Métodos implícitos: Aplicación a problemas con características especiales: Parte I

Computación en ciencia e ingeniería: simulación numérica

MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA COMPUTACIONAL Y SISTEMAS INTELIGENTES,

Euskal Herriko Unibertsitatea / Universidad del Pais Vasco (UPV/EHU)

Supongamos que queremos resolver numéricamente el problema

$$\frac{d}{dt}u = f(t, u), \quad u(t_0) = u_0, \tag{1}$$

es decir, que queremos aproximar la solución $u(t)$ para $t \in [t_0, T_\mathrm{f}]$.
Supongamos, para simplificar que queremos aproximar $u(t)$ para una discretización uniforme del intervalo temporal $[t_0, T_\mathrm{f}]$), es decir, queremos obtener

$$u_k \approx u(t_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n,$$

donde $t_k = t_0 + k\,h$ y $h = (T_\mathrm{f} - t_0)/n$.
Sabemos que cuanto más fina es la discretización del tiempo, es decir, cuanto más pequeño es h, menor va a ser el error cometido.

Conocemos ya varios métodos de Runge-Kutta que sirven para dicho objetivo. Sin embargo, en algunos casos, cuando el sistema (1) presenta ciertas características especiales, dichos métodos no son muy apropiados.

Por ejemplo:

- Si $\frac{d}{dt}u = f(t,u)$ es un sistema conservativo, donde la energía del sistema y posiblemente otras cantidades se conservan a lo largo de la solución, y el intervalo temporal en que nos interesa aproximar la solución es muy largo. (Este es el caso del problema del satélite artificial, si nos interesa estudiar la evolución de la posición del satélite a tiempos muy largos).
- Si el sistema de EDO es de la forma

$$\frac{d}{dt}u = J \cdot u + g(t,u), \quad u \in \mathbb{R}^d,$$

  donde J es una matriz de dimensión $d \times d$ con algunas componentes muy grandes con respecto a los valores que toma $g(t,u)$. (En dicho caso, se dice que el sistema de EDOs es "stiff").

Métodos implícitos

Uno de los métodos implícitos apropiados para sistemas de EDOs conservativos más sencillos es el

Método implícito del punto medio

La aproximación $u_{j+1} \approx u(t_{j+1})$ se calcula a partir de u_j como la solución de la ecuación

$$u_{j+1} = u_j + \tfrac{h}{2} f\left(t_j + \tfrac{h}{2}, \tfrac{1}{2}(u_j + u_{j+1})\right). \tag{2}$$

Es decir, u_{j+1} está definido en función de t_j, u_j, t_{j+1} implícitamente por medio de la ecuación (2). Precisión: Método de orden 2.

Un método implícito de similares características:

Método del trapecio

$$u_{j+1} = u_j + \frac{h}{2}\left(f(t_j, u_j) + f(t_{j+1}, u_{j+1})\right)$$

Precisión: Método de orden 2.

Implementación de métodos implícitos

¿Cómo se puede implementar un paso

$$u_{j+1} = u_j + \frac{h}{2} f\left(t_j + \frac{h}{2}, \frac{1}{2}(u_j + u_{j+1})\right)$$

del método del punto medio?

Iteración del punto fijo

- $u_{j+1}^{[0]} = u_j$,
- Calcular para $k = 0, 1, 2, \ldots$

$$u_{j+1}^{[k+1]} = u_j + \frac{h}{2} f\left(t_j + \frac{h}{2}, \frac{1}{2}(u_j + u_{j+1}^{[k]})\right),$$

- Si $||u_{j+1}^{[k+1]} - u_j^{[k]}|| \leq \mathrm{itol}$, entonces $u_{j+1} := u_{j+1}^{[k+1]}$.

Implementación de métodos implícitos

La implementación del método del trapecio

$$u_{j+1} = u_j + \frac{h}{2}\left(f(t_j, u_j) + f(t_{j+1}, u_{j+1})\right)$$

se puede hacer de forma parecida al del punto medio:

Iteración del punto fijo

- $v_j = u_j + \frac{h}{2} f(t_j, u_j)$,
- $u_{j+1}^{[0]} = u_j$,
- Calcular para $k = 0, 1, 2, \dots$

$$u_{j+1}^{[k+1]} = v_j + \frac{h}{2} f(t_{j+1}, u_{j+1}^{[k]}),$$

- Si $||u_{j+1}^{[k+1]} - u_{j+1}^{[k]}|| \leq \mathrm{itol}$, entonces $u_{j+1} := u_{j+1}^{[k+1]}$.

Métodos de Runge-Kutta implícitos

Runge-Kutta de colocación de Gauss de orden 4 (RKG4)

$$u_{j+1} = u_j + \frac{h}{2}\,(K_1 + K_2),$$

donde K_1 y K_2 están definidos de forma implícita por medio de

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_j + c_1 h, u_j + h\,(a_{11}\,K_1 + a_{12}\,K_2)), \\ K_2 &= f(t_j + c_2 h, u_j + h\,(a_{21}\,K_1 + a_{22}\,K_2)), \end{aligned}$$

con los coeficientes

$$a_{11} = a_{22} = \frac{1}{4}, \quad a_{12} = \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}, \quad a_{21} = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6},$$

y $c_1 = a_{11} + a_{12}$, $c_2 = a_{21} + a_{22}$.

También es apropiado para la resolución numérica de problemas conservativos.

Implementación del método implícito RKG4:

Iteración del punto fijo

- $K_1^{[0]} = f(t_j, u_j)$, $K_2^{[0]} = f(t_j, u_j)$,
- Calcular para $j = 0, 1, 2, \ldots$

$$\begin{aligned} K_1^{j+1} &= f(t_j + c_1 h, u_j + h\,(a_{11}\,K_1^{[j]} + a_{12}\,K_2^{[j]})), \\ K_2^{[j+1]} &= f(t_j + c_2 h, u_j + h\,(a_{21}\,K_1^{[j]} + a_{22}\,K_2^{[j]})), \end{aligned}$$

- Si $\max(||K_1^{[j+1]} - K_1^{[j]}||, ||K_2^{[j+1]} - K_2^{[j]}||) \leq \mathrm{itol}$, entonces $K_i := K_i^{[j+1]}$ para $i = 1, 2$,
- $u_{j+1} = u_j + \frac{h}{2}(K_1 + K_2)$.

Otro método de Runge-Kutta implícito muy conocido es el

Método de Radau de orden 5

$$u_n = u_{n-1} + \frac{h}{36}\left((16-\sqrt{6})K_1 + (16+\sqrt{6})K_2 + 6K_3\right)$$

donde K_1, K_2, y K_3 están definidos de forma implícita por medio de

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_{n-1} + c_1 h, u_{n-1} + h\,(a_{11}\,K_1 + a_{12}\,K_2 + a_{13}\,K_3)), \\ K_2 &= f(t_{n-1} + c_2 h, u_{n-1} + h\,(a_{21}\,K_1 + a_{22}\,K_2 + a_{23}\,K_3)), \\ K_3 &= f(t_{n-1} + c_3 h, u_{n-1} + h\,(a_{31}\,K_1 + a_{32}\,K_2 + a_{33}\,K_3)), \end{aligned}$$

con

$$c_1 = \frac{4-\sqrt{6}}{10}, \quad c_2 = \frac{4+\sqrt{6}}{10}, \quad c_3 = 1,$$

y los a_{ij} están determinados de forma única por las siguientes ecuaciones:

$$a_{i1}\,c_1^{j-1} + a_{i2}\,c_2^{j-1} + a_{i3}\,c_3^{j-1} = \frac{c_i^j}{j}, \quad i = 1,2,3, \quad j = 1,2,3.$$

No es muy apropiado para problemas conservativos. Es en cambio muy útil para sistemas mecánicos con amortiguación (, es decir, con disipación de energía), o problemas con componentes con oscilaciones muy rápidas de muy pequeña amplitud.