Análisis Numérico III
Problemas de valores iniciales
de ecuaciones diferenciales ordinarias (Parte II)
Módulo 2, Presentación 5

Raimund Bürger

11 de abril de 2022

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

2.2.2 Estabilidad no lineal Los resultados relacionados con estabilidad lineal son insatisfactorios: permiten solamente conclusiones muy tentativas respecto al comportamiento de métodos de disretización aplicados a problemas no lineales. Ciertos sistemas lineales con coeficientes variables ya presentan problemas particulares.

Ejemplo 2.4 Consideremos el problema de valores iniciales

$$y' = \lambda(x)y, \quad y(0) = y_0; \quad \lambda : \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}^-, \quad \lambda \in C^1(\mathbb{R}^+).$$

Aquí el método de Euler implícito es estable sin restricción para $h > 0$.

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.4 (continuación) El método trapezoidal genera la recursión

$$y_{i+1}^h = \frac{2+\lambda(x_i)h}{2-\lambda(x_{i+1})h} y_i^h.$$

La condición

$$\forall i \in \mathbb{N}_0 : \quad \left|y_{i+1}^h\right| \leqslant \left|y_i^h\right|$$

nos entrega para

$$\sup_{x\in\mathbb{R}^+} \lambda'(x) = \beta > 0$$

la restricción

$$h \leqslant \frac{2}{\sqrt{\beta}}.$$

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.4 (continuación) El método del punto medio implícito,

$$y_{i+1}^h = y_i^h + hf\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{y_i^h + y_{i+1}^h}{2}\right),$$

es equivalente al método trapezoidal para una ecuación lineal con coeficientes constantes. Pero aquí el método del punto medio implícito asume la forma

$$y_{i+1}^h = \frac{2 + h\lambda\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)}{2 - h\lambda\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)} y_i^h,$$

o sea el método es estable sin restricciones.

Para sistemas lineales con coeficientes variables ya no podemos concluir que la solución es estable cuando los valores propios de

$$\partial_2 \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})\Big|_{\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}(x)} = \boldsymbol{A}(x)$$

son suficientemente pequeños.

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.5 Consideremos el problema de valores iniciales

$$\boldsymbol{y}' = \frac{1}{\varepsilon}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}(x)\begin{bmatrix} -1 & \eta \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\boldsymbol{U}(x)\boldsymbol{y} \equiv \boldsymbol{A}(x)\boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{y}_0,$$

con un parámetro $\varepsilon > 0$, y la matriz

$$\boldsymbol{U}(x) = \begin{bmatrix} \cos(\alpha x) & \sin(\alpha x) \\ -\sin(\alpha x) & \cos(\alpha x) \end{bmatrix}.$$

Los valores propios de $\boldsymbol{A}$ son $\lambda_1 = \lambda_2 = -1/\varepsilon$.

Usando la transformación

$$\boldsymbol{v}(x) := \boldsymbol{U}(x)\boldsymbol{y}(x),$$

tenemos $\|\boldsymbol{y}(x)\|_2 = \|\boldsymbol{v}(x)\|_2$, y $\boldsymbol{v}$ es solución del PVI

$$\boldsymbol{v}' = \begin{bmatrix} -\dfrac{1}{\varepsilon} & \dfrac{\eta}{\varepsilon} + \alpha \\ -\alpha & -\dfrac{1}{\varepsilon} \end{bmatrix}\boldsymbol{v}, \quad \boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{y}_0.$$

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.5 (continuación) Esto significa que

$$\boldsymbol{v}(x) = \boldsymbol{v}_1 \exp(\kappa_1 x) + \boldsymbol{v}_2 \exp(\kappa_2 x), \quad \kappa_{1,2} = -\frac{1}{\varepsilon} \pm \sqrt{-\alpha\left(\frac{\eta}{\varepsilon} + \alpha\right)},$$

donde los vectores $\boldsymbol{v}_1$ y $\boldsymbol{v}_2$ dependen de $\boldsymbol{y}_0$.

Vemos que para $0 < \varepsilon < 1$, $\alpha = -1$ y $\eta > 2$ existen soluciones que crecen exponencialmente.

Existen varias extensiones de la teoría lineal de estabilidad para métodos de discretización a sistemas generales. Para el siguiente tipo de ecuaciones ya existen resultados.

Definición 2.3 Sea $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, y para un producto escalar $\langle\cdot,\cdot\rangle$, supongamos que

$$\begin{aligned} &\forall x \in \mathbb{R}^+ : \ \forall \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n : \\ &\big\langle \boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{v}), \boldsymbol{u} - \boldsymbol{v} \big\rangle \leqslant m \langle \boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} - \boldsymbol{v} \rangle. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Si $m \leqslant 0$, entonces la ecuación diferencial ordinaria $\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{y})$ se llama disipativa.

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.6 Consideremos el problema

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = -\nabla h\big(\boldsymbol{x}(t)\big), \quad t > 0; \quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0, \tag{2.9}$$

donde $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sea una función dos veces continuamente diferenciable y uniformemente convexa, es decir,

$$\exists \gamma > 0 : \ \forall \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n : \quad \gamma \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z} \leqslant \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \nabla^2 h(\boldsymbol{y}) \boldsymbol{z}.$$

Con la notación de la Definición 2.3, tenemos

$$\boldsymbol{f} = -\nabla h$$

(esta función no depende explícitamente de t), y usando el producto escalar definido por $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y}$, obtenemos

$$\begin{aligned} &\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})\big)^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \\ &= (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})^{\mathrm{T}} \left(\int_0^1 \nabla^2 h\big(\boldsymbol{x} + \tau(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})\big) \, \mathrm{d}\tau \right) (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \\ &\leqslant -\gamma (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}), \end{aligned}$$

o sea, $m = -\gamma < 0$ en (2.8).

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Ejemplo 2.6 (continuación) La ecuación diferencial ordinaria (2.9) tiene como única solución estacionaria el único mínimo $\boldsymbol{x}^*$ de h, y para $t \to \infty$ la solución de cualquier problema de valores iniciales de $\dot{\boldsymbol{x}} = -\nabla h(\boldsymbol{x})$ converge a $\boldsymbol{x}^*$. Entonces, se puede aproximar $\boldsymbol{x}^*$ por la solución numérica de (2.9), y como uno quiere hacer $t \to \infty$, se prefiere usar un tamaño de paso lo más grande posible, sin destruir la convergencia del método a la solución estacionaria. La ecuación (2.9) puede ser extraordinariamente rígida, lo que ocurre cuando $\nabla^2 h$ es una matriz mal acondicionada.

Notar que (2.8) no utiliza $\|\partial_2 \boldsymbol{f}\|$, es decir, la clase de ecuaciones diferenciales disipativas incluye problemas arbitrariamente rígidos.

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

Definición 2.4 Un método de discretización para problemas de valores iniciales de ecuaciones diferenciales ordinarias se llama optimalmente B-convergente del orden p sobre la clase de todos los problemas de valores iniciales disipativos, si

$$\left\|\boldsymbol{y}(x_i) - \boldsymbol{y}_i^h\right\| \leqslant C(x_i)h^p \quad \text{para } h < \bar{h} \text{ y } i \in \mathbb{N}_0,$$

donde $C(x_i)$ depende solamente de

$$\text{máx}\left\{\left\|\boldsymbol{y}^{(j)}(x)\right\| \mid x_0 \leqslant x \leqslant x_i,\, 1 \leqslant j \leqslant \bar{p}\right\}$$

para un cierto $\bar{p}$, suponiendo que la verdadera solución $\boldsymbol{y}(x)$ del problema es suficientemente diferenciable, para una función $\boldsymbol{f}$ que satisface (2.8) y $m \leqslant 0$.

2.2. Ecuaciones rígidas (problemas *stiff*)

La gran ventaja de los métodos optimalmente B-convergentes consiste en que la restricción del tamaño de paso no depende de la rigidez del sistema, y que el error global de la discretización no depende tampoco de la rigidez del sistema. Al contrario de eso, los métodos explícitos de Runge-Kutta, por ejemplo, poseen un error $h^p C(x_i)$, donde $C(x_i)$ también depende de $\|\partial_2 \boldsymbol{f}\|$. En general, el valor de $\bar{h}$ en la Definción 2.4 depende de m.

Teorema 2.2 El método de Euler implícito es optimalmente B-convergente del orden 1, y la regla trapezoidal y la regla implícita del punto medio son optimalmente B-convergentes del orden 2, en cada caso sobre la clase de los problemas de valores iniciales disipativos.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Los métodos de Runge-Kutta generales son caracterizados por el diagrama de Butcher:

$$\begin{array}{c|cccc} \alpha_1 & \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1m} \\ \alpha_2 & \beta_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \alpha_m & \beta_{m1} & \cdots & \cdots & \beta_{mm} \\ \hline & \gamma_1 & \gamma_2 & \cdots & \gamma_m \end{array}. \tag{1.20}$$

Un esquema de Runge-Kutta es implícito si existe un coeficiente $\beta_{ij} \neq 0$ con $j \geqslant i$. Debido al alto esfuerzo computacional, la aplicación de tales métodos para problemas no rígidos no sería muy económica. Para problemas rígidos estos métodos pueden ser muy ventajosos, dado que incluyen métodos optimalmente B-convergentes de orden arbitrariamente alto.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Demostramos que los métodos de Runge-Kutta implícitos pertenecen a la clase CA, ver Definición 2.1. Recordamos que

$$\boldsymbol{k}_j = \boldsymbol{f}\left(x + h\alpha_j, \boldsymbol{y}_i^h + h\sum_{l=1}^{m}\beta_{jl}\boldsymbol{k}_l\right), \quad j = 1, \ldots, m,$$

lo que implica que para $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) = \lambda \boldsymbol{y}$, $n = 1$ y $\boldsymbol{e} = (1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$,

$$(\boldsymbol{I} - \lambda h \boldsymbol{B})\boldsymbol{k} = \lambda y_i^h \boldsymbol{e}, \quad \boldsymbol{k} = \begin{pmatrix} k_1 \\ \vdots \\ k_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = (\beta_{jl})_{j,l=1,\ldots,m}.$$

Espacio:

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Para h suficientemente pequeño, $\boldsymbol{I} - \lambda h \boldsymbol{B}$ siempre es invertible y por lo tanto, $\boldsymbol{k}$ es bien definido. Según la regla de Cramer tenemos

$$k_j = \lambda y_j^h R_j(\lambda h), \quad j = 1, \ldots, m,$$

donde R_j es una función racional de λh:

$$R_j(z) = \frac{P_{j,m-1}(z)}{\det(\boldsymbol{I} - z\boldsymbol{B})} = \frac{P_{j,m-1}(z)}{\displaystyle\prod_{i=1}^{m}(1 - z\mu_i)}, \tag{2.10}$$

donde $\mu_1, \ldots, \mu_m$ son los valores propios de $\boldsymbol{B}$ y $P_{j,m-1}$ es un polinomio del grado máximo $m-1$; el grado máximo del polinomio del denominador de (2.10) es m.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Como

$$y_{i+1}^h = y_i^h + h\lambda \sum_{j=1}^{m} \gamma_j k_j,$$

obtenemos que

$$y_{i+1}^h = y_i^h + h\lambda y_i^h \sum_{j=1}^{m} \gamma_j R_j(\lambda h) = \tilde{R}_m(\lambda h) y_i^h,$$

donde $\tilde{R}_m$ es una función racional (cuociente de dos polinomios del grado máximo m).

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Ejemplo 2.7 Consideremos el método con $m = 2$ dado por

$$\begin{array}{c|cc} 1/4 & 1/4 & 0 \\ 3/4 & 1/4 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}. \tag{2.11}$$

Poniendo $f(x,y) = \lambda y$ obtenemos

$$k_1 = \lambda\left(y_i^h + \frac{h}{4}k_1\right), \quad k_2 = \lambda\left(y_i^h + h\left(\frac{1}{4}k_1 + \frac{1}{2}k_2\right)\right).$$

Es decir,

$$k_1 = \frac{\lambda y_i^h}{1 - \frac{h\lambda}{4}}, \quad k_2 = \frac{\lambda y_i^h}{1 - \frac{h\lambda}{4}} + \frac{\frac{\lambda h}{2}\lambda y_i^h}{\left(1 - \frac{h\lambda}{4}\right)^2},$$

por lo tanto

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Ejemplo 2.7 (continuación)

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

Como

$$
\left|1+\frac{h\lambda}{(1-h\lambda/4)^2}\right| = \frac{\left(1+\dfrac{(\operatorname{Re}\lambda)h}{4}\right)^2 + \dfrac{(\operatorname{Im}\lambda)^2h^2}{16}}{\left(1-\dfrac{(\operatorname{Re}\lambda)h}{4}\right)^2 + \dfrac{(\operatorname{Im}\lambda)^2h^2}{16}},
$$

este método es A-estable. Es consistente del orden 2. También es optimalmente B-convergente del orden 2.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Según la Definición 2.2, las propiedades de estabilidad lineal de un método de Runge-Kutta implícito depende de para cuales $z \in \mathbb{C}$ se satisface

$$\left|\tilde{R}_m(z)\right| < 1.$$

En esta clase de métodos existen métodos A-estables de orden arbitrariamente alto.

Si elegimos como α_i los nodos de Gauss para la función de peso 1 sobre $[0, 1]$, y como γ_i los pesos de Gauss asociados y como β_{ij} (los pesos de la cuadratura interior) de tal forma que

$$\sum_{j=1}^{m} \beta_{ij} g(\alpha_j) = \int_0^{\alpha_i} g(x)\,\mathrm{d}x \quad \text{para } g \in \Pi_{m-1},\ i = 1, \ldots, m,$$

obtenemos los métodos de Gauss-Runge-Kutta.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Por ejemplo, para $m = 2$ obtenemos el siguiente esquema.

$$\begin{array}{c|cc} \dfrac{3-\sqrt{3}}{6} & \dfrac{1}{4} & \dfrac{3-2\sqrt{3}}{12} \\ \dfrac{3+\sqrt{3}}{6} & \dfrac{3+2\sqrt{3}}{12} & \dfrac{1}{4} \\ \hline & \dfrac{1}{2} & \dfrac{1}{2} \end{array}.$$

Teorema 2.3

(a) Los métodos de Gauss-Runge-Kutta de m pasos son consistentes del orden $2m$.

(b) Los métodos de Gauss-Runge-Kutta de m pasos son A-estables y optimalmente B-convergentes del orden m sobre la clase de los problemas disipativos.

El orden de la B-convergencia puede ser significativamente menor que el orden de consistencia clásico. Esto es debido al requerimiento de que el residuo (término de error) debe ser independiente de la rigidez del sistema.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Se puede demostrar que para una función $\boldsymbol{f}$ disipativa, las pendientes $\boldsymbol{k}_j$ de un método de Gauss-Runge-Kutta son determinados en forma única por la ecuación del método , independientemente de la rigidez del sistema y para $h < \bar{h}$, para un $\bar{h} > 0$ fijo.

Sin embargo, la implementación de un tal método es bastante dificil, dado que, por ejemplo, en cada paso de integración para un sistema de ecuaciones diferenciales del orden n hay que resolver un sistema no lineal del orden nm.

En la práctica se presenta una situación más simple si $\beta_{ij} = 0$ para $j > i$, lo que corresponde a los métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos (DIRK). Un ejemplo es el método (2.11) del Ejemplo 2.7. Desafortunadamente, la mayoría de estos métodos son solamente optimalmente B-convergentes de primer orden.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

A veces se presentan problemas donde solamente $\|\partial_2 \boldsymbol{f}\|$ es grande, mientras que el orden de magnitud de todas las demás derivadas de $\boldsymbol{f}$ es pequeño comparado con $\|\partial_2 \boldsymbol{f}\|$, por ejemplo,

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{g}(x, \boldsymbol{y}),$$

con una función $\boldsymbol{g}$ para la cual todas las derivadas parciales tienen una norma del orden de magnitud $\mathcal{O}(1)$, mientras que los valores propios son dispersos en

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

En estos casos, podemos aplicar exitosamente los métodos de Rosenbrock y sus modificaciones.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Partimos de las ecuaciones de un método de Runge-Kutta diagonalmente implícito:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{f}\left(x + \alpha_1 h, \boldsymbol{y}^h + \beta_{11} h \boldsymbol{k}_1\right), \\
\boldsymbol{k}_2 &= \boldsymbol{f}\left(x + \alpha_2 h, \boldsymbol{y}^h + \beta_{21} h \boldsymbol{k}_1 + \beta_{22} h \boldsymbol{k}_2\right), \\
&\ \vdots \\
\boldsymbol{k}_m &= \boldsymbol{f}\left(x + \alpha_m h, \boldsymbol{y}^h + \beta_{m1} h \boldsymbol{k}_1 + \ldots + \beta_{mm} h \boldsymbol{k}_m\right).
\end{aligned}
$$

Estas ecuaciones se resuelven sucesivamente de forma iterativa, ejecutando un paso del método de Newton con

$$\boldsymbol{k}_i^{(0)} := 0$$

como dato inicial.

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Ecuaciones explícitas

$$\left[\boldsymbol{I} - h\beta_{ii}\partial_2 \boldsymbol{f} \left(x + \alpha_i h, \boldsymbol{y}^h + h\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}\boldsymbol{k}_j \right) \right] \boldsymbol{k}_i$$

$$= \boldsymbol{f} \left(x + \alpha_i h, \boldsymbol{y}^h + h\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}\boldsymbol{k}_j \right), \quad i = 1, \ldots, m.$$

Aquí hay que resolver sucesivamente m sistemas lineales. Desventaja: hay que calcular m matrices de Jacobi $\partial_2 \boldsymbol{f}$ y ejecutar m descomposiciones triangulares. Con una matriz fija $\boldsymbol{I} - h\beta\partial_2 \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ y una corrección correspondiente obtenemos

$$\big(\boldsymbol{I} - h\beta\partial_2 \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}^h)\big)\boldsymbol{k}_i$$

$$= \boldsymbol{f} \left(x + \alpha_i h, \boldsymbol{y}^h + h\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}\boldsymbol{k}_j \right) + h\partial_2 \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}^h) \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}\boldsymbol{k}_j,$$

$i = 1, \ldots, m.$

2.3. Métodos de RK implícitos y de Rosenbrock

Estas fórmulas son las fórmulas de Rosenbrock-Wanner. En esta clase de métodos hay muchos ejemplos de métodos A-estables o $A(\alpha)$-estables.

Ejemplo 2.8 Los siguientes coeficientes definen un método Rosenbrock-Wanner A-estable de orden 4:

$\beta = 0{,}395$,

β_{ij}	$j=1$	$j=2$	$j=3$
$i=2$	0,438		
$i=3$	0,796920457938	0,073079542062	
$i=4$	0	0	0

,

σ_{ij}	$j=1$	$j=2$	$j=3$
$i=2$	−0,767672395484		
$i=3$	−0,851675323742	0,522967289188	
$i=4$	0,288463109545	0,08802142734	−0,337389840627

,

	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$
γ_i	0,199293275702	0,482645235674	0,0680614886256	0,25

.