Métodos Runge-Kutta

Rafael Orive
Universidad Autónoma de Madrid

Madrid, Octubre 2021

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

- Métodos RK explícitos
- Tablero de Butcher
- Métodos RK implícitos
- Método de colocación
- Orden. Barreras
- Estabilidad.

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

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

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 ξ_j.

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

Algoritmo explícito: Precisamos que $c_1 = 0$

- Tomo $\xi_1 = y_n$.
- Tomo $\xi_2 = y_n + h\, a_{21} f(t_n + c_1 h, \xi_1)$.
- Tomo $\xi_3 = y_n + h\, a_{31} f(t_n + c_1 h, \xi_1) + h\, a_{32} f(t_n + c_2 h, \xi_2)$.
- Hasta llegar

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

- Para finalizar

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

Tablero de Butcher

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: $y_{n+1} = y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f_n\right)$

Método Runge-Kutta de orden 4:

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} f_n + \frac{h}{3} f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f_n\right) \\
+ \frac{h}{3} f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f_n\right)\right) \\
+ \frac{h}{6} f\left(t_n + h, y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f_n\right)\right)\right)
\end{aligned}
$$

RK explícito

Reformulamos el algoritmo general 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

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

- 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: ϕ_f satisface (H_{MN}). Además... es CONVERGENTE.

RK implícitos

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

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

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

Método de colocación

Sea una ecuación diferencial (edo)

$$Y' = f(t, Y), \qquad t \geq t_0,$$

conociendo (t_n, y_n) buscamos identificar un valor y_{n+1} en $t_{n+1} = t_n + h$.

Idea

Dados unos parámetros de colocación $c_1, \ldots, c_s$, **distintos** y preferiblemente en $[0, 1]$, buscamos un polinomio de grado s tal que

$$(C) \qquad \begin{array}{l} p(t_n) = y_n, \\ p'(t_n + c_j h) = f(t_n + c_j h, p(t_n + c_j h)), \quad j = 1, \ldots, s. \end{array}$$

Satisfaciendose estas $s + 1$ condiciones tomamos $y_{n+1} = p(t_{n+1})$.

Resultado: Obtendremos un método Runge-Kutta!!!

Método de colocación

Sean los polinomios (de Lagrange)

$$q(\tau) = \prod_{j=1}^{s}(\tau - c_j), \qquad q_\ell(\tau) = \frac{q(\tau)}{(\tau - c_\ell)}, \qquad \ell = 1, \ldots, s.$$

Lema

Sea $c \in \mathbb{R}^s$ un vector de coeficientes distintos y en $[0, 1]$. Bajo las condiciones (C), $y_{n+1} = p(t_{n+1})$ es un método RK de tablero c, b, A tal que

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \frac{q_j(\tau)}{q_j(c_j)} d\tau, \qquad i, j = 1, \ldots, s,$$

$$b_j = \int_0^{1} \frac{q_j(\tau)}{q_j(c_j)} d\tau, \qquad j = 1, \ldots, s.$$

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**:

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

Cómo probar las condiciones de orden

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:

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

Entonces, $R_n(h) = O(h^{p+1})$ y error de truncatura $O(h^p)$.
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 $g^{(i+1)}(0) = (i+1)G^{(i)}(0)$.
- $k_i(t_n, Y(t_n); 0) = f(t_n, Y(t_n)) = Y'(t_n)$.

Estabilidad Runge-Kutta

Dado el (PVI): $Y'(t) = \lambda Y(t)$ con $Y(0) = 1$, utilizando la segunda formulación de RK

$$\begin{array}{rcl} \xi_1 & = & y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{1j} f\left(t_n + hc_j, \xi_j\right) = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{1j} \lambda \xi_j \\ \dots & & \dots\dots \\ \xi_s & = & y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{sj} f\left(t_n + hc_j, \xi_j\right) = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{sj} \lambda \xi_j, \end{array}$$

Entonces, considerando $u = (1, \dots, 1)^t \in \mathbb{R}^s$ y $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_s)^t$, esta satisface

$$\xi = u y_n + \lambda h A \xi \ \Rightarrow \ \xi = (I - \lambda h A)^{-1} u y_n$$

donde I es la identidad de $\mathbb{R}^s$. Ahora,

$$\begin{array}{rcl} y_{n+1} & = & y_n + h \sum_{j=1}^{s} b_j f\left(t_n + hc_j, \xi_j\right) = y_n + h\lambda b^t \xi \\ & = & \left(1 + h\lambda b^t (I - \lambda h A)^{-1} u\right) y_n \end{array}$$

Estabilidad Runge-Kutta

Así, $y_{n+1} = R(\lambda h) y_n$ donde

Definición

$$R(z) = \left(1 + z b^t (I - zA)^{-1} u\right), \qquad h\lambda = z \in \mathbb{C}$$

es la función de estabilidad del método RK(c, b, A), también conocida como función de amplificación.

Observación: $R(z)$ no depende del vector de nodos c.

- **Región (dominio) de estabilidad de un RK**. Dado un método numérico RK(c, b, A) su región de estabilidad es

$$\mathcal{D}_{RK} = \{z = \lambda h \in \mathbb{C} \ : |R(z)| < 1\}.$$

- Un método **RK es A-estable** si, y solo si: $|R(z)| < 1 \ \forall z \in \mathbb{C}_-$

Ejercicio. Runge no es A-estable

Propiedades $R(z)$

Sea $\mathbb{P}_s$ el espacio vectorial de todos los polinomios de grado menor o igual que s.

Lema

- Dado un método RK de s pasos entonces existen $p \in \mathbb{P}_s$ y $q \in \mathbb{P}_s$ ($q \neq 0$) tal que su función de estabilidad $R(z) = p(z)/q(z)$.
- Si el RK es explícito $R \in \mathbb{P}_s$

Demostración

- $R(z) = 1 + zb^t(I - zA)^{-1}u$
- $(I - zA)^{-1} = (adj(I - zA))^t/det(I - zA)$.
-

Corolario

Ningún método RK explícito puede ser A-estable

Lema

Sea una función racional no constante $R(z) = p(z)/q(z)$, p, q polinomios. Entonces $|R(z)| < 1$ para todo $z \in \mathbb{C}_-$ si, y solo si:

i) Todos los polos de R ($\alpha \in \mathbb{C}$ tal que $q(\alpha) = 0$) tienen parte real positiva ($\mathrm{Re}(\alpha) > 0$).

ii) $|R(it)| \leq 1$ para todo $t \in \mathbb{R}$.