Método de diferencias finitas regresivas de Newton (BDF) para la resolución numérica de Ecuaciones Diferenciales Algebraicas.

Tomás Rivero Álvarez,Glicerio Viltres Castro
&
Miguel Angel Abreu Terán

VII Encuentro Cuba-México Métodos Numéricos y Optimización
La Habana,Cuba
Marzo 2018

Resumen

En el siguiente trabajo se resuelve el problema de valor inicial de las Ecuaciones Diferenciales Algebraicas (EDAs). Se analiza estabilidad de las soluciones de las EDAs semi-explícitas no lineales y se aplica el método de diferencias finitas regresivas de Newton (BDF) para su resolución numérica. Finalmente se ilustran varios ejemplos académicos para la aplicación del método BDF y se compara los resultados obtenidos con las ecuaciones diferenciales rígidas (Stiff EDOs).

INTRODUCCIÓN

Introducción

Las Ecuaciones Diferenciales-Algebraicas (EDAs) modelan de forman natural muchas aplicaciones de la ciencia y la Ingeniería tales como plantas generadoras de energía eléctrica, análisis de circuitos eléctricos, robótica móvil, reactores químicos de mezclado continuo (CSTR), simulación de sistemas mecánicos y problemas de control óptimo entre otros ([1] y [2]).

La forma más general de una EDA es la forma implícita:

$$F(x, y, y^{'}) = 0 \tag{1}$$

Donde x es la variable independiente, y la variable dependiente. La Jacobiana $\frac{\partial F}{\partial y^{'}}$ se asume singular o sea no existe $\left[\frac{\partial F}{\partial y^{'}}\right]^{-1}$. De lo contrario la ecuación (1) se considera una Ecuación Diferencial Ordinaria (EDO) implícita y puede ser reformulada como:

Introducción

$$y' = f(x, y) \tag{2}$$

Una EDA semi-explícita o una EDO con restricciones se define por:

$$y' = f(x, y, z) \tag{3}$$

$$g(x, y, z) = 0 \tag{4}$$

Donde x es la variable independiente, y es la variable diferencial o longitudinal y z es la variable algebraica o transversal.

Introducción

El índice diferencial (v_d) **de una EDA se define como el número de diferenciaciones requerido en la restricción** (4) para transformar el sistema EDA en su EDO intrínseca. El índice diferencial de $(3)-(4)$ es uno $(v_d = 1)$ si $\frac{\partial g}{\partial z}$ es no singular, o sea existe $\left[\frac{\partial g}{\partial z}\right]^{-1}$ y está acotada en una vecindad de la solución exacta y una diferenciación de (4) conduce a la solución de la restricción algebraica (4) respecto a $z^{'}$. Las incógnitas y, z son las variables diferenciales y algebraicas respectivamente. Problemas de EDAs de índice superior son más difíciles de resolver y requiere de algoritmos de cálculo más potentes. Afortunadamente, la mayoría de las EDAs que se encuentran en la práctica son de índice uno. Si el problema es de EDAs de índice **superior o igual a dos**, el modelo puede ser reducido a una combinación de la forma de **Hessenberg**.

Introducción

Muchos métodos numéricos multipasos para EDOs han sido desarrollados por muchos investigadores ([4]a[7]). En años recientes, muchos investigadores han volcado sus esfuerzos a resolver sistemas de EDAs por métodos numéricos, problema este que trae mucha más dificultad para EDAs de índice superior o igual a dos. El más común método multipaso para sistemas EDAs de índice bajo es el método de diferencias regresivas de Newton (BDF) ([1], [8], [9]) y el método de Runge Rutta $R-K$ implícito ([1]y[10]). Los métodos implícitos para EDAs de índice uno convergen con el mismo orden que para EDOs, o sea los métodos numéricos para resolver EDOs pueden funcionar bien para EDAs.

Introducción

Más recientemente fueron introducidos los métodos **BDF** por bloques de varios puntos por iteración usando paso constante para resolver EDAs de índice uno [11]. El problema de resolver sistemas EDAs por métodos **BDF** en bloque con paso variable ha sido menos considerado. Esta contribución profundiza en el trabajo hecho por $Abasi\ et\ als$ [11] mediante la implementación práctica de bloques BDF para la resolución de EDAs.

DESARROLLO

DESARROLLO

Sabemos que el problema del valor inicial para una EDO es:

$$y^{'} = f(x, y) \;\; con \;\; y(x_0) = y_0 \tag{5}$$

La solución aproximada de (8) luego de discretizar la ecuación diferencial se obtiene numéricamente para paso h constante como:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \;\; con \;\; n = 0, 1, 2, \ldots \tag{6}$$

Estos son **los métodos conocidos como de un paso.**
El polinomio interpolador de Lagrange $P_k(x)$ de grado k, el cual interpola los puntos:

$$(x_{n-2}, y_{n-2}), (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_n, y_n), \ldots, (x_{n-2+k}, y_{n-2+k})$$

DESARROLLO

Se define como:

$$P_k(x) = \sum_{j=0}^{k} L_{kj}(x) \cdot y(x_{n-2+j}) = \sum_{j=0}^{k} L_{kj}(x) \cdot y_{n-2+j} \qquad (7)$$

Siendo los polinomios de Lagrange en forma compacta:

$$L_{kj}(x) = \prod_{i=0, j\neq i}^{k} \frac{x - x_{n-2+i}}{x_{n-1+j} - x_{n-2+i}} \;\; con \;\; j = 0, 1, 2, \ldots \qquad (8)$$

Entonces se cumple que:

$$y(x) \approx P_k(x)$$

DESARROLLO

Y además:

$$y'(x) \approx P_k'(x) \approx f(x, y) \tag{9}$$

Para la interpolación de Lagrange de $y(x)$ tenemos:

$$P_k'(x) = \sum_{j=0}^{k} \frac{d}{dx}\left[L_{kj}(x)\right] \cdot y_{n-2+j} \tag{10}$$

$$P_k'(x) = f(x_n, y_n) = y'(x_{n+1}) \tag{11}$$

De donde se obtiene que:

$$\sum_{j=0}^{k} \left[\frac{d}{dx}\left[L_{kj}(x)\right]\right]_{x=x_{n+1}} \cdot y_{n-2+j} = f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{12}$$

DESARROLLO

Entonces el método BDF implícito para dos puntos multipaso para EDOs es de la forma:

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_i \cdot y_{n-2+j} = f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{13}$$

Siendo α_i:

$$\alpha_i = \left[\frac{d}{dx} [L_{kj}(x)] \right]_{x=x_{n+1}} \quad con \;\; i = 0, 1, 2, \ldots \tag{14}$$

DESARROLLO

Este esquema de cálculo BDF es multipaso pues para resolver un sistema EDO con ayuda de este método, es necesario usar un algoritmo predictor-corrector, de forma que la ecuación predictora puede ser el método de Runge-Kutta implícito de cualquier orden para EDOs y la ecuación o el esquema corrector la del método BDF en cuestión. En particular se busca que la ecuación predictora y la correctora sean del mismo orden.

DESARROLLO

Las soluciones de tal modelo descritas en el espacio de estado, pueden ser reducidas a ecuaciones diferenciales ordinarias implícitas (EDOs) y resueltas numéricamente mediante integración. **Está demostrado que los integradores para EDOs implícitas resuelven con un mínimo esfuerzo y de forma eficiente la EDA en un sistema multi cuerpo**. La demostración a esta afirmación está precisamente en empotrar un algoritmo de Runge-Kutta implícito de diagonal simple en el modelo propuesto. Este algoritmo, localmente estable, es de un grado de precisión más elevado y de un orden de magnitud más rápido que el algoritmo de RK semi-explícito y explícito que se pueden implementar directamente al modelo objeto de estudio. En este trabajo preferimos usar RK implícito.

DESARROLLO

Esencia del método:

Existe la posibilidad (Al menos implícitamente) de rescribir el problema continuo de un sistema diferencial algebraico semi-explícito:

$$y^{'} = f(y, z) \tag{15}$$

$$g(y, z) = 0 \tag{16}$$

en la forma de espacio de estado:

$$y^{'} = f(y, G(y)) \tag{17}$$

$$z = G(y)) \tag{18}$$

DESARROLLO

y usando el método de $R - K$ para resolver la ecuación (17) (Para z) en cada uno de los estados y el punto de solución final se derivan las ecuaciones del esquema de cálculo Runge-Kutta implícito:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{j=0}^{k} \alpha_{ij} \cdot f(y_{nj}, z_{nj}) \;\; con \;\; i = 0, 1, 2, \ldots \tag{19}$$

$$g(y_{nj}, z_{nj}) = 0 \tag{20}$$

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{j=0}^{k} b_j \cdot f(y_{nj}, z_{nj})$$

$$g(y_{n+1}, z_{n+1}) = 0 \tag{21}$$

DESARROLLO

Método BDF usando interpolación de Newton de diferencias finitas regresivas:

El polinomio de Newton, usando diferencias finitas regresivas es:

$$P_k(x) = P_k(x_n + sh) = \sum_{j=0}^{k} \binom{s-j+1}{j} \nabla^j f(y_n, z_n) \qquad (22)$$

Siendo: $s = \frac{(x - x_{n+1})}{h}$ de $x = x_{n+1} + sh$

Sabemos que el método de Euler:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \;\; con \;\; n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (23)$$

De donde:

$$f(x_n, y_n) = \frac{y_{n+1} - y_n}{h} \qquad (24)$$

DESARROLLO

Sustituyendo (27) en (25) tendremos:

$$P_k(x) = P_k(x_n + sh) = \sum_{j=0}^{k} \binom{-s+1}{j} \nabla^j \left[\frac{y_{n+1} - y_n}{h} \right] \tag{25}$$

o lo que es los mismo:

$$P_k(x) = \sum_{j=0}^{k} \binom{-s+1}{j} \nabla^{j+1} y_{n+1} \tag{26}$$

DESARROLLO

Derivando $P_k(x)$ respecto a s en (29) obtenemos:

$$P_k'(x) = \frac{d}{ds}\sum_{j=0}^{k} \binom{-s+1}{j} \nabla^{j+1} y_{n+1} \tag{27}$$

Para $s = 1$ se tiene que:

$$\approx f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{28}$$

DESARROLLO

Evaluando la derivada en $s = 1$:

$$\frac{d}{ds}\left[\binom{-s+1}{j}\right]_{s=1} = \frac{1}{j} \tag{29}$$

Finalmente:

$$\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} \nabla^{j+1}[y_{n+1}] = h \cdot f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{30}$$

O sea que:

$$P_k'(x_{n+1}) = y'(x_{n+1}) = hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{31}$$

DESARROLLO

Siendo:

$$\nabla^1 y_{n+1} = y_{n+1} - y_n$$

$$\nabla^2 y_{n+1} = \nabla^1 y_{n+1} - \nabla^1 y_n$$

$$\nabla^3 y_{n+1} = \nabla^2 y_{n+1} - \nabla^2 y_n$$

$$\vdots$$

$$\nabla^k y_{n+1} = \nabla^{k-1} y_{n+1} - \nabla^{k-1} y_n$$

DESARROLLO

Usando lo antes expuesto, es decir, las diferencias regresivas de Newton y despejando y_{n+1} de (33) obtenemos:

$$y_{n+1} = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n-j} + h\beta f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{32}$$

Siendo:

$$\alpha_j = \binom{t}{j} \quad con \quad j = 0, 1, 2, \ldots, k-1$$

$$t = \frac{(x - x_{n+1})}{h}$$

$$\beta = \quad coeficientes \quad def(x_{n+1}, y_{n+1})$$

DESARROLLO

En la siguiente Tabla se ilustra los valores más comunes del método BDF de orden k hasta $k = 5$ para EDOs:

k	β	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4
1	1	1				
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{3}$			
3	$\frac{6}{11}$	$\frac{18}{11}$	$-\frac{9}{11}$	$\frac{2}{11}$		
4	$\frac{12}{25}$	$\frac{48}{25}$	$-\frac{36}{25}$	$\frac{16}{25}$	$-\frac{3}{25}$	
5	$\frac{60}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{300}{137}$	$\frac{200}{137}$	$-\frac{75}{137}$	$\frac{12}{137}$

DESARROLLO

Podemos entonces obtener y_{n+1} conocidos los valores $y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{n-k+1}$, usando (35) los cuales se hallan por cualquier método para resolver ecuaciones diferenciales (Runge-Kutta, Euler, etc.)
Las EDAs son también conocidas como ecuaciones diferenciales singulares, descriptoras, impredecibles, no se pueden aplicar los mismos métodos conocidos para EDOs.

DESARROLLO

La razón de usar el método BDF para resolver las EDAs es que constituye el método más estable de los multipasos conocidos. **La teoría conocida de las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias no es aplicable a este tipo de ecuaciones.**

DESARROLLO

De lo analizado anteriormente se obtiene para interpolación de Newton es:

$$\nabla^1 y_{n+1} + \frac{1}{2}\nabla^2 y_{n+1} + \cdots + \frac{1}{n}\nabla^n y_{n+1} = hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \qquad (33)$$

Para $k = 1$

$$y_{n+1} - y_n = hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

Método de Euler.

Para $k = 2$

$$\frac{3}{2}y_{n+1} - 2y_n + \frac{1}{2}y_{n-1} = hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

DESARROLLO

Los métodos multipasos aplicados a la EDA semi-explícita $(3)-(4)$ con el esquema de cálculo $(38)-(39)$ son estables y convergen con el mismo orden de precisión para la EDA y para la EDO estándar no rígida. **Este resultado se deduce del Teorema de la función implícita.**

En la EDA de índice diferencial uno, la ecuación de la restricción puede ser resuelta para z_n en función de x_n y y_n o sea:

$$z_n = \bar{g}(x_n, y_n) \tag{34}$$

y por tanto z_n puede insertarse en la fórmula multipaso (35) para obtener la misma ecuación en diferencia que la que obtuvimos anteriormente para métodos multipasos lineales para EDOs:

$$y' = f(x, y, \bar{g}(x, y)) \tag{35}$$

DESARROLLO

EJEMPLOS RESUELTOS.

DESARROLLO

Ejemplo.1

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

$$z^3 - y^2 = 0, \quad z(0) = 1; \quad 0 \leq x \leq 10$$

BDF- Método BDF de paso variable.

2BBDF- Método BDF en bloque de dos puntos de paso variable.

IST- Número total de pasos exitosos.

IFST- Número total de pasos fallidos. MAXE- Error absoluto máximo.

Time- Tiempo de ejecución. TNS- Número total de pasos.

DESARROLLO

ϵ	Método	IFST	IST	TNS	MAXE	Time (msec)
10^{-2}	BDF	1	76	77	$3e^{-2}$	2.5
	2BBDF	0	18	18	$4e^{-4}$	0.74
10^{-4}	BDF	1	98	99	$3.6e^{-4}$	7.2
	2BBDF	0	23	23	$6.5e^{-5}$	0.91
10^{-6}	BDF	1	136	137	$3.6e^{-5}$	60
	2BBDF	0	31	31	$4.2e^{-6}$	1.2

DESARROLLO

Ejemplo.2

$$y' = x \cdot cos(x) - y + (1 + x) \cdot z, \quad y(0) = 1$$

$$sen(x) - z = 0, \quad z(0) = 0; \quad 0 \leq x \leq 10$$

DESARROLLO

ϵ	Método	IFST	IST	TNS	MAXE	Time (msec)
10^{-2}	BDF	9	106	115	$7.9e^{-3}$	1.5
	2BBDF	0	26	26	$6.6e^{-3}$	0.3
10^{-4}	BDF	12	179	191	$1.4e^{-4}$	3.9
	2BBDF	1	55	56	$3.1e^{-6}$	0.78
10^{-6}	BDF	18	326	344	$2.3e^{-6}$	37
	2BBDF	1	110	111	$5.3e^{-8}$	3

DESARROLLO

SUNDIALs (Suite on Differential-Algebraics) de Matlab ver. $10{,}0$

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Referencias bibliográficas

1 Brenan, K.E., Campbell, S.L and Petzold, L.R., Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations, Elsevier, New York, (1999).

2 Mc Clamroch, N.H., Singular systems of differential equations as dynamic models for constrained robot systems, Technical Report RSD TR-2-86, Robot System Division, Univ. of Michigan, (1986).

3 Petzold, L., Differential Algebraic Equations are not ODEs, J. Sci. Stat. Comput., No 3 (1982).

4 Brita L. G., Rabic O.A., Parallel block predictor-corrector methods for ODEs, IEEE Trans. Comput. 36, 299-311, (1987).

Referencias bibliográficas

5 Chu, M.T. Hamilton, H. Parallel solutions of ODEs by multiblock methods, SIAM J. Sci. Stat. Comput 8, 342-53, (1987).

6 Fatunla, S.O. Block methods for second order ODEs, International J. Comput. Math 41, 55-63, (1991).

7 Shampine L. F., Watts H. A., Block implicit one-step method, Math Comput. 23, 731-40, (1969).

8 Gear C. W., Simultaneous numerical solution of differential-algebraic equations, IEEE, Trans. Circ. Theory 18, 89-95, (1971).

Referencias bibliográficas

9 Asher U. and L Petzold, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential â Algebraic Equations, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, SIAM, (1998).

10 Asher U. and L Petzold, Projected implicit Runge Kutta Methods for Differential-algebraic Equations, SIAM, Journal Num. Analysis 28, 1097-120, (1991).

11 Abasi N., Suleiman M., Ismail F., 2-points and 3-points BBDF for solving semi-explicit index one DAEs, Appl. Sci. 6, 6679-89, (2012).

12 Ibrahim Z., Othman K. I., Suleiman M., Fixed coefficient block backward differentiation formulas for the numerical solution of stiff ordinary differential equations, Eur. J. Sci. Res. 21, 508-20, (2008).

Referencias bibliográficas

13 Brenan K.E., Engquist B.E., Backward differentiation approximations of nonlinear differential-algebraic equations, Supplement Math. Comp. 51, 659-676, (1988).

14 K.E. Brenan, S, L Campbell, S. L., Singular systems of differential equations I, Pitman Publishing Inc. (1980).

15 Campbell, S. L., Singular systems of differential equations II, Pitman Publishing Inc. (1982).

16 L. M. Francisco C. García Durán. M. C. Horacio, Leyva Castellanos, Ecuaciones Diferenciales Algebraicas y Circuitos Eléctricos. Departamento de Matemáticas. Universidad de Sonora, México. (1998).

Referencias bibliográficas

17 Tischendörf, Caren Solution of Index 2- Differential Algebraic Equations and its application on circuit simulation. PhD. Thesis. Humboldt University von Berlín, (1996)

18 Dr. März, Rosina Problems in Solving DAEs, Humboldt University von Berlín, (2003).

19 Vargas, A., A descriptor systems toolbox for MATLAB., Proc. of IEEE International Symposium on Computer Aided Control System Design, CACSD2000, Anchorage, Alaska, (2000).

20 Campbell S. L., Descriptor Systems in the $90'$s, Proceeding of the 29-th Conference on Decision and Control, Honolulu , HI, December, 1990, pp. 442-447.

¡MUCHAS GRACIAS!