INSTITUTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CHILE

IMT3410: Métodos para ecuaciones diferenciales

Clase 5

Manuel A. Sánchez

2024.08.21

Sistemas rígidos o stiff

Problema rígido escalar

En esta clase se introducirán lo que se conoce como sistemas rígidos. Considere el ejemplo escalar modelo

$$\begin{cases} y' = \lambda y, \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

cuya solución está dada trivialmente por $y(x) = y_0 e^{\lambda x}$.
Observe que la solución exacta es **exponencialmente decreciente** si $\lambda < 0$,

¿podemos garantizar que todo esquema numérico sea también decreciente?

Problema rígido escalar

Consideremos el esquema de Euler explícito:

$$\begin{cases} y' = \lambda y, \\ y(0) = y_0, \end{cases} \qquad \Longrightarrow \qquad y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n$$

Luego

$$y_{n+1} = (1 + h\lambda)y_n = (1 + h\lambda)^n y_0.$$

Para garatinzar que la solución numérica sea decreciente necesitamos que:

$$|1 + h\lambda| < 1 \implies 0 < h|\lambda| < 2$$

En caso contrario, la aproximación numérica oscilará con magnitud creciente.

Problema rígido escalar

Consideremos el esquema de Euler explícito:

$$\begin{cases} y' = \lambda y, \\ y(0) = y_0, \end{cases} \qquad \Longrightarrow \qquad y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n$$

Luego

$$y_{n+1} = (1 + h\lambda)y_n = (1 + h\lambda)^n y_0.$$

Para garatinzar que la solución numérica sea decreciente necesitamos que:

$$|1 + h\lambda| < 1 \implies 0 < h|\lambda| < 2$$

En caso contrario, la aproximación numérica oscilará con magnitud creciente.

Ver ejemplo: $y' = -20y, y(0) = 1.$ Comparar con Euler implicito.

Sistemas rígidos

Sea la matriz $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ y consideremos el sistema lineal de

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = A\mathbf{y}, \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \end{cases}$$

Asumimos, por simplicidad, que todos los valores propios tienen multiplicidad algebraica simple. Sea $MAM^{-1} = \Lambda$ la diagonalización de A. Si hacemos el cambio de variable $\mathbf{z} = M\mathbf{y}$, entonces

$$\begin{cases} \mathbf{z}' = \Lambda\mathbf{z}, \\ \mathbf{z}(0) = M\mathbf{y}_0. \end{cases}$$

De esta manera, nos quedan m EDOs **desacopladas** con solución

$$\mathbf{z} = (z_j), \qquad z_j(x) = z_j(0)e^{\lambda_j x}, \quad j = 1, 2 \ldots m,$$

Sistemas rígidos

Hacemos el análisis de comportamiento de la solución. Si los valores propios λ_j son reales y negativos, entonces obsrvamos que

$$\lim_{x\to\infty} \|\mathbf{z}(x)\| \to 0 \quad \text{implica} \quad \lim_{x\to\infty} \|\mathbf{y}(x)\| \to 0$$

Al aplicar el esquema de Euler explícito, obtenemos que:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + hA\mathbf{y}^n = (I + hA)\mathbf{y}^n = M(I + h\Lambda)M^{-1}\mathbf{y}^n$$

$$\mathbf{z}^{n+1} = (I + h\Lambda)\mathbf{z}^n \qquad \Longrightarrow \qquad z_j^{n+1} = z_j^n + h\lambda_j z_j^n$$

necesitaremos $h|\lambda_j| < 2$, $j = 1, 2 \dots m$, para asegurar el decaimiento de la aproximación numérica.

Ejemplo: que tan malo puede ser?

Considere el PVI

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = A\mathbf{y}, \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0. \end{cases}, \quad \text{con} \quad A = \begin{bmatrix} -8003 & 1999 \\ 23988 & -6004 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Los valores propios de A son $\lambda_1 = -7$ y $\lambda_2 = -14000$, por lo cual la solución exacta al problema está dada por

$$\mathbf{y}(x) = \begin{bmatrix} e^{-7x} \\ 4e^{-14000x} \end{bmatrix}$$

Sistema lineal rígido

De manera general, un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias lineal **rígido** se caracteriza por tener todos los valores propios de A con parte real negativa, a la vez que la razón entre el valor propio más grande y más pequeño en magnitud es grande también. Otros conceptos asociados a rigidez:

- métodos numéricos son numéricamente inestables.
- ecuación tiene solución con rápidas variaciones.

Ejemplo sistema lineal stiff

Considere el sistema: $\quad \mathbf{y}' = A\mathbf{y}, \quad$ con $\quad \Lambda = \begin{bmatrix} -100 & 1 \\ 0 - 1/10 & \end{bmatrix}$

Observe que: $\quad A = V\Lambda V^{-1}, \quad$ con $V = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 999/10 \end{bmatrix}, \quad \Lambda = \begin{bmatrix} -100 & 0 \\ 0 & -1/10 \end{bmatrix}$

Así las soluciones se escribe como

$$\mathbf{y}(t) = \exp(tA)\mathbf{y}_0 = V\exp(t\Lambda)V^{-1}\mathbf{y}_0 = \mathbf{x}_1\exp(-100t) + \mathbf{x}_2\exp(-t/10) \approx \mathbf{x}_2\exp(-t/10)$$

Las iteraciones del método de **Euler explícito** son: $\quad \mathbf{y}^n = (I + hA)\mathbf{y}^0 = V(I + h\Lambda)V^{-1}\mathbf{y}_0$

Calculamos

$$(I + h\Lambda)^n = \begin{bmatrix} (1 - 100h)^n & 0 \\ 0 & (1 - h/10)^n \end{bmatrix}$$

Ejemplo sistema lineal stiff

Así

$$\mathbf{y}^n = \mathbf{x}_1(1-100h)^n + \mathbf{x}_2(1-h/10)^n$$

Observamos que, si $h > 1/50$, entonces $1-100h < -1$, y así la iteración de Euler crece geométricamente en maginitud.
Suponga que elegimos una condición inicial idética al vector propio correspondiente al valor propio $-1/10$, esto es: $\mathbf{y}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 999/10 \end{bmatrix}$
Entonces, en aritmética exacta $\mathbf{x}_1 = 0$, $\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}_0$. Así la iteración de Euler es

$$\mathbf{y}^n = (1-h/10)^n \mathbf{y}_0.$$

Así, esperaríamos que todos los cálculos no dieran bien

Regla trapezoidal

Si ahora analizamos las iteraciones de la regla trapezoidal, tenemos:

$$(I - \frac{h}{2}A)\mathbf{y}_1 = (I + \frac{h}{2}A)\mathbf{y}_0$$
$$(I - \frac{h}{2}A)\mathbf{y}_2 = (I + \frac{h}{2}A)\mathbf{y}_1 = (I + \frac{h}{2}A)(I - \frac{h}{2}A)^{-1}(I + \frac{h}{2}A)\mathbf{y}_0$$

en general

$$\mathbf{y}_n = \left((I - \frac{h}{2}A)^{-1}(I + \frac{h}{2}A)\right)^n \mathbf{y}_0$$

Así

$$\mathbf{y}^n = \mathbf{x}_1\left(\frac{1-50h}{1+50h}\right)^n + \mathbf{x}_2\left(\frac{1-h/20}{1+h/20}\right)^n$$

Por lo tanto:

$$\left|\frac{1-50h}{1+50h}\right|, \left|\frac{1-h/20}{1+h/20}\right| < 1 \quad \Longrightarrow \quad \lim_{n\to\infty} \mathbf{y}^n = 0$$

Problemas no lineales

Considere una EDO modelo de la forma $y'(x) = f(x, y)$, donde la función f es no-lineal. Ahora, tomando la linearización en torno a algún punto x_n, la EDO queda como

$$y'(x) = y'(x_n) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y(x_n))(x - x_n) + J(x_n)(y(x) - y(x_n)) + \dots \tag{1}$$

donde J corresponde a la matriz Jacobiana definida como $J(x_n) = \nabla_y f(x_n, y(x_n))$. El problema rígido se encuentra justamente en $J(x_n)$, donde uno esperaría que los valores propios tengan parte real negativa y la razón del mayor valor propio y el menor es grande.

Ejemplo:

Considere el problema de la reacción de Robertson

$$\begin{cases} x' = & -0.04x + 10^4 yz \\ y' = & 0.04x - 10^4 yz - 3 \cdot 10^7 y^2 \\ z' = & 3 \cdot 10^7 y^2 \end{cases}$$

Observación

- Que los valores propios de $J(x_n)$ tengan parte real negativa y la razón entre la parte real mayor y menor sea grande es considerado rígido o stiff.
- La matriz Jacobiana con valores propios con parte real negativa pero la solcuión

$$\lim_{x \to \infty} \|y(x)\|$$

crece exponencialmente

Estabilidad para métodos de paso múltiple

Método de pasos múltiples

Recordamos la forma general de un método de pasos múltiples

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(x_{n+j}, y_{n+j})$$

Aplicando este esquema al problema rígido escalar lineal ($y' = \lambda y$), se obtiene

$$\sum_{j=0}^{k} (\alpha_j - \lambda h \beta_j) y_{n+j} = 0.$$

Recordando las definiciones del primer y segundo polinomio característico

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j z^j \quad \text{y} \quad \sigma(z) = \sum_{j=0}^{k} \beta_j z^j$$

Definimos el **polinomio de estabilidad** como: $\pi(z_j \lambda h) = \sum_{j=0}^{k} (\alpha_j - \lambda h \beta_j) z^j = \rho(z) - \lambda h \sigma(z)$

Estabilidad

A continuación se definen distintos tipos de estabilidad para métodos de pasos múltiples, cuyo comportamiento queda completamente caracterizado por los polinomios característicos o de estabilidad.

Absolutamente estable

Definición

Un método de paso múltiple se dice ***absolutamente estable*** *para un valor dado de* λh *si cada raíz* $z_r = z_r(\lambda h)$ *del polinomio de estabilidad* $\pi(\cdot; \lambda h)$ *satisface* $|z_r(\lambda h)| < 1$

Definición

La ***región de estabilidad absoluta*** *de un método de paso múltiple es el conjunto de todos los puntos* λh *en el plano complejo para el cual el método es absolutamente estable.*

Definición (A-estable)

Un método de paso múltiple se dice ***A-estable*** *si su región de estabilidad absoluta contiene al plano negativo complejo.*

Segunda barrera de Dahlquist

Teorema

1. *Ningún método de paso múltiple lineal explícito es A-estable*
2. *Ningún método de paso múltiple lineal y A-estable puede ser de orden mayor que 2*
3. *El método de paso múltiple lineal, A-estable y de orden 2 con la menor constante de error es la regla trapezoidal.*

Típicamente la condición de A-estabilidad se relaja para el diseño de esquemas numéricos, pero el objetivo sigue siendo obtener una región de estabilidad tan grande como sea posible.

Región de estabilidad: ejemplos

Ejemplos

Se presentan varios ejemplos de región de estabilidad $\mathcal{D}$ para distintos esquemas.

1. Euler explícito:

$$\pi(z;\lambda h) = z - 1 - \lambda h$$

$$z_1 = 1 + \lambda h$$

$$\mathcal{D}_E := \{z \in \mathbb{C} : |1 + z| < 1\}$$

2. Regla trapezoidal: (A-estable)

$$\pi(z;\lambda h) = z\left(1 - \frac{\lambda h}{2}\right) - \left(1 + \frac{\lambda h}{2}\right)$$

$$z_1 = \frac{1 + \lambda h/2}{1 - \lambda h/2}$$

$$\mathcal{D}_T := \left\{z \in \mathbb{C} : \left|\frac{1 + z/2}{1 - z/2}\right| < 1\right\}$$

Ejemplos

3. Adam-Bashfort de 2 pasos:

$$\pi(z;\lambda h) = z^2 - z\left(1 - 3\frac{h\lambda}{2}\right) + \frac{h\lambda}{2}$$

$$z_{1,2} = \frac{1}{2}\left(\left(1 - 3\frac{h\lambda}{2}\right) \pm \sqrt{\left(1 - 3h\lambda + \frac{9}{4}(h\lambda)^2\right) - 2h\lambda}\right)$$

4. Adam-Moulton de 2 pasos:

$$\pi(z;\lambda h) = z^2\left(1 - 5\frac{\lambda h}{12}\right) - z\left(1 - 2\frac{h\lambda}{3}\right) + \frac{h\lambda}{12}$$

Estabilidad de métodos de Runge-Kutta

Para métodos de Runge-Kutta la estabilidad absoluta se define de la misma forma que para métodos de paso múltiple

$$y' = \lambda y, \; y(0) = 0 \qquad \lambda \in \mathbb{C}, \; \mathrm{Re}(\lambda) < 0$$

Queremos que $y_n \to 0$ a medida que $n \to \infty$ para un valor $h\lambda$ fijo. El conjunto de $z = \lambda h$ en el plano complejo donde el método es absolutamente estable es la región de estabilidad. Los métodos explícitos tienen una pequeña región de estabilidad. Otra alternativa son los métodos de Runge-Kutta implícitos (IRK).

Fórmulas de diferenciación regresiva

BDF

Una alternativa para obtener métodos altamente estables son las fórmulas de diferenciación regresiva (BDF), escritas de manera general como

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n+j} = h\beta_k f_{n+k}$$

En el caso $k = 1$ se recupera el esquema de Euler implícito. De manera general, los esquema BDF-k, para $k = 1 \ldots 5$ corresponden a

Tabla BDF

k	α_5	α_4	α_3	α_2	α_1	α_0	β_k
1					1	-1	1
2				3	-4	1	2
3			11	-18	9	-2	6
4		25	-48	36	-16	3	12
5	137	-300	300	-200	75	-12	60

INSTITUTO DE INGENIERÍA
MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE