Métodos Rígidos y de Pasos Múltiples Lección 21

Dr. Pablo Alvarado Moya

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

II Semestre 2017

Contenido

- Rigidez
 - Definición
 - Métodos implícitos

- Métodos de pasos múltiples
 - Fórmulas de integración

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 lentos solo existen en una pequeña parte de la solución; sin embargo, determinan el paso a usar en toda la solución.

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} .

• 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.

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

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

$$y_{i+1} = y_i (1 - ah)$$

- 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.



- 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.

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 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 $\frac{dy_{i+1}}{dt} = -ay$ 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 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 rígida0s

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

• 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 $\mathcal{O}(h^2)$ y $\mathcal{O}(h^3)$ respectivamente.
- El predictor es entonces el eslabón débil del método.

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

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

• Esta predicción es $\mathcal{O}(h^3)$

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:

$$y_{i+1}^{(0)} = y_{i-1}^{(m)} + f(x_i, y_i^{(m)}) 2h$$
 Predictor
$$y_{i+1}^{(j)} = y_{i-1}^{(m)} + \frac{f(x_i, y_i^{(m)}) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(j-1)})}{2}h$$
 Corrector (para $j = 1, 2, ..., m$)

- $y_{i-1}^{(m)}$ 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 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

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



• 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

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



Análisis de error

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 Fórmulas de predicción-corrección

La regla de punto medio tiene error

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

 Tanto predictor como corrector en el método de Heun sin autoinicio tienen orden $\mathcal{O}(h^3)$

Estimación de errores

 El error de truncamiento local del predictor permite establecer que

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

• El error de truncamiento local del corrector permite establecer que

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

Restando ambas expresiones se obtiene

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

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



Estimación de errores

Dividiendo ambos lados por 5 y reordenando

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

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

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

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

• Estimación de E_c permite adaptar el tamaño de paso.



• 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

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



• Suponiendo que $v^{(3)}(\xi) \approx v^{(3)}(\xi_n)$ y sustituyendo en

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

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

- 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.

Predictor

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

Modificador del predictor

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

Corrector

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



Resumen Metodo de Heun sin autoinicio con modificadores

Verificación del error

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

se itera mientras error sea mayor a umbral

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 Tamaño de paso variable

- Dos criterios permiten decidir si se justifica un tamaño de paso:
 - Si

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

es mayor que un umbral, se disminuye el tamaño de paso

- 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 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:
 - Se utiliza fórmula de integración abierta (método del punto medio) para realizar predicción inicial, lo que requiere un punto previo.
 - 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

 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 Fórmulas abiertas

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

Fórmulas de Newton-Cotes

• 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 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 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 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

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

Sustituyendo la aproximación hacia atrás de la derivada

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

Fórmulas de integración

y reagrupando se obtiene

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

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 Fórmulas abiertas

• La fórmula de *n*-ésimo orden es

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

Orden	β_0	eta_1	β_2	eta_3	β_{4}	E_t
1	1	1				$\frac{1}{2}h^2f'(\xi)$ $\frac{5}{12}h^3f''(\xi)$
2	<u>3</u>	$-\frac{1}{2}$	_			$\frac{5}{12}h^3f''(\xi)$
3	$\frac{23}{12}$	$-\frac{16}{12}$	$\frac{5}{12}$			$\frac{9}{24}h^4f^{(3)}(\xi)$
4	3 23 12 55 24 1901	$ \begin{array}{r} -\frac{16}{12} \\ -\frac{59}{24} \\ -\frac{2774}{2} \end{array} $	$\frac{37}{24}$	$-\frac{9}{24}$		$\frac{\frac{9}{24}h^4f^{(3)}(\xi)}{\frac{251}{720}h^5f^{(4)}(\xi)}$
5	<u>1901</u> 720	$-\frac{2774}{720}$	12 37 24 2616 720	$-\frac{24}{1274}$ $-\frac{1274}{720}$	251 720	$\frac{475}{1440}h^6f^{(5)}(\xi)$

Fórmulas de Adams Formulas cerradas (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

Formulas cerradas (de Adams-Moulton)

Sustituyendo la aproximación de derivada con una diferencia

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

y agrupando términos

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

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

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

Fórmulas de Adams Formulas cerradas (de Adams-Moulton)

Orden	β_0	β_1	β_2	eta_3	eta_{4}	E_t
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				$-\frac{1}{12}h^3f''(\xi)$
3	<u>5</u> 12	<u>8</u> 12	$-\frac{1}{12}$			$-\frac{1}{24}h^4f^{(3)}(\xi)$
4	$\frac{9}{24}$	$\frac{\overline{19}}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{1}{24}$		$-\frac{19}{720}h^5f^{(4)}(\xi)$
5	$\frac{24}{251}$ 720	646 720	$-rac{24}{720}$	24 <u>106</u> 720	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{27}{1440}h^6f^{(5)}(\xi)$

Comparación de fórmulas de Adams

• Fórmulas abiertas (Adams-Bashforth)

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

• Fórmulas cerradas (Adams-Moulton)

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

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: $E_c = -\frac{1}{20}(y_{i+1}^m y_{i+1}^0)$
- Estos errores se usan como modificadores



- 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

- Rigidez
 - Definición
 - Métodos implícitos

- 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



Este trabajo se encuentra bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-Licenciarlgual 3.0 Unported. Para ver una copia de esta Licencia, visite http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/ o envíe una carta a Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

© 2005-2017 Pablo Alvarado-Moya Área de Ingeniería en Computadores Instituto Tecnológico de Costa Rica