{y_n} + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \hat{k}_j \right) \right|$

$\le L h \left| \sum_{j=1}^{s} a_{ij} (k_j - \hat{k}_j) \right| \le L h \sum_{j=1}^{s} |a_{ij}| \, |k_j - \hat{k}_j|$

$\|F_1(k) - F_1(\hat{k})\| = \sum_{i=1}^{s} \left| f\left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j\right) - f\left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \hat{k}_j\right) \right|$

$\le L h \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=1}^{s} |a_{ij}| \, |k_j - \hat{k}_j| \le L h \sum_{j=1}^{s} \left( \sum_{i=1}^{s} |a_{ij}| \right) |k_j - \hat{k}_j|$

Si defino $\|A\| = \max_{j=1,\dots,s} \sum_{i=1}^{s} |a_{ij}|$ , entonces

$$\|F_1(k) - F_1(\hat{k})\| \leq L h \|A\| \, \|k - \hat{k}\|$$

Suponiendo que $L h \|A\| < 1 \Rightarrow F_1$ es contractiva

- $F_1$ es contractiva.

$$\xi_i = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_n + c_j h, \xi_j) = (F_2)_i(\xi)$$

$$(F_2)_i(\xi) - (F_2)_i(\hat{\xi}) = h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \left( f(t_n + c_j h, \xi_j) - f(t_n + c_j h, \hat{\xi}_j) \right)$$

$$\|F_2(\xi)-F_2(\hat{\xi})\| \leq \sum_{i=1}^{s} h \sum_{j=1}^{s} |a_{ij}|\, |f(t_n+c_j h, \xi_j) - f(t_n+c_j h, \hat{\xi}_j)|$$

$$\leq hL \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s} |a_{ij}|\, |\xi_j-\hat{\xi}_j| \leq hL\|A\| \sum_{j=1}^{s} |\xi_j-\hat{\xi}_j|$$

$$\leq hL\|A\|\, \|\xi-\hat{\xi}\|$$ $F_2$ es contractiva si $hL\|A\|<1$

$$\|A\| = \max_{j=1,\dots,s} \sum_{i=1}^{s} |a_{ij}|$$

(1) $\Rightarrow$ (2)

$$\xi_i = y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j \qquad i=1,\dots,s \qquad \xi = F_2(\xi)$$

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i k_i = y_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i f(t_n+c_i h, \overbrace{y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j}^{\xi_i})$$

# Formulaciones equivalentes

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_n + c_i h, \xi_i)$$

$$\xi_i = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j \underset{\uparrow}{=} y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_n + c_j h, \underbrace{y_n + h \sum_{l=1}^{s} a_{jl} k_l}_{\xi_j})$$

$x_q\ k = F_1(k)$

$$\xi_i = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_n + c_j h, \xi_j) \quad \Rightarrow \quad \xi = F_2(\xi)$$

$(2) \Rightarrow (1)$

$\xi = F_2(\xi) \qquad y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_n + c_i h, \xi_i)$

$k_i = f(t_n + c_i h, \xi_i) \qquad$ falta ver que $\quad k = F_1(k)$ Ejercicio

# RKI satisfacen $H_{MN}$

$$\phi_f(t_n, y_n; h) = \sum_{i=1}^{s} b_i k_i(t_n, y_n; h)$$

1) Demostrar que $k_i$ es continua con respecto $t_n$, $y_n$ e $h$ $\quad h \leq h_0$

Aplicar <u>Weierstrass</u>

2) $\phi_f$ Lipschitz con respecto $y_n$

$$|k_i(t_n, y_n; h) - k_i(t_n, \hat{y}_n; h)| = \Big| f(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j^{(y_n)}) - f(t_n + c_i h, \hat{y}_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j^{(\hat{y}_n)}\Big|$$

$$\leq L \Big| \Big(y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j(y_n)\Big) - \Big(\hat{y}_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j(\hat{y}_n)\Big)\Big|$$

$$\leq L |y_n - \hat{y}_n| + hL \sum_{j=1}^{s} |a_{ij}| \, |k_j(y_n) - k_j(\hat{y}_n)|$$

# RKI satisfacen $H_{MN}$

$$\| k(t_n,y_n,h) - k(t_n,\hat{y}_n,h)\| = \sum_{i=1}^{s} |k_i(t_n,y_n,h) - k_i(t,\hat{y}_n,h)|$$

$$\leq \sum_{i=1}^{s}\left( L|y_n-\hat{y}_n| + Lh\sum_{j=1}^{s}|a_{ij}|\,|k_j(t_n,y_n,h) - k_j(t_n,\hat{y}_n,h)|\right)$$

$$\leq Ls|y_n-\hat{y}_n| + Lh\sum_{j=1}^{s}\left(\sum_{i=1}^{s}|a_{ij}|\right)|k_j(t_n,y_n,h) - k_j(t_n,\hat{y}_n,h)|$$

$$\leq Ls|y_n-\hat{y}_n| + Lh\|A\|\;\|k(t_n,y_n,h) - k(t_n,\hat{y}_n,h)\|$$

$$(1-Lh\|A\|)\,\|k(t_n,y_n,h) - k(t_n,\hat{y}_n,h)\| \leq Ls|y_n-\hat{y}_n|$$

$$\Rightarrow \|k(t_n,y_n,h) - k(t_n,\hat{y}_n,h)\| \leq \frac{Ls}{1-Lh\|A\|}|y_n-\hat{y}_n|$$

$$|\phi_f(t_n, y_n; h) - \phi_f(t_n, \hat{y}_n; h)| \leq$$

$$\leq \sum_{i=1}^{s} |b_i| \, |k_i(t_n, y_n; h) - k_i(t_n, \hat{y}_n; h)| \qquad |b| = \max_{i=1,\dots,s} |b_i|$$

$$\leq |b| \, \|k(t, y_n; h) - k(t_n, \hat{y}_n; h)\|$$

$$\leq |b| \frac{Ls}{1 - h_0 L \|A\|} |y_n - \hat{y}_n| \implies \phi_f \text{ es Lipschitz}$$

3) $f \equiv 0 \implies \phi_f \equiv 0$

$\Downarrow$

$k_i = f(\cdot,\cdot) = 0 \qquad \phi_f = \sum b_i k_i \equiv 0$ ✓

# Convergencia RK Implícitos

# Orden convergencia RK

- Una de las ventajas de los RK es que nos ofertan métodos de convergencia de ordenes superiores (2, 3, 4, 5,...).
- El orden de convergencia se conoce viendo que los coeficientes de $b$, $c$, $A$ satisfacen unas condiciones algebraicas
- **Condición suma**:

$$\sum_{j=1}^{s} a_{ij} = c_i, \qquad i = 1, \ldots, s. \tag{CS}$$

  Permite hacer autónomos los métodos RK. Reduce el número de condiciones de orden
- **Condición orden 1**:

$$\sum_{i=1}^{s} b_i = 1 \tag{1}$$

# Orden convergencia RK

- Para que un método sea de orden $p$ se han de satisfacer todas las condiciones $p$ y las condiciones de ordenes menores
- **Condición orden 2**:

$$\frac{1}{2} = \sum_{i=1}^{s} b_i c_i. \tag{2}$$

- **Condiciones orden 3**:

$$\frac{1}{3} = \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^2, \qquad \frac{1}{6} = \sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_j. \tag{3}$$

- **Condiciones orden 4**:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} &= \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^3, & \frac{1}{8} &= \sum_{i,j=1}^{s} b_i c_i a_{ij} c_j, \\ \frac{1}{12} &= \sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_j^2, & \frac{1}{24} &= \sum_{i,j,k=1}^{s} b_i a_{ij} a_{jk} c_k. \end{aligned} \tag{4}$$

# Probar orden convergencia RK

Hacer desarrollo de Taylor en 0 de la función en $h$

$$R_n(h) = Y(t_n + h) - Y(t_n) - h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i(t_n, Y(t_n); h)$$

El método es de orden $p$ si:

$$\frac{d^j R_n}{dh^j}(0) = R_n^{(j)}(0) = 0, \qquad \text{para } j = 0, \ldots, p.$$

Se utiliza que

- $Y^{(i+1)}(t_n) = \dfrac{d^i f}{dt^i}(t_n, Y(t_n))$.
- Si $g(h) = hG(h)$, entonces $g^{(i+1)}(0) = (i+1)G^{(i)}(0)$.
- $k_i(t_n, Y(t_n); 0) = f(t_n, Y(t_n)) = Y'(t_n)$.