Métodos Rígidos y de Pasos Múltiples

Lección 22

Dr. Pablo Alvarado Moya

CE3102 Análisis Numérico para Ingeniería
Área de Ingeniería en Computadores
Tecnológico de Costa Rica

I Semestre 2018

Contenido

Rigidez

- Un **sistema rígido** es aquel que tiene en su solución componentes que cambian rápidamente, junto con componentes que cambian lento.
- Los componentes de variación rápida son usualmente transitorios y desaparecen para dar paso a componente lenta.
- Los componentes transitorios solo existen en una pequeña parte de la solución; sin embargo, determinan el *paso* a usar en **toda** la solución.

Ejemplo de EDO rígida (1)

- La EDO
$$\frac{dy}{dt} = -1000y + 3000 - 2000e^{-t}$$
es rígida, con solución analítica con condición inicial $y(0) = 0$
$$y(t) = 3 - 0,998e^{-1000t} - 2,002e^{-t}$$
- La solución está dominada por el término e^{-1000t} al inicio para $t < 0{,}005$.
- Posteriormente la solución es dominada por e^{-t}.

Ejemplo de EDO rígida (2)

- La parte homogénea de la ecuación es

$$\frac{dy}{dt} = -ay$$

y con condición inicial $y(0) = y_0$ la solución es

$$y(t) = y_0 e^{-at}$$

que inicia en y_0 y decae a cero.

Ejemplo de EDO rígida (3)

- Con el método de Euler la solución del problema es

$$y_{i+1} = y_i + \frac{dy_i}{dt} h$$

y sustituyendo la ecuación homogénea

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i - a y_i h \\ y_{i+1} &= y_i(1 - ah) \end{aligned}$$

- La estabilidad del método depende del tamaño del paso h: $|1 - ah|$ debe ser menor que uno para que solución converja.
- Si $h > 2/a$ entonces $|y_i| \to \infty$ para $i \to \infty$.
- En el ejemplo $h < 2/1000 = 0{,}002$ para que el sistema sea estable.

Ejemplo de EDO rígida (4)

- Aunque la parte transitoria domina solo una pequeña parte de la solución, ésta controla el tamaño de paso **máximo** permitido.
- Los métodos adaptativos de tamaño de paso **no** ofrecen una solución a las EDO rígidas, pues la estabilidad requiere que el tamaño de paso no supere un paso pequeño en **toda** la solución.
- Utilizaremos como alternativa métodos **implícitos**.

Métodos implícitos

- **Método explícito** es aquel en el que el valor a calcular (y_{i+1}) se encuentra en un solo lado de la ecuación (p.ej. caso de métodos de Euler)

$$y_{i+1} = y_i - ay_i h$$

- En un **método implícito** el valor a calcular (y_{i+1}) se encuentra en ambos lados de la ecuación.

Método de Euler hacia atrás (1)

Método de Euler implícito

- El método de Euler implícito evalúa la derivada en el mismo instante:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{dy_{i+1}}{dt} h$$

Reemplazando $\frac{dy_{i+1}}{dt} = -ay_{i+1}$ se obtiene

$$y_{i+1} = y_i - ay_{i+1}h$$

de donde se deriva

$$y_{i+1} = \frac{y_i}{1 + ah}$$

- En este caso $|y_i| \to 0$ conforme $i \to \infty$ independientemente del valor de h
- Este procedimiento es entonces **incondicionalmente estable**

Método de Euler hacia atrás (2)

Método de Euler implícito

- Se paga complejidad de iteración por estabilidad
- Metodos de Gear (1971) son los métodos implícitos más usados.
- Se han propuesto algoritmos de Runge-Kutta implícitos, donde los términos k aparecen en formas implícitas.
- Nótese que complejidad adicional necesaria solo para EDO rígidas

Métodos de pasos múltiples

Métodos de pasos múltiples

- Los métodos anteriores utilizan información de un solo punto x_i para predecir un valor de la variable dependiente y_{i+1} en x_{i+1}.
- Los **métodos de pasos múltiples** o **multipasos** utilizan la información de varios puntos anteriores.
- Se aprovechan tendencias en la curvatura para predecir la tendencia de la solución
- Se presentará primero un método de segundo orden y luego otros de orden superior

Método de Heun sin autoinicio (1)

- El procedimiento de Heun utiliza el método de Euler como predictor

$$y_{i+1}^{0} = y_i + f(x_i, y_i)h$$

y la regla del trapecio como corrector

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{0})}{2}h$$

- Predictor y corrector tienen errores de truncamiento local de $\mathcal{O}\left(h^2\right)$ y $\mathcal{O}\left(h^3\right)$ respectivamente.
- El predictor es entonces el eslabón débil del método.
- Error en predictor afecta al corrector

Método de Heun sin autoinicio (2)

- Para mejorar el eslabón se utiliza un paso de $2h$ y en vez de utilizar el valor y_i para la estimación, se utiliza el valor anterior:

$$y_{i+1}^0 = y_{i-1} + f(x_i, y_i)2h$$

- Esta predicción es $\mathcal{O}\left(h^3\right)$
- **Sin autoinicio** se refiere a que no arranca de y_i sino de un valor anterior y_{i-1}
- Se requiere entonces un valor $y(-1)$ adicional a $y(0)$ como condición inicial.

Predictor-Corrector

Método de Heun sin autoinicio

- El método de Heun sin autoinicio se plantea como par predictor-corrector, y puede además reducirse el error por medio de iteraciones:

$$
\begin{aligned}
y_{i+1}^{(0)} &= y_{i-1}^{(m)} + f(x_i, y_i^{(m)})2h && \text{Predictor} \\
y_{i+1}^{(j)} &= y_i^{(m)} + \frac{f(x_i, y_i^{(m)}) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(j-1)})}{2}h && \text{Corrector} \\
&\quad (\text{para } j = 1, 2, \ldots, m)
\end{aligned}
$$

- $y_{i-1}^{(m)}$ y $y_i^{(m)}$ son los resultados finales del corrector en pasos anteriores.
- El proceso de iteración se detiene si el error $\epsilon_a = |y_{i+1}^{(j)} - y_{i+1}^{(j-1)}|$ es menor a algún umbral

Análisis de error (1)

Fórmulas de predicción-corrección

- Para analizar el error en el predictor-corrector se parte de

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

- Integrando entre los límites i e $i+1$

$$\int_{y_i}^{y_{i+1}} dy = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y)\, dx$$

de donde se despeja

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y)\, dx$$

Análisis de error (2)

Fórmulas de predicción-corrección

- La regla del trapecio analizada previamente:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx \approx \frac{f(x_i,y_i)+f(x_{i+1},y_{i+1})}{2}h$$

permite derivar el corrector de la regla de Heun

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i,y_i)+f(x_{i+1},y_{i+1})}{2}h$$

- Recuérdese que $y'(x) = f(x,y) \Rightarrow y^{(3)}(x) = f''(x,y)$
- El error de truncamiento local es entonces

$$E_c = -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi_c) = -\frac{1}{12}h^3 y^{(3)}(\xi_c)$$

Análisis de error (3)

Fórmulas de predicción-corrección

- Para obtener el **predictor** se utilizan los límites entre $i-1$ e $i+1$

$$\int_{y_{i-1}}^{y_{i+1}} dy = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx$$

que integrando y reordenando

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx$$

- Con la regla de punto medio para integración abierta:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x,y)\,dx \approx 2hf(x_i, y_i)$$

se obtiene

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i)$$

Análisis de error (4)

Fórmulas de predicción-corrección

- La regla de punto medio tiene error

$$E_p = \frac{1}{3}h^3 f''(\xi_p) = \frac{1}{3}h^3 y^{(3)}(\xi_p)$$

- Tanto predictor como corrector en el método de Heun sin autoinicio tienen orden $\mathcal{O}\left(h^3\right)$
- Lo anterior hace posible que el error de truncamiento local se pueda estimar para cada paso, lo que permite a su vez estimar el tamaño de paso.

Estimación de errores (1)

- El error de truncamiento local del predictor permite establecer que

$$\text{Valor verdadero} = y_{i+1}^{0} + \frac{1}{3}h^3 y^{(3)}(\xi_p)$$

- El error de truncamiento local del corrector permite establecer que

$$\text{Valor verdadero} = y_{i+1}^{m} - \frac{1}{12}h^3 y^{(3)}(\xi_c)$$

- Restando ambas expresiones se obtiene

$$0 = y_{i+1}^{m} - y_{i+1}^{0} - \frac{5}{12}h^3 y^{(3)}(\xi)$$

con $\xi \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$.

Estimación de errores (2)

- Dividiendo ambos lados por 5 y reordenando

$$\frac{y_{i+1}^{0} - y_{i+1}^{m}}{5} = -\frac{1}{12} h^3 y^{(3)}(\xi)$$

que es idéntico al error de truncamiento del corrector del método de Heun excepto por valor ξ.

- Si $y^{(3)}$ se asume constante en intervalo, entonces el error de truncamiento con los pasos de predicción y corrección es:

$$E_c = \frac{y_{i+1}^{0} - y_{i+1}^{m}}{5}$$

Modificadores (1)

- Conocimiento de E_c permite reducir el error

$$y_{i+1}^{m} \leftarrow y_{i+1}^{m} - \frac{y_{i+1}^{0} - y_{i+1}^{m}}{5}$$

que se conoce como **modificación del corrector**.

- Otra mejora posible se realiza al **predictor**, suponiendo que tercera derivada es constante de un paso a otro.
- Partiendo del resultado del paso previo en i

$$\frac{y_i^0 - y_i^m}{5} = -\frac{1}{12} h^3 y^{(3)}(\xi)$$

Modificadores (2)

- Suponiendo que $y^{(3)}(\xi) \approx y^{(3)}(\xi_p)$ y sustituyendo en

$$E_p = \frac{1}{3}h^3 f''(\xi_p) = \frac{1}{3}h^3 y^{(3)}(\xi_p)$$

se despeja

$$E_p = \frac{4}{5}(y_i^m - y_i^0)$$

que se emplea para modificar el resultado del predictor

$$y_{i+1}^0 \leftarrow y_{i+1}^0 + \frac{4}{5}(y_i^m - y_i^0)$$

- Uso de modificadores incrementa la eficiencia como la exactitud de los métodos de pasos múltiples.
- El modificador del corrector incrementa el orden de la técnica.

Modificadores (3)

- El método de Heun sin autoinicio con modificadores es de tercer orden, y no de segundo orden (como el no modificado).
- Precaución: el modificador del corrector puede afectar la estabilidad del proceso iterativo del corrector, por lo que el modificador del corrector suele dejarse por fuera en las implementaciones.

Resumen (1)

Metodo de Heun sin autoinicio con modificadores

1. Predictor

$$y_{i+1,u}^{0} = y_{i-1}^{m} + f(x_i, y_i^m)2h$$

2. Modificador del predictor

$$y_{i+1}^{0} \leftarrow y_{i+1,u}^{0} + \frac{4}{5}(y_{i,u}^{m} - y_{i,u}^{0})$$

3. Corrector

$$y_{i+1}^{j} = y_i^m + \frac{f(x_i, y_i^m) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{j-1})}{2}h \qquad j = 1 \ldots m$$

Resumen (2)

Metodo de Heun sin autoinicio con modificadores

4. Verificación del error

$$|\epsilon_a| = |y_{i+1}^{j} - y_{i+1}^{j-1}|$$

   se itera mientras error sea mayor a umbral

5. Estimación de error de corrector

$$E_c = -\frac{1}{5}(y_{i+1,u}^{m} - y_{i+1,u}^{0})$$

6. Continuar con siguiente paso $i \leftarrow i + 1$ (Volver a 1)

Control de tamaño de paso

Tamaño de paso constante

- Único detalle a observar con la implementación del método de Heun sin autoinicio es el cálculo de punto extra para iniciar el cálculo
- Paso debe ser lo suficientemente pequeño para minimizar error de truncamiento
- Paso debe ser lo suficientemente grande para minimizar costo de ejecución y error de redondeo
- La única forma práctica para evaluar magnitud de error global es comparar los resultados del mismo problema utilizando la mitad del tamaño de paso.

Control del tamaño de paso (1)

Tamaño de paso variable

- Dos criterios permiten decidir si se justifica un tamaño de paso:
  1. Si
  $$E_c = -\frac{y_{i+1}^{0} - y_{i+1}^{m}}{5}$$
  es mayor que un umbral, se disminuye el tamaño de paso
  2. Se elige tamaño de paso para que criterio de convergencia del corrector se satisfaga en dos iteraciones (se ha demostrado que esto minimiza el total de pasos)
- Lo anterior da un criterio para reducir o aumentar el tamaño del paso

Control del tamaño de paso (2)

Tamaño de paso variable

- Para reutilizar información precalculada en pasos anteriores, cambios en el tamaño de paso se hacen por duplicación o por reducción a la mitad. Si faltan datos, se utilizan técnicas de interpolación.
- Implementación requiere consideración de compromisos entre exactitud y velocidad. Por ello se recomienda utilizar paquetes computacionales.

Fórmulas de integración

- Método de Heun sin autoinicio es característico de los métodos de pasos múltiples:
  1. Se utiliza fórmula de integración abierta (método del punto medio) para realizar estimación inicial, lo que requiere un punto previo.
  2. Se aplica de manera iterativa una fórmula de integración cerrada (regla del trapecio) para mejorar solución.
- Mejora de métodos implica uso de fórmulas de integración de órdenes superiores como predictores y correctores.

Fórmulas de Newton-Cotes

- Se ajusta un polinomio de interpolación de n-ésimo grado a $n+1$ valores conocidos de y y, después se usa el polinomio para estimar integral.
- Esto es el mismo concepto utilizado por las fórmulas de Newton-Cotes, que ofrecen opciones cerradas y abiertas.

Fórmulas de Newton-Cotes (1)

Fórmulas abiertas

- Para n valores equiespaciados, la solución de la EDO se obtiene con

$$y_{i+1} = y_{i-n} + \int_{x_{i-n}}^{x_{i+1}} f_n(x)\, dx$$

  con $f_n(x)$ un polinomio de interpolación de n-ésimo grado.
- La integral se evalúa con la fórmula de integración abierta de Newton-Cotes de n-ésimo grado

Fórmulas de Newton-Cotes (2)

Fórmulas abiertas

Segm.	Pts.	Fórmula	Error
2	1	$(b-a)f(x_1)$ Método del punto medio	$(1/3)h^3 f''(\xi)$
3	2	$(b-a)\dfrac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$	$(3/4)h^3 f''(\xi)$
4	3	$(b-a)\dfrac{2f(x_1)+f(x_2)+2f(x_3)}{3}$	$(14/45)h^5 f^{(4)}(\xi)$
5	4	$(b-a)\dfrac{11f(x_1)+f(x_2)+f(x_3)+11f(x_4)}{24}$	$(95/144)h^5 f^{(4)}(\xi)$
6	5	$(b-a)\dfrac{11f(x_1)+14f(x_2)+26f(x_3)+14f(x_4)+11f(x_5)}{20}$	$(41/140)h^7 f^{(6)}(\xi)$

Fórmulas de Newton-Cotes (3)

Fórmulas abiertas

- Por ejemplo, para $n = 1$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf_i$$

  con f_i una abreviatura para $f(x_i, y_i)$. Este fue el predictor utilizado en el método de Heun sin autoinicio.

- Para $n = 2$

$$y_{i+1} = y_{i-2} + \frac{3h}{2}(f_i + f_{i-1})$$

- Para $n = 3$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3}(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2})$$

Fórmulas de Newton-Cotes (1)

Fórmulas cerradas

- La fórmula cerrada se expresa de manera general como

$$y_{i+1} = y_{i-n+1} + \int_{x_{i-n+1}}^{x_{i+1}} f_n(x)\, dx$$

  donde la integral se determina por una fórmula de integración cerrada de Newton-Cotes

- Por ejemplo, para $n = 1$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

  que es equivalente a la regla del trapecio

Fórmulas de Newton-Cotes (2)

Fórmulas cerradas

- Para $n = 2$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

equivalente a la regla de Simpson $1/3$.

Fórmulas de Adams (1)

Fórmulas abiertas

- Dada la expansión hacia adelante de la serie de Taylor de la solución alrededor de x_i:

$$y_{i+1} = y_i + f_i h + \frac{f_i'}{2} h^2 + \frac{f_i''}{6} h^3 + \cdots$$

- Factorizando un término h a partir del segundo término se obtiene

$$y_{i+1} = y_i + h \left(f_i + \frac{f_i'}{2} h + \frac{f_i''}{6} h^2 + \cdots \right)$$

Fórmulas de Adams (2)

Fórmulas abiertas

- Sustituyendo la aproximación hacia atrás de la derivada

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + \frac{f_i''}{2} h + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

y reagrupando se obtiene

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{3}{2} f_i - \frac{1}{2} f_{i-1}\right) + \frac{5}{12} h^3 f_i'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)$$

que es la fórmula **abierta** de Adams de segundo orden (o fórmula de Adams-Bashforth)

- El mismo principio se puede aplicar utilizando aproximaciones de diferencias superiores.

Fórmulas de Adams (3)

Fórmulas abiertas

- La fórmula de n-ésimo orden es

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k f_{i-k} + \mathcal{O}\left(h^{n+1}\right)$$

Orden	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	E_t
1	1					$\frac{1}{2} h^2 f'(\xi)$
2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$				$\frac{5}{12} h^3 f''(\xi)$
3	$\frac{23}{12}$	$-\frac{16}{12}$	$\frac{5}{12}$			$\frac{9}{24} h^4 f^{(3)}(\xi)$
4	$\frac{55}{24}$	$-\frac{59}{24}$	$\frac{37}{24}$	$-\frac{9}{24}$		$\frac{251}{720} h^5 f^{(4)}(\xi)$
5	$\frac{1901}{720}$	$-\frac{2774}{720}$	$\frac{2616}{720}$	$-\frac{1274}{720}$	$\frac{251}{720}$	$\frac{475}{1440} h^6 f^{(5)}(\xi)$

Fórmulas de Adams (1)

Fórmulas cerradas (de Adams-Moulton)

- Las fórmulas **cerradas** de Adams se denominan también de Adams-Moulton
- Serie de Taylor hacia atrás alrededor de x_{i+1} es

$$y_i = y_{i+1} - f_{i+1}h + \frac{f'_{i+1}}{2}h^2 - \frac{f''_{i+1}}{6}h^3 + \cdots$$

- Resolviendo para y_{i+1} se obtiene

$$y_{i+1} = y_i + h\left(f_{i+1} - \frac{h}{2}f'_{i+1} + \frac{h^2}{6}f''_{i+1} + \cdots\right)$$

Fórmulas de Adams (2)

Fórmulas cerradas (de Adams-Moulton)

- Sustituyendo la aproximación de derivada con

$$f'_{i+1} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + \frac{f''_{i+1}}{2} h + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

y agrupando términos

$$y_{i+1} = y_i + h \left(\frac{1}{2} f_{i+1} + \frac{1}{2} f_i \right) - \frac{1}{12} h^3 f''_{i+1} - \mathcal{O}\left(h^4\right)$$

que es la fórmula **cerrada** de Adams de segundo orden, que corresponde a la regla del trapecio.

- La fórmula cerrada de Adams de n-ésimo orden es

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k f_{i+1-k} + \mathcal{O}\left(h^{n+1}\right)$$

Fórmulas de Adams (3)

Fórmulas cerradas (de Adams-Moulton)

Orden	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	E_t
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				$-\frac{1}{12}h^3 f''(\xi)$
3	$\frac{5}{12}$	$\frac{8}{12}$	$-\frac{1}{12}$			$-\frac{1}{24}h^4 f^{(3)}(\xi)$
4	$\frac{9}{24}$	$\frac{19}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{1}{24}$		$-\frac{19}{720}h^5 f^{(4)}(\xi)$
5	$\frac{251}{720}$	$\frac{646}{720}$	$-\frac{264}{720}$	$\frac{106}{720}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{27}{1440}h^6 f^{(5)}(\xi)$

Comparación de fórmulas de Adams

- Fórmulas abiertas (Adams-Bashforth)

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k f_{i-k} + \mathcal{O}\left(h^{n+1}\right)$$

- Fórmulas cerradas (Adams-Moulton)

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k f_{i+1-k} + \mathcal{O}\left(h^{n+1}\right)$$

Métodos de pasos múltiples de orden superior

- Las fórmulas de integración se combinan como métodos predictor-corrector.
- Si fórmulas abiertas y cerradas tienen errores de truncamiento local del mismo orden se pueden incorporar modificadores para mejorar exactitud y controlar tamaño de paso.
- Dos métodos más usados:
  1. Método de Milne
  2. Método de Adams de cuarto orden

Método de Milne

- Método usa fórmulas de Newton-Cotes (tres puntos)
- Predictor

$$y_{i+1}^{0} = y_{i-3}^{m} + \frac{4h}{3}(2 - f_i^m - f_{i-1}^m + 2f_{i-2}^m)$$

- Corrector

$$y_{i+1}^{j} = y_{i-1}^{m} + \frac{h}{3}(f_{i-1}^m + 4f_i^m + f_{i+1}^{j-1})$$

- j: iteraciones del corrector
- Error del predictor: $E_p = \frac{28}{29}(y_i^m - y_i^0)$
- Error del corrector: $E_c = -\frac{1}{29}(y_{i+1}^m - y_{i+1}^0)$
- Estos errores se usan como modificadores

Método de Adams de cuarto orden

- Método usa fórmulas cerradas (Adams-Bashforth)
- Predictor

$$y_{i+1}^0 = y_i^m + h\left(\frac{55}{24}f_i^m - \frac{59}{24}f_{i-1}^m + \frac{37}{24}f_{i-2}^m - \frac{9}{24}f_{i-3}^m\right)$$

- Corrector

$$y_{i+1}^j = y_i^m + h\left(\frac{9}{24}f_{i+1}^{j-1} + \frac{19}{24}f_i^m - \frac{5}{24}f_{i-1}^m + \frac{1}{24}f_{i-2}^m\right)$$

- j: iteraciones del corrector
- Error del predictor: $E_p = \frac{251}{270}(y_i^m - y_i^0)$
- Error del corrector: $E_c = -\frac{19}{270}(y_{i+1}^m - y_{i+1}^0)$
- Estos errores se usan como modificadores

Resumen

1. Rigidez
   - Definición
   - Métodos implícitos

2. Métodos de pasos múltiples
   - Fórmulas de integración

Este documento ha sido elaborado con software libre incluyendo LaTeX, Beamer, GNUPlot, GNU/Octave, XFig, Inkscape, LTI-Lib-2, GNU-Make y Subversion en GNU/Linux