IMT1001: Introducción a la Ingeniería Matemática

Modulo Análisis Numérico
Profesor Manuel A. Sánchez
manuel.sanchez@uc.cl

Clase 2: Métodos numéricos para ecuaciones diferenciales ordinarias
Metodos de alto orden
Sistemas de EDOS

Métodos numéricos de orden mas alto.

Métodos de Runge-Kutta de s-stages.

$$y_h^{n+1} = y_h^n + h\sum_{i=1}^{s} b_i k_i$$

$$k_i = f(t_n + c_i h, y_h^n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j),$$

Tabla de Butcher

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \dots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \dots & b_s \end{array}$$

para $i = 1, ..., s$

Si los coeficientes de un método de Runge-Kutta $a_{ij} = 0$ si $j > i$, para $i, j = 1, ..., s$ entonces el método es expl'icito.

Ejemplos:

1. Método de Euler explícito. $y_h^{n+1} = y_h^n + hf(t_n, y_h^n)$

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

2. Método de Crank - Nicolson.

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

$$\begin{aligned} y_h^{n+1} &= y_h^n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) \\ k_1 &= f(t_n + c_1 h, y_h^n + h(a_{11} k_1 + a_{12} k_2)) \\ k_1 &= f(t_n + c_2 h, y_h^n + h(a_{21} k_1 + a_{22} k_2)) \end{aligned}$$

Reemplazamos los coeficientes de la tabla

$$\begin{aligned} y_h^{n+1} &= y_h^n + h(k_1/2 + k_2/2) \\ k_1 &= f(t_n + 0h, y_h^n + h(0k_1 + 0k_2)) \\ k_2 &= f(t_n + 1h, y_h^n + h(k_1/2 + k_2/2)) \end{aligned}$$

$$\boxed{y_h^{n+1} = y_h^n + \frac{h}{2}(f(t_n, y_h^n) + f(t_{n+1}, y_h^{n+1})}$$

Ejemplos:

3. Runge-Kutta explícito de orden 2 (método de Heun).

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

4. Runge-Kutta explícito de orden 3 .

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 2 & 0 \\ \hline & 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{array}$$

5. Runge-Kutta explícito de orden 4.

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6 \end{array}$$

Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias

Las incógnitas son las funciones $(y_1, y_2, ..., y_m)$, y tenemos funciones $f_1, f_2, ..., f_m : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ solución del sistema

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= f_1(t, (y_1, y_2, ..., y_m)) \\ \frac{dy_2}{dt} &= f_2(t, (y_1, y_2, ..., y_m)) \qquad , t \in [t_0, T] \\ &\vdots \\ \frac{dy_m}{dt} &= f_m(t, (y_1, y_2, ..., y_m)) \end{aligned}$$

Condición inicial:

$$\begin{aligned} y_1(t_0) &= (y_0)_1 \\ y_2(t_0) &= (y_0)_2 \\ &\vdots \\ y_m(t_0) &= (y_0)_m \end{aligned}$$

SIR (Susceptible - Infected - Recovered) modelo de epidemias

Este es un modelo determinístico introducido por Kermarck & McKendricken 1927. Dividimos a la población de estudio en 3 clases:

- $S(t)$: número de individuos susceptibles a la enfermedad en el tiempo t.
- $I(t)$: número de individuos infectados por la enfermedad en el tiempo t, asumiendo que estos pueden propagar la enfermedad a la clase susceptible.
- $R(t)$: número de individuos que han sido infectados y luego removidos de la posibilidad de ser infectados nuevamente o propagar la enfermedad.

Modelos clásicos: SIR (virus), SIS (bacterias), SIRS.

Modelo de EDO SIR

$$\frac{dS}{dt} = -\beta SI$$
$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$
$$\frac{dR}{dt} = \gamma SI$$

Condición inicial:

$$S(0) = S_0 = N - I_0$$
$$I(0) = I_0$$
$$R(0) = 0$$

Asumimos

- Un individuo promedio de la población tiene contacto suficiente para transmitir la infección con βN otros individuos, por unidad de tiempo, donde N representa el numero total de individuos en la población.

- Los individuos salen de esta clase a una razón de γI por unidad de tiempo.

- No hay entrada o salida de individuos de la población. La población se asume de tamaño constante

Observe que este es un sistema autónomo de ecuaciones diferenciales ordinarias. Respecto a la notación anterior lo escribimos como:

$$
\begin{aligned}
y_1 &= S, & \qquad f_1(t, y_1, y_2, y_3) &= -\beta y_1 y_2 \\
y_2 &= I, & \qquad f_2(t, y_1, y_2, y_3) &= \beta y_1 y_2 - \gamma y_2 \\
y_3 &= R, & \qquad f_3(t, y_1, y_2, y_3) &= \gamma y_2
\end{aligned}
$$

Escenario epidémico:

- Tenemos $\frac{dS}{dt} < 0$, para todo $t > 0$;
- Tenemos $\frac{dI}{dt} > 0 \iff S > \beta/\gamma$.

Así, si $I(t)$ se incrementa si $S(t) > \beta/\gamma$, e $I(t)$ decrece si $S(t) < \beta/\gamma$. La cantidad $R_0 = \beta S_0/\gamma$ se denomina umbral (threshold). Si $R_0 < 1$ la infección no se propaga y si $R_0 > 1$ tenemos una epidemia.

R_0: el número de infecciones secundarias causadas por un infectado cuando se introduce en una población susceptible con $S_0 \approx N$ sobre el curso de infección de este infectado.

Análisis del sistema SIR

Observe que: $\frac{d}{dt}(S+I) = -\gamma I \implies -\gamma \int_0^\infty I(t)dt = \int_0^\infty \frac{d}{dt}(S(t)+I(t))dt$

Asumiendo que $I(t) \to 0$ cuando $t \to \infty$ y que $S(t)+I(t) \to S_\infty$ cuando $t \to \infty$, tenemos que

$$\gamma \int_0^\infty I(t)dt = N - S_\infty$$

Desde la primera ecuación tenemos: $\frac{dS}{dt} = -\beta SI \implies \frac{1}{S}\frac{dS}{dt} = -\beta I$

$$\int_0^\infty \frac{1}{S}\frac{dS}{dt}dt = -\beta \int_0^\infty I(t)dt \implies \ln(S(t))\,|_0^\infty = -\frac{\beta}{\gamma}(N - S_\infty)$$

$$\ln(S_0/S_\infty) = (\frac{\beta}{\gamma}N - \frac{\beta}{\gamma}S_\infty) = R_0(\frac{N}{S_0} - \frac{S_\infty}{N}) \approx R_0(1 - \frac{S_\infty}{N})$$

La última ecuación nos permite stimar el parámetro de umbral, sabiendo el tamaño final de la epidemia $(N - S_\infty)$.

Ejemplo:

Para un estudio de epidemia de influenza tenemos que los porcentajes de población del modelo son $s_0 = 0.911$ y $s\infty = 0.513$. De la formula obtnemos:

$$\ln(S_0/S_\infty) = R_0(1 - S_\infty/N) \quad \Longrightarrow \quad R_0 \approx= 1.18.$$

Métodos numéricos para integrar el modelo SIR

Euler Explícito:

$$
\begin{aligned}
S_h^{n+1} &= S_h^n + h(-\beta S_h^n I_h^n) \\
I_h^{n+1} &= I_h^n + h(\beta S_h^n I_h^n - \gamma I_h^n) \\
R_h^{n+1} &= R_h^n + h(\gamma I_h^n)
\end{aligned}
$$

Euler Implícito:

$$
\begin{aligned}
S_h^{n+1} &= S_h^n + h(-\beta S_h^{n+1} I_h^{n+1}) \\
I_h^{n+1} &= I_h^n + h(\beta S_h^{n+1} I_h^{n+1} - \gamma I_h^{n+1}) \\
R_h^{n+1} &= R_h^n + h(\gamma I_h^{n+1})
\end{aligned}
$$

Sistemas Hamiltonianos

Describimos la dinámica de us sistma de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden **Hamiltoniano** por medio de coordenadas canónicas $y = (p, q) \in \mathbb{R}^{2n}$ por

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

donde la función $\mathcal{H}(p(t), q(t), t)$ es conocido como el Hamiltoniano y frecuentemente corresponde a la enrgía del sistema.

Ejemplo: Oscilador armónico

Considere la función $\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2$. El siguiente sistema de EDO de primer orden corresponde a un sistma Hamiltoniano con la función $\mathcal{H}$

$$\frac{dp}{dt} = -q$$
$$\frac{dq}{dt} = p$$

Propiedad de conservación de energía

Si $\mathcal{H}(p(t), q(t), t) = \mathcal{H}(p(t), q(t))$, es decir este no depende de forma explícita de t. Entonces,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q}\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}\left(-\frac{\partial H}{\partial q}\right) + \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} = 0$$

Por lo tanto $\mathcal{H}(p(t), q(t)) = \mathcal{H}(p(0), q(0))$, para todo $t > 0$.

Método de Euler explicito para sistema Hamiltoniano

$$p_h^{n+1} = p_h^n - h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p_h^n, q_h^n, t_n)$$
$$q_h^{n+1} = q_h^n + h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p_h^n, q_h^n, t_n)$$

Métodos de Euler simplectico

$$p_h^{n+1} = p_h^n - h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p_h^{n+1}, q_h^n, t_n)$$
$$q_h^{n+1} = q_h^n + h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p_h^{n+1}, q_h^n, t_n)$$

$$p_h^{n+1} = p_h^n - h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p_h^n, q_h^{n+1}, t_n)$$
$$q_h^{n+1} = q_h^n + h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p_h^n, q_h^{n+1}, t_n)$$

Ejemplo: Euler simplectico para el oscilador armónico

$$\boxed{\begin{aligned} p_h^{n+1} &= p_h^n - hq_h^n \\ q_h^{n+1} &= q_h^n + hp_h^{n+1} \end{aligned}}$$

La energía discreta para el método de Euler simplectico es $\mathcal{H}_h(p,q) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2 + hpq$. Esta satisface que

$$\mathcal{H}_h(p_h^{n+1}, q_h^{n+1}) = \mathcal{H}_h(p_h^n, q_h^n)$$

Métodos de punto medio implícito (simplectico)

$$\boxed{\begin{aligned} p_h^{n+1} &= p_h^n - h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p_h^{n+1/2}, q_h^{n+1/2}, t_n + h/2) \\ q_h^{n+1} &= q_h^n + h\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p_h^{n+1/2}, q_h^{n+1/2}, t_n h/2) \end{aligned}}$$

donde

$$p_h^{n+1/2} = (p_h^{n+1} + p_h^n)/2$$
$$q_h^{n+1/2} = (q_h^{n+1} + q_h^n)/2$$

Integrador de integrales cuadráticas.

Si la función $\mathcal{H}$ es cuadrática en p, q entonces el metodo de punto medio implicito conserva la energia $\mathcal{H}$ en cada paso.