Análisis Numérico III
Problemas de valores iniciales
de ecuaciones diferenciales ordinarias (Parte II)
Módulo 2, Presentación 4

Raimund Bürger

31 de marzo de 2022

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

A partir del estudio de problemas de interpolación, aproximación y cuadratura ya sabemos que el error cometido por esos métodos depende de forma decisiva de una de las derivadas más altas de la función aproximada o del integrando. Obviamente, se puede suponer que lo mismo es válido para la solución del problema de valores iniciales de una ecuación diferencial ordinaria. Pero aquí también importa la regularidad (suavidad) de la entera variedad de soluciones en la vecindad de la solución exacta del problema. Esta observación tiene consecuencias importantes para la aplicación de métodos numéricos.

Ejemplo 2.1 Se considera el problema de valores iniciales

$$y' = \lambda(y - \mathrm{e}^{-x}) - \mathrm{e}^{-x}, \quad y(0) = 1 + \varepsilon, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \tag{2.1}$$

La ecuación diferencial ordinaria tiene la solución general

$$y(x) = \alpha \mathrm{e}^{\lambda x} + \mathrm{e}^{-x}, \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.1 (continuación) Usando el valor inicial tenemos

$$1+\varepsilon=\alpha+1,$$

es decir, $\alpha=\varepsilon$, y la solución del problema (2.1) es

$$y(x)=\varepsilon \mathrm{e}^{\lambda x}+\mathrm{e}^{-x}.$$

Para $\varepsilon=0$ y $x\geqslant 0$, la solución y todas sus derivadas son en valor absoluto menores que 1, cualquier que sea el valor de λ. En general,

$$y^{(p)}(x):=\frac{\mathrm{d}^p y}{\mathrm{d}x^p}=\varepsilon\lambda^p\mathrm{e}^{\lambda x}+(-1)^p\mathrm{e}^{-x},$$

es decir,

$$\left|y^{(p)}(x)\right|\geqslant|\lambda|^p\left(\frac{\varepsilon}{\mathrm{e}}-\frac{1}{|\lambda|^p}\right)\quad \text{para } x\in\left[0,-\frac{1}{\lambda}\right],\ \lambda<0.$$

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.1 (continuación) Por ejemplo, para $\varepsilon \neq 0$ y $\lambda = -1000$ las derivadas asumen ordenes de tamaño gigantescos en una pequeña vecindad de $x = 0$. Lo mismo es válido si para cualquier x_0 prescribimos el valor inicial

$$y(x_0) = \mathrm{e}^{-x_0} + \varepsilon.$$

En lo siguiente, consideremos $\lambda = -1000$ y $\varepsilon = 0$. En este caso, la solución consiste sólo en la componente suave e^{-x}. Ya para $x > 1/10$, cualquier solución es prácticamente idéntica a la componente suave, si ε es del orden de tamaño 1, dado que $\exp(-100) \approx 3{,}7 \times 10^{-44}$. Entonces la solución exacta y la componente suave disminuyen exponencialmente con x.

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.1 (continuación) Para este problema el método de Euler explícito entrega la fórmula

$$\begin{aligned} y_{i+1}^h &= y_i^h + h\big[-1000\big(y_i^h - \exp(-ih)\big) - \exp(-ih)\big] \\ &= (1-1000h)y_i^h + 999h\exp(-ih), \quad i = 0,1,2,\dots, \qquad (2.2) \\ y_0^h &= 1. \end{aligned}$$

Este método entrega los siguientes valores:

x	$h = 0{,}1$	$h = 0{,}01$	$h = 0{,}002$	$h = 0{,}001$	$h = 0{,}0005$
0,1	0,9	$1{,}74 \times 10^5$	0,905	0,904837	0,904837
0,5	$-4{,}6 \times 10^6$	$\lvert\cdot\rvert > 10^{38}$	0,607	0,6065304	0,606530
1,0	$4{,}38 \times 10^{16}$	$\lvert\cdot\rvert > 10^{38}$	0,368	0,367879	0,367879

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.1 (continuación) Aplicamos ahora el método de Euler implícito. Para (2.1) obtenemos una fórmula de iteración explícita:

$$y_{i+1}^h = y_i^h + h\Big(-1000y_{i+1}^h + 1000\exp\big(-(i+1)h\big) - \exp\big(-(i+1)h\big)\Big). \tag{2.3}$$

Con $y_0^h = 1$ esto puede ser escrito como

$$y_{i+1}^h = \frac{1}{1+1000h}y_i^h + \frac{999h}{1+1000h}\exp\big(-(i+1)h\big), \quad i = 0,1,2,\ldots.$$

x	$h = 0{,}1$	$h = 0{,}01$	$h = 0{,}001$	$h = 0{,}0005$
0,1	0,904837	0,904884	0,904838	0,904838
0,5	0,696531	0,606562	0,606531	0,606531
1,0	0,367879	0,367899	0,367880	0,367880

Los resultados obtenidos por (2.2) no son una consecuencia del bajo orden de consistencia del método, ya que el orden de (2.3) también es solamente uno.

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Los fenómenos observados son relacionados con la presencia de soluciones de la EDO con derivadas grandes en la cercanía de la solución exacta del problema de valores iniciales dado. La solución exacta también asume valores en este rango de pendientes fuertes, y los métodos explícitos producen un efecto oscilatorio (si h no es suficientemente pequeño) que nos aleja rápidamente de la solución exacta. (Por otro lado, el problema de valores iniciales

$$y' = -y, \quad y(0) = 1$$

con la misma solución exacta se podría aproximar fácilmente por el método de Euler explícito, usando $h = 0{,}1$ y calculando hasta $x = 1$.)

Las ecuaciones diferenciales ordinarias que presentan este problema se llaman rígidas (problemas "stiff").

2.1. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

El prototipo de una ecuación rígida es el sistema lineal homogéneo

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{y}_0, \quad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ diagonalizable,} \\
&\sigma(\boldsymbol{A}) = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}, \\
&\operatorname{Re}\lambda_1 \leqslant \ldots \leqslant \operatorname{Re}\lambda_n \leqslant 0, \quad -\operatorname{Re}\lambda_1 \gg 1.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Uno podría elegir $S := -\operatorname{Re}\lambda_1$ como medida de la rigidez. En el caso de un sistema más general $\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ podríamos definir

$$S := -\inf_{\substack{(x,\boldsymbol{z}),(x,\boldsymbol{y})\in\mathcal{D}_{\mathrm{f}} \\ \boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{z}}} \frac{(\boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{z}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z})}{(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z})}.$$

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

2.2.1 Estabilidad lineal Analizaremos ahora el comportamiento de de métodos de discretización aplicados al problema test

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0; \quad \operatorname{Re}\lambda < 0. \tag{2.5}$$

Un sistema (2.4) puede ser transformado a n ecuaciones desacopladas del tipo (2.5), donde λ es uno de los valores propios de $\boldsymbol{A}$.

Definición 2.1 Se dice que un método de paso simple o de pasos múltiples pertenece a la clase CA (de coeficientes analíticos) si su aplicación al problema (2.5) lleva a una ecuación de diferencias

$$\sum_{j=0}^{k} g_j(h\lambda) y_{m+j}^h = 0, \quad m = 0, 1, \ldots, N-k, \tag{2.6}$$

donde las funciones $g_0, \ldots, g_k$, $k \geqslant 1$, son analíticas (en el sentido de funciones complejas), $g_k(0) \neq 0$, y el polinomio

$$z \mapsto \sum_{j=0}^{k} g_j(0) z^j \quad \text{satisface la condición de ceros (1.44).}$$

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Ejemplo 2.2 El método de Runge-Kutta clásico corresponde a

$$k = 1, \quad g_1(z) \equiv 1, \quad g_0(z) = -\left(1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6} + \frac{z^4}{24}\right),$$

el método de Euler implícito a

$$k = 1, \quad g_1(z) = 1 - z, \quad g_0(z) \equiv -1,$$

el método trapezoidal a

$$k = 1, \quad g_1(z) = 1 - \frac{z}{2}, \quad g_0(z) = -\left(1 + \frac{z}{2}\right)$$

y el método predictor-corrector (1.39), (1.40) a

$$k = 3, \quad g_3(z) \equiv 1, \quad g_2(z) = -1 - \frac{28}{24}z - \frac{9}{24} \cdot \frac{23}{12}z^2,$$
$$g_1(z) = \frac{5}{24}z + \frac{9}{24} \cdot \frac{16}{12}z^2, \quad g_0(z) = -\frac{1}{24}z + \frac{9}{24} \cdot \frac{5}{12}z^2.$$

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Ejemplo 2.2 (Espacio)

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Teorema 1.5 (Recordatorio) Consideremos la ecuación de diferencias

$$\sum_{i=0}^{k} \gamma_i \eta_{i+m} = 0, \quad m \in \mathbb{N}_0, \quad \gamma_0 \gamma_k \neq 0. \tag{1.45}$$

Entonces la solución de (1.45) es dada por

$$\eta_j = \sum_{l=1}^{s} \sum_{i=1}^{v_l} C_{li} j^{i-1} \xi_l^j, \quad j > 0,$$

donde $\xi_1, \ldots, \xi_s$, $\xi_i \neq \xi_j$ para $i \neq j$, son los ceros del polinomio

$$P(\xi) := \sum_{i=0}^{k} \gamma_i \xi^i$$

con las multiplicidades $v_1, \ldots, v_s$, o sea $\sum_{l=1}^{s} v_l = k$, $v_l \in \mathbb{N}$, y las constantes C_{li} son determinadas unicamente por $\eta_0, \ldots, \eta_{k-1}$.

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Usando el Teorema 1.5 podemos determinar la solución de (2.6) (y entonces el crecimiento de los valores discretizados y_i^h) directamente a partir del polinomio (llamado polinomio de estabilidad)

$$P(z;q) := \sum_{j=0}^{k} g_j(q) z^j, \quad q = h\lambda. \tag{2.7}$$

Es deseable que el polinomio P satisfaga la condición de ceros (1.44) para un dominio de valores

$$\{q \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} q < 0\}$$

lo más grande posible. El interior del dominio donde se cumple (1.44) se llama dominio de estabilidad.

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Definición 2.2 Un método de paso simple o de pasos múltiples de la case (CA) se llama absolutamente estable en un dominio $G \subset \mathbb{C}$ si sus funciones coeficientes g_k son analíticas en G, $g_k(q) \neq 0$ para todo $q \in G$, y si los zeros de $P(z;q)$ de (2.7) tienen $|\cdot| < 1$:

$$\forall q \in G: \; P(z;q) = \sum_{j=0}^{k} g_j(q) z^j = 0 \Longrightarrow |z| < 1.$$

El método se llama *A*-estable si es absolutamente estable en G con $\{z \mid \operatorname{Re} z < 0\} \subset G$, $A(\alpha)$-estable si es absolutamente estable en G con $\{z \mid \arg(-z) \in (-\alpha, \alpha)\} \subset G \quad (\alpha > 0)$, y A_0-estable si es absolutamente estable en G con

$$\left\{z \mid \operatorname{Re} z < 0, \; \operatorname{Im} z = 0\right\} \subset G.$$

Si el método es A-estable y adicionalmente

$$\limsup_{\operatorname{Re} q \to -\infty} \max\left\{|z| \mid P(z;q) = 0\right\} < 1,$$

el método se llama *L*-estable.

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Un método A-estable permite la integración estable (no: exacta) de $y' = \lambda y$, $y(0) = y_0$ con un tamaño de paso h arbitrario.

Podemos esperarnos que un tal método también permite la integración estable y exacta de sistemas rígidos si el tamaño de paso es determinado según los componentes suaves y lentamente decrecientes, una vez que los componentes rápidamente decrecientes de la solución ya no son importantes.

Ningún método explícito es A-estable.

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Ejemplo 2.3 El método de Euler explícito es absolutamente estable precisamente en

$$\{z \in \mathbb{C} \mid |z+1| < 1\},$$

y no puede ser usado, por ejemplo, para ecuaciones diferenciales ordinarias de oscilación, dado que este método siempre amplifica las amplitudes de la solución por un factor $(1 + hC)$ por paso, donde C es una constante que no depende de h.

Espacio:

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Ejemplo 2.3 (continuación) El método de Euler implícito es absolutamente estable precisamente en

$$\{z \in \mathbb{C} \mid |z-1| > 1\},$$

este método también es A-estable y L-estable, pero no es apto para ecuaciones de oscilación ya que amortigua la amplitud de la solución discretizada por un factor $1/(1+hC)$ en cada paso.

Espacio:

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Ejemplo 2.3 (continuación) La regla trapezoidal (1.38):

$$\boldsymbol{y}_{i+1}^h = \boldsymbol{y}_i^h + \frac{h}{2}\Big(\boldsymbol{f}\left(x_i, \boldsymbol{y}_i^h\right) + \boldsymbol{f}\left(x_{i+1}, \boldsymbol{y}_{i+1}^h\right)\Big)$$

entrega aquí:

Espacio:

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Ejemplo 2.3 (continuación) La regla trapezoidal es absolutamente estable estrictamente para

$$\left| \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}} \right| < 1,$$

es decir, es absolutamente estable estrictamente para

$$z \in \mathbb{C}_- := \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z < 0\}.$$

Es apta para ecuaciones de oscilación (por ejemplo, $y' = \omega \mathrm{i} y$, $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$) porque

$$\operatorname{Re} z = 0 \Longrightarrow \left| \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}} \right| = 1.$$

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Sin embargo, la regla trapezoidal no es L-estable. Esto se nota en el caso de soluciones decrecientes porque a la solución discretizada se agregan oscilaciones pequeñas (pero acotadas).

Para la solución discretizada de (2.5), el método trapezoidal entrega

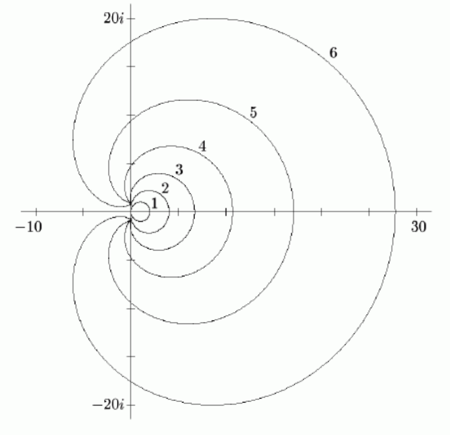
$$
\begin{aligned}
y_i^h = \left(\frac{1 + \dfrac{h\lambda}{2}}{1 - \dfrac{h\lambda}{2}} \right)^i y_0 &= (-1)^i \left(\frac{h\lambda + 2}{h\lambda - 2} \right)^i y_0 \\
&= (-1)^i \left(1 + \frac{4}{h\lambda - 2} \right)^i y_0,
\end{aligned}
$$

o sea, para $h\lambda < -2$ obtenemos una solución amortiguada, pero oscilatoria de la solución exacta monótona.

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Los métodos BDF de k pasos son $A(\alpha)$-estables, con

k	1	2	3	4	5	6
α	90°	90°	$88^\circ 02'$	$73^\circ 21'$	$51^\circ 50'$	$17^\circ 50'$



2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

En particular, el método con $k = 2$ es A-estable (e incluso L-estable). Con este método (el método BDF con $k = 2$) y la regla trapezoidal ya conocemos dos métodos lineales de pasos múltiples A-estables.

Lamentablemente, no existen métodos de pasos múltiples lineales y A-estables del orden mayor que 2.

Teorema 2.1 (Segunda cota de orden de Dahlquist) Cada método consistente, A-estable, lineal y de pasos múltiples es del orden de consistencia $\leqslant 2$.

El dominio de estabilidad de los métodos de Adams-Moulton de $k \geqslant 2$ pasos, de los métodos de Adams-Bashforth de $k \geqslant 1$ pasos, del método predictor-corrector y de los métodos explícitos de Runge-Kutta es relativamente pequeño. Para todos estos métodos, la condición de estabilidad es

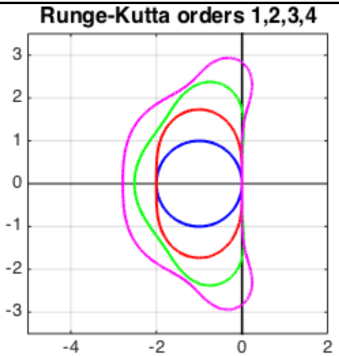
$$\left|\frac{h}{\lambda}\right| < C,$$

donde C es una constante del orden de magnitud 1.

2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Intervalos reales $(\gamma, 0)$ de la estabilidad absoluta para los métodos de Runge-Kutta explícitos de $m = p$ pasos (lo que incluye el método clásico con $m = 4$):

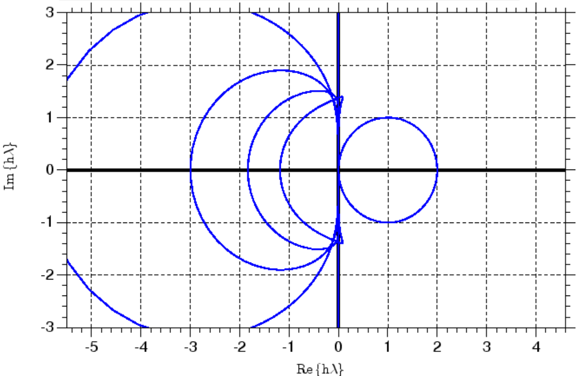
$m = p$	1	2	3	4
γ	-2	-2	$-2{,}51$	$-2{,}78$



2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Intervalos reales $(\gamma, 0)$ de la estabilidad absoluta para los métodos de Adams-Moulton con k pasos:

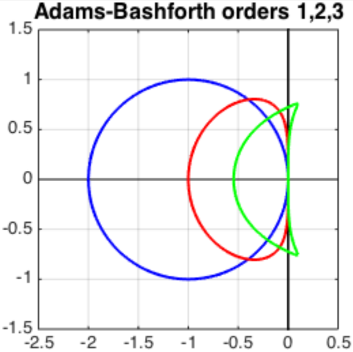
k	1	2	3	4	5
γ	$-\infty$	-6	-3	$-\dfrac{90}{49}$	$-\dfrac{45}{38}$



2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

Intervalos reales $(\gamma, 0)$ de la estabilidad absoluta para los métodos de Adams-Bashforth con k pasos:

k	1	2	3	4	5
γ	-2	-1	$-\frac{6}{11}$	$-\frac{3}{10}$	$-\frac{90}{551}$



2.2. Estabilidad de métodos para PVIs de EDOs

De los métodos discutidos hasta ahora, sólo

- el método trapezoidal,
- el método del punto medio implícito,
- y los métodos BDF con $k \leqslant 6$ pasos son aptos para ecuaciones muy rígidas, estos últimos con la restricción que no deben aparecer componentes de soluciones con $\arg(-\lambda) > \alpha$.