Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

Estabilidad de esquemas temporales

Sup. $q^{n+1} = \lambda q^n \quad \rightarrow \quad \lambda = \dfrac{q^{n+1}}{q^n} \in \mathbb{C}$ *factor de amplificación* del esquema numérico

$|\lambda|$ me indica si la solución numérica crece a medida que hago los pasos

$$q^{n+1} = \lambda^n q^0$$

→ la condición para que la sol. permanezca acotada es que $|\lambda| \leq 1$

La estabilidad puede analizarse también por el lado de que el esquema temporal sea convergente al achicar el paso temporal → ver Trefethen cap. 1, teorema de Dahlquist (1956)

λ depende del método y de $f(q,t) = \frac{dq}{dt}$

Aparece en una PDE con término advectivo (ondas)

Ec. de oscilación:

$$\frac{dq}{dt} = iwq = f(q)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = v \frac{\partial \phi}{\partial x} \ , \ \phi = A(t) e^{ikx} \ \rightarrow \ \frac{dA}{dt} = ik\, v\, A$$

Por ejemplo, la ec. del resorte: $\frac{dx}{dt} = v \ , \ \frac{dv}{dt} = -\frac{k}{m} x \ \rightarrow \ q = x - i\frac{v}{w} \ , w = \sqrt{\frac{k}{m}} \ , \frac{dq}{dt} = iwq$

También la ec. de rotación, por ej partícula cargada en un campo magnético uniforme:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \ , \ \mathbf{v} = (u, v, 0) \ , \ \mathbf{B} = (0, 0, B_0) \ , \ \frac{du}{dt} = \frac{qB_0}{m} v \ , \ \frac{dv}{dt} = -\frac{qB_0}{m} u$$

$$q = (u + iv) \ , \ \frac{dq}{dt} = -iwq \ , \ w = \frac{qB_0}{m}$$

Ejemplo en atmósfera: Coriolis

Solución exacta:

$$q(t) = q(0)e^{iwt} \;\rightarrow\; q(n\Delta t) = q(0)e^{iwn\Delta t} \;,\; q[(n+1)\Delta t] = q(0)e^{iw(n+1)\Delta t} = q(0)e^{iwn\Delta t}e^{iwt} = q(n\Delta t)e^{iw\Delta t}$$

$$q[(n+1)\Delta t] = \lambda_e q(n\Delta t) \quad , \lambda_e = e^{iw\Delta t} \qquad\qquad |\lambda_e| = 1$$

<u>Veamos que sucede con los distintos esquemas numéricos</u>:

Euler (adelantado) $\quad q^{n+1} = q^n + \Delta t f(q^n, n\Delta t)$

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \, iw \, q^n$$

$$q^{n+1} = (1 + iw\Delta t) \, q^n$$

tiene errores de fase chicos

$$\lambda = (1 + iw\Delta t) \qquad\qquad \lambda = |\lambda|e^{i\theta} \;,\; \tan\theta = w\Delta t \;\rightarrow\; \theta \approx w\Delta t \;\text{ para } \Delta t \text{ chico}$$

$|\lambda|^2 = 1 + w^2\Delta t^2 > 1 \rightarrow$ es incondicionalmente inestable (explota siempre) sup. esquema atrasado (implícito)

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t f^{n+1}$$

$$q^{n+1} = q^n + iw\Delta t\, q^{n+1}$$

$$q^{n+1} = \frac{1}{1 - iw\Delta t}\, q^n$$

$|\lambda| = \frac{1}{\sqrt{1 + w^2 \Delta t^2}} < 1$ $\rightarrow$ incondicionalmente estable

(incluye *amortiguamiento*)

$$\tan\theta = w\Delta t \ \ , \ \ \theta \rightarrow w\Delta t \ , \ \text{si } \Delta t \rightarrow 0$$

sup. trapezoidal: $$q^{n+1} = q^n + \frac{\Delta t}{2}(f^{n+1} + f^n)$$

$$q^{n+1} = q^n + \frac{\Delta t}{2}(iwq^{n+1} + iwq^n)$$

$$(1 - i\frac{\Delta t}{2}w)\, q^{n+1} = (1 + i\frac{\Delta t}{2}w)\, q^n$$

$$q^{n+1} = \frac{(1 + i\frac{\Delta t}{2}w)}{(1 - i\frac{\Delta t}{2}w)}\, q^n = \lambda\, q^n$$

$$|\lambda| = \frac{|1 + i\frac{\Delta t}{2}w|}{|1 - i\frac{\Delta t}{2}w|} = \frac{\sqrt{1 + \frac{w^2 \Delta t^2}{4}}}{\sqrt{1 + \frac{w^2 \Delta t^2}{4}}} = 1$$

$\rightarrow$ incondicionalmente estable

$$\tan\theta = \frac{w\Delta t}{1 - \frac{w^2 \Delta t^2}{4}} \rightarrow w\Delta t \;,\; \text{si } \Delta t \rightarrow 0$$

es un buen método para la ec. de oscilación (problemas advectivos, rotación)

Programita para comparar estos tres métodos en la integración temporal de la velocidad de una partícula cargada en campo magnético uniforme sup. esquema Matsuno (iterativo) $q^{(n+1)*} = q^n + \Delta t f^n \;\;,\;\; q^{n+1} = q^n + \Delta t f(q^{(n+1)*})$

$$q^{(n+1)*} = q^n + \Delta t\, iw\, q^n = (1 + iw\Delta t)\, q^n$$

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t\, iw\, (1 + iw\Delta t)\, q^n = [1 + iw\, \Delta t\, (1 + iw\, \Delta t)]q^n = \lambda\, q^n$$

$$\lambda = 1 - w^2 \Delta t^2 + iw\, \Delta t$$

$$|\lambda|^2 = (1 - w^2 \Delta t^2)^2 + w^2 \Delta t^2 = 1 - w^2 \Delta t^2 + w^4 \Delta t^4$$

$$\text{si}\; w\, \Delta t = 1 \rightarrow |\lambda| = 1$$

$$\text{si}\; w\, \Delta t > 1 \rightarrow |\lambda| > 1$$

$$\text{si}\; w\, \Delta t < 1 \rightarrow |\lambda| < 1$$

$\rightarrow$ es estable $\text{si}\; w\, \Delta t \leq 1 \;\; \rightarrow \;\; \Delta t \leq \dfrac{1}{w}$

condicionalmente estable

sup. RK2 $\quad q^{(n+1/2)*} = q^n + \frac{\Delta t}{2} f^n \;,\; q^{n+1} = q^n + \Delta t f(q^{(n+1/2)*})$

$$q^{(n+1/2)*} = q^n + \frac{\Delta t}{2}\, iw\, q^n = (1 + iw\frac{\Delta t}{2})\, q^n$$

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t\, iw\, (1 + iw\frac{\Delta t}{2})\, q^n = (1 + iw\,\Delta t\, - \frac{w^2 \Delta t^2}{2})\, q^n = \lambda\, q^n$$

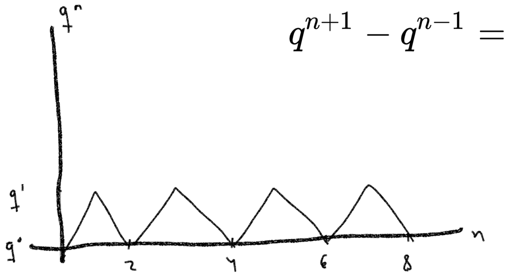
$$\lambda = (1 + iw\,\Delta t\, - \frac{w^2 \Delta t^2}{2})$$

$$|\lambda|^2 = (1 - \frac{w^2 \Delta t^2}{2})^2 + w^2 \Delta t^2 = 1 + \frac{w^4 \Delta t^4}{4} > 1$$

→ incondicionalmente inestable (aunque crece poco si Δt es chico).

Programita para comparar estos dos métodos iterativos en la integración temporal de la velocidad de una partícula cargada en campo sup. esquema leapfrog: $q^{n+1} - q^{n-1} = 2\Delta t\, f = 2\Delta t i w\, q^n$

caso especial $w = 0 \;\rightarrow\; \dfrac{dq}{dt} = 0 \;\rightarrow\; q(t) = cte$



$q^{n+1} - q^{n-1} = 0$ $\rightarrow$ sol. numérica va a depender del valor inicial q^0

y de uno adicional q^1

si $q^0 \neq q^1 \rightarrow q^{\text{par}} = q^0 \;,\; q^{\text{impar}} = q^1$

y aparece una oscilación espuria

Para ver la estabilidad observemos que: $q^{n+1} = \lambda q^n \;,\; q^n = \lambda q^{n-1} \;\rightarrow\; q^{n+1} = \lambda^2 q^{n-1}$

reemplazando en el esq. numérico tenemos:

$$\lambda^2 - 1 - 2\, iw\,\Delta t\,\lambda = 0 \;\rightarrow\; \lambda_{1,2} = i\Omega \pm \sqrt{1-\Omega^2} \;,\Omega = w\,\Delta t$$

$\lambda_1 \to 1$, si $\Delta t \to 0$ me da la solución *física* $q_1^n = \lambda_1^n q_1^0$

$\lambda_2 \to -1$, si $\Delta t \to 0$ es una solución *computacional* $q_2^n = \lambda_2^n q_2^0$

En gral la solución numérica va a ser una comb. lineal de las dos:

$$q^n = a\lambda_1^n q_1^0 + b\lambda_2^n q_2^0$$

y depende de cómo elijamos q^0 y q^1

O sea, el esquema numérico precisa dos c.i. pero sabemos que la ec. dif. sólo precisa una, esa es la c.i. que llamamos *física*, mientras que la otra la llamamos *computacional*

Veamos la estabilidad,

Caso $w\Delta t < 1 \to |\Omega| < 1 \to \sqrt{1-\Omega^2} \in \mathbb{R} \to |\lambda_1| = |\lambda_2| = 1 \to$ ambos modos son estables

$$\lambda_1 = e^{i\theta_1} \ , \ \lambda_2 = e^{i\theta_2}$$

$$\cos\theta_1 = \sqrt{1-\Omega^2} \ , \ \sin\theta_1 = \Omega$$

$$\cos\theta_2 = -\sqrt{1-\Omega^2} \ , \ \sin\theta_2 = \Omega$$

$$\theta_2 = \pi - \theta_1$$

$$q_1^{n+1} = e^{i\theta} q_1^n$$

$$q_2^{n+1} = e^{i(\pi-\theta)} q_2^n$$

si $\Delta t \to 0 \to \Omega \to 0$, $\theta \approx \Omega \to 0$, $\pi - \theta \to \pi$

Caso $w\Delta t = 1$

da $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$, $\theta = \pi/2$

estable, pero mucho error de fase

Caso $|w\Delta t| > 1$ da alguno de los modos inestable

Con el método AB2 $$q^{n+1} - q^n = i\Omega(\frac{3}{2}q^n - \frac{1}{2}q^{n-1})$$

$$\lambda^2 - \lambda(1 + \frac{3}{2}i\Omega) + i\frac{1}{2}\Omega = 0$$

da $\lambda_1 \to 1$, si $\Omega \to 0$

$\lambda_2 \to 0$, si $\Omega \to 0$

$\to$ modo computacional está amortiguado

$$\text{si } \Omega \ll 1 \to |\lambda_1| = 1 + \frac{\Omega^2}{8}$$

el modo físico es inestable pero suficientemente chico

Veamos la estabilidad en la *ec. de decaimiento*:

$$\frac{dq}{dt} = -\frac{1}{\tau} q \quad , \quad \tau > 0$$

(ej: circuitos RL, RC)

Veremos que la ec. de decaimiento aparece en las PDE parabólicas

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \;,\; \phi = A(t) e^{ikx} \;\rightarrow\; \frac{dA}{dt} = -\kappa k^2 A$$

→ sol. exacta $\quad q(t) = q(0) e^{-t/\tau} \;,\; q(n\Delta t) = q(0) e^{-n\Delta t/\tau} \;\rightarrow\; \lambda_e = e^{-\Delta t/\tau}$

Sup. Euler: $\quad q^{n+1} - q^n = -\frac{\Delta t}{\tau} q^n$

$$q^{n+1} = (1 - \frac{\Delta t}{\tau})\, q^n$$

$$\lambda = 1 - \frac{\Delta t}{\tau} \Rightarrow \text{si } \Delta t \rightarrow 0 \,,\, \lambda \simeq \lambda_e$$

$$|\lambda| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 - \frac{\Delta t}{\tau} \leq 1 \Rightarrow 0 \leq \frac{\Delta t}{\tau} \leq 2 \Rightarrow \Delta t \leq 2\tau$$

→ es condicionalmente estable

Otros métodos para la ec. de decaimiento:

atrasado (implícito) → incondicionalmente estable

trapezoidal → incondicionalmente estable

Matsuno, RK2, AB2 → condicionalmente estable

leapfrog → incondicionalmente inestable (el modo computacional crece sin límites ya que $|\lambda_2| > 1$)

→ no conviene usar leapfrog si hay alguna parte difusiva

Qué hacemos si la f(q,t) no es del tipo oscilatorio o de decaimiento ? → linealizamos y analizamos la estabilidad del esquema numérico en términos del error

Veamos algunos casos, por ej. con el esquema de Euler (adelantado):

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t \, f(q^n + \epsilon^n, t^n)$$

$$f(q^n + \epsilon^n, t^n) = f(q^n, t^n) + \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n \epsilon^n + \ldots$$

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t \, f(q^n, t^n) + \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n \epsilon^n + \ldots$$

$$\epsilon^{n+1} = \left[1 + \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n\right] \epsilon^n + \ldots$$

$$\epsilon^{n+1} = \lambda \, \epsilon^n \qquad \lambda = 1 + \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n$$ → factor de amplificación (en Euler adelantado)

Por ejemplo, si $f(q,t) = -\frac{1}{\tau} q \quad , \quad \tau > 0$ (decaimiento)

$$\lambda = 1 + \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q} \right)_n = 1 - \frac{\Delta t}{\tau}$$

cómo ya habíamos visto $|\lambda| \leq 1 \Rightarrow \Delta t \leq 2\tau$

condicionalmente estable

si $f(q,t) = iw\, q$ (oscilación)

$$\lambda = 1 + \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q} \right)_n = 1 + iw\, \Delta t$$

$$|\lambda|^2 = 1 + w^2 \Delta t^2 > 1$$

incondicionalmente inestable

Veamos en el caso de un Euler atrasado (implícito)

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t\ f(q^{n+1} + \epsilon^{n+1}, t^{n+1})$$

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t\ f(q^{n+1}, t^{n+1}) + \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{n+1} \epsilon^{n+1} + \ldots$$

$$\epsilon^{n+1} \left[1 - \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{n+1}\right] = \epsilon^n$$

$$\lambda = \frac{1}{1 - \Delta t \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{n+1}}$$

$$|\lambda| \leq 1 \ , \ \forall\ \Delta t \ \text{ si } \ \frac{\partial f}{\partial q} < 0 \ \text{ (decaimiento) o } \ \frac{\partial f}{\partial q} = iw \ \text{ (oscilatorio)}$$

es incondicionalmente estable en ambos casos, cómo habíamos visto

Idem para el trapezoidal:

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \frac{\Delta t}{2}\left[\, f(q^{n+1} + \epsilon^{n+1}, t^{n+1}) + f(q^n + \epsilon^n, t^n)\right]$$

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \frac{\Delta t}{2}\left[f(q^{n+1}, t^{n+1}) + \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{n+1} \epsilon^{n+1} + f(q^n, t^n) + \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n \epsilon^n\right]$$

$$\epsilon^{n+1}\left[1 - \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{n+1}\right] = \epsilon^n \left[1 + \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n\right]$$

$$\lambda = \frac{1 + \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_n}{1 - \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{n+1}}$$

$$|\lambda| \leq 1 \ , \ \forall\, \Delta t \ \text{ si } \ \frac{\partial f}{\partial q} < 0 \ \text{ (decaimiento) } \ \text{o} \ \frac{\partial f}{\partial q} = iw \ \text{ (oscilatorio)}$$

Veamos para el RK2

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t \; f(q^{n+1/2} + \epsilon^{n+1/2}, t^{n+1/2})$$

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t \; f\left(q^n + \epsilon^n + \frac{\Delta t}{2} f(q^n + \epsilon^n, t^n), t^{n+1/2}\right)$$

$$q^{n+1} + \epsilon^{n+1} = q^n + \epsilon^n + \Delta t \; f\left(q^n + \frac{\Delta t}{2} f(q^n, t^n), t^{n+1/2}\right) + \Delta t \frac{\partial f}{\partial q}\left(\epsilon^n + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial f}{\partial q}\epsilon^n\right)$$

$$\epsilon^{n+1} = \epsilon^n \left[1 + \Delta t \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{\Delta t^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)^2\right]$$

$$\lambda = 1 + \alpha + \frac{\alpha^2}{2} \quad , \quad \alpha = \Delta t \; \frac{\partial f}{\partial q}$$

Para decaimiento $\frac{\partial f}{\partial q} = -\frac{1}{\tau} < 0$

Para el oscilatorio $\frac{\partial f}{\partial q} = iw \quad |\lambda|^2 = 1 + \frac{w^4 \Delta t^4}{4} > 1$

incond. inestable

da estable si $\Delta t \leq 2\tau$