

Teoría cualitativa y simulación numérica en problemas algebraico-diferenciales

Inmaculada Higuera

Departamento de Matemática e Informática
Universidad Pública de Navarra, Spain.



Outline

- 1 Problemas a resolver
 - DAEs
 - Ejemplos
- 2 Líneas de trabajo
 - Estabilidad
 - Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas
 - Comportamiento cualitativo de soluciones
 - Implementación de métodos
- 3 Dificultades
- 4 Epílogo

Outline

- 1 Problemas a resolver
 - DAEs
 - Ejemplos
- 2 Líneas de trabajo
 - Estabilidad
 - Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas
 - Comportamiento cualitativo de soluciones
 - Implementación de métodos
- 3 Dificultades
- 4 Epílogo

Métodos numéricos para P.V.I. para **sistemas algebraico diferenciales** (DAEs)

$$F(t, y(t), y'(t)) = 0$$

con $\partial F/\partial y'$ singular

(Si $\partial F/\partial y'$ es regular \longrightarrow ODE implícita)

- Son clasificadas mediante un entero: **índice**
- Índice \approx número de veces que hay que derivar la DAE para obtener una ODE
 - Índice 0 \equiv ODEs
 - Índice 1: “parecidas” a las ODEs
 - Índice ≥ 2 : DAEs de índice alto
- Historia:
 - '80 - actualidad: Intensa actividad investigadora
 - '80: \longrightarrow Métodos numéricos para ODEs: fallan para DAEs

Simulación de circuitos

NAND-gate (DAE de índice 2)

- Modified Nodal Analysis (MNA) clásico:

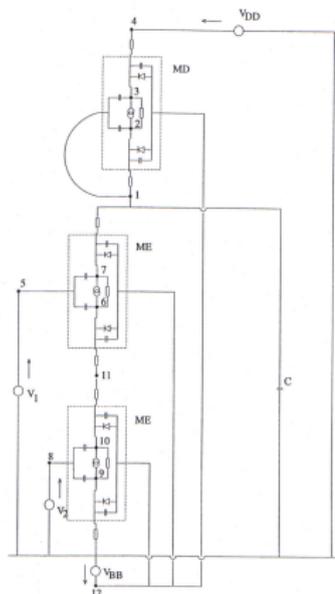
$$D(x(t))x'(t) + f(x(t)) = r(t)$$

- *Charge-oriented* MNA

$$\begin{cases} Aq'(t) + f(x(t)) = r(t) \\ q(t) - g(x(t)) = 0 \end{cases}$$

con $(x(t), q(t)) \in \mathbb{R}^{29}$

(No CV-loops + No LI-cutsets \rightarrow índice 1)



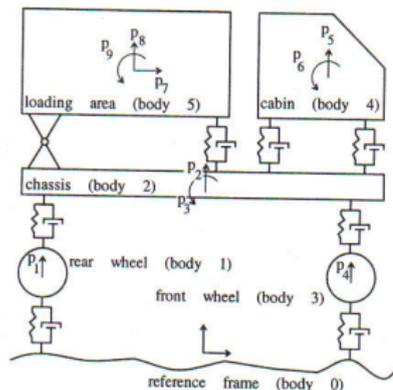
Sistemas mecánicos con ligaduras

Sistemas mecánicos con ligaduras (DAEs de índice 3)

$$\begin{cases} M p'' = f(t, p, p') - G(p)^t \lambda \\ 0 = g(p) \end{cases}$$

con $G(p) = dg(p)/dp$.

$$(p(t), \lambda(t)) \in \mathbb{R}^9 \times \mathbb{R}^2$$



Resolución numérica de P.V.I. para **sistemas diferenciales ordinarios**:

DAEs de índice 0

- $\frac{d}{dt} u(t) = f(t, u(t))$,
- $\frac{d}{dt} u(t) = f(t, u(t)) + \tilde{f}(t, u(t))$, (aditivas)
- $\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t) = f(u(t), z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = f(u(t), z(t)), \end{cases}$ (particionadas)
- $\frac{d^2}{dt^2} u(t) = f(t, u(t))$. (segundo orden)

→ funciones f, \tilde{f} (ó variables $(u(t), z(t))$) con diferentes propiedades de stiffness

→ e.g., semidiscretización of PDEs dependientes del tiempo

Resolución numérica de P.V.I. para **sistemas diferenciales ordinarios**:

DAEs de índice 0

- $\frac{d}{dt} u(t) = f(t, u(t))$,
- $\frac{d}{dt} u(t) = f(t, u(t)) + \tilde{f}(t, u(t))$, (aditivas)
- $\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t) = f(u(t), z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = f(u(t), z(t)), \end{cases}$ (particionadas)
- $\frac{d^2}{dt^2} u(t) = f(t, u(t))$. (segundo orden)

Métodos numéricos

- Runge-Kutta, Runge-Kutta aditivos (IMEX, Implicit Explicit),
Runge-Kutta particionados, Runge-Kutta Nyström, ...
- BDFs, ...

Outline

- 1 Problemas a resolver
 - DAEs
 - Ejemplos
- 2 **Líneas de trabajo**
 - Estabilidad
 - Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas
 - Comportamiento cualitativo de soluciones
 - Implementación de métodos
- 3 Dificultades
- 4 Epílogo

Líneas de trabajo

- Métodos numéricos para DAEs
- Teoría cualitativa y simulación numérica en problemas algebraico-diferenciales
 - Estabilidad para DAEs: solución teórica, solución numérica
 - Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas (PDAEs)
 - Métodos SSP, métodos monótonos, métodos positivos (ODEs)

 - Implementación de métodos Runge-Kutta (ODEs, DAEs)

Estabilidad

Dada una DAE (por simplificar, lineal):

$$A(t)x' + B(t)x = 0$$

- Ejemplos:

- Estabilidad asintótica para la solución exacta, PERO

- Métodos algebraicamente estables \Rightarrow restricciones de paso

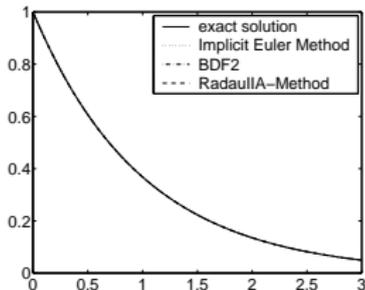
- Contexto: Simulación de circuitos (DAEs linealmente implícitas)

- Objetivos:

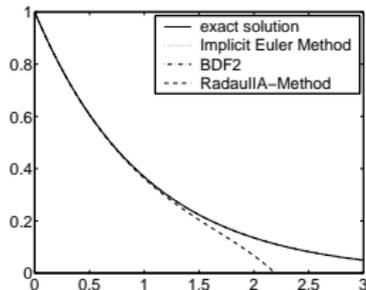
- Condiciones suficientes para estabilidad asintótica

- Estabilidad numérica sin restricciones de paso

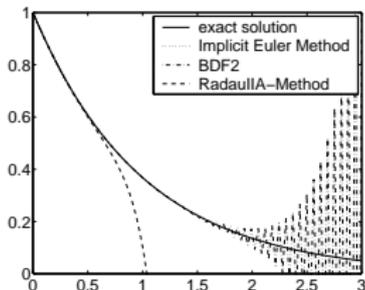
Ejemplo



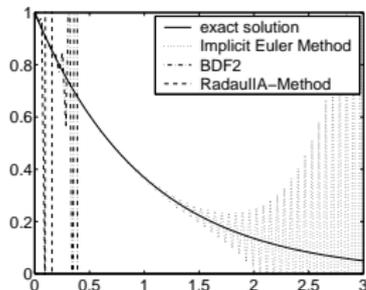
$$\eta = -0.20$$



$$\eta = -0.26$$



$$\eta = -0.28$$



$$\eta = -0.52$$

$$A(x(t), t)[d(x(t), t)]' + f(t, x(t)) = 0$$

$A(x, t)$ -matriz de funciones- y $d(t, x)$ “adecuados” (*properly stated leading terms*)

$$\text{Ker } A(x, t) \oplus \text{Img } D(x, t) = \mathbb{R}^m$$

con $D(x, t) = \partial d(x, t) / \partial x$.

- Simulación de circuitos: charge-oriented MNA

$$A[q(A^t x(t))] + f(t, x(t)) = 0$$

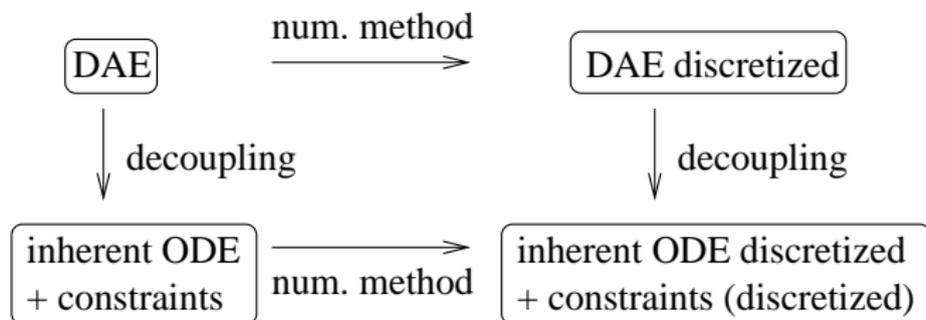
- Sistemas mecánicos: simplificar fuerzas Coriolis

$$A[D(x(t))] + f(t, x(t)) = 0$$

Estabilidad

- Existencia y unicidad de solución, convergencia de métodos RK y BDFs (Índice 1)
- Estabilidad de la soluciones, análisis de reformulaciones (DAE lineal de índice 1, 2)

Numerically well formulated DAE



Estabilidad

Numerically well formulated DAE

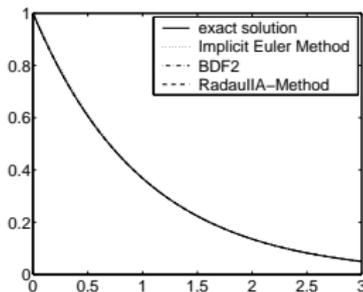
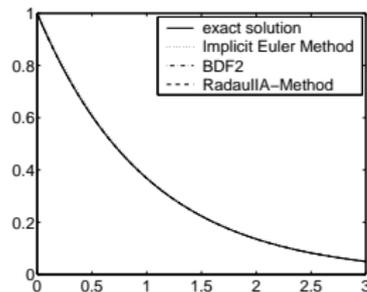
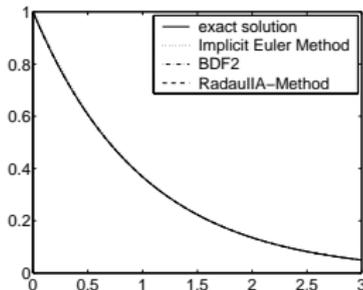
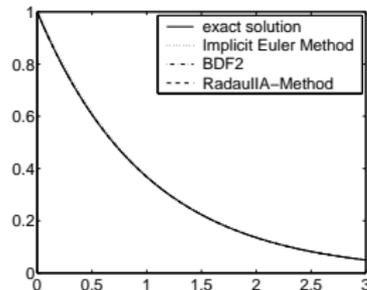
- Índice 1: Ker $A(x, t)$ ó Img $D(x, t)$ constante
- Índice 2: Ciertos subespacios constantes

Simulación de circuitos: charge-oriented MNA $A[q(A^t x(t))]' + f(t, x(t)) = 0$

- Estabilidad asintótica: **normas logarítmicas de haces de matrices**
 (A, B) , $\mu_V[A, B]$
- Métodos algebraicamente estables \Rightarrow monotonía sin restricciones de paso
- **Análisis de reformulaciones**

Ejemplo (de nuevo)

Reformulaciones:

DAE with properly stated leading terms + numerically qualified DAE $\eta = -0.20$  $\eta = -0.26$  $\eta = -0.28$  $\eta = -0.52$

Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas (PDAEs)

- Idea intuitiva

Semidiscretización de EDP \longrightarrow ODE

Semidiscretización de PDAE \longrightarrow DAE

$$A \frac{d}{dt} D(x(t), t) + B(x(t), t) = 0$$

con $\text{Ker } A$ no trivial, $D(x, t)$ y $B(x, t)$ operadores

- Ejemplo (PDAE índice 1)

$$\rho c \theta_t = -\text{div } q + h$$

$$q = -\text{grad } \mathcal{H}(x, \text{grad } \theta)$$

- Contexto

\longrightarrow Circuitos

\longrightarrow Sistemas mecánicos **elásticos** con restricciones

Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas (PDAEs)

DAE/PDAE de índice 1

$$Ax' = f(x)$$

con A singular

- Extensión de normas logarítmicas:
a DAEs **no lineales** y
PDAEs **cuasilineales**
- Estudio de perturbaciones:
DAEs/PDAEs y
discretizaciones de DAEs/PDAEs con métodos RKs

Ejemplo: Sistemas multicuerpo elásticos

Sistemas multicuerpo elásticos (formulación débil)

$$\begin{aligned}\rho u'' + Au + B'\lambda &= l \\ Bu &= m\end{aligned}$$

- Normas logarítmicas (\equiv condición de elipticidad)
- Podemos adaptar las técnicas de B -convergencia de métodos Runge-Kutta

Comportamiento cualitativo de soluciones

Sistemas hiperbólicos de leyes de conservación $u_t = -f(u)_x$

Semidiscretización \longrightarrow EDO

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Métodos TVD (total variation diminishing)} \\ \text{Métodos SSP (strong stability preserving)} \end{array} \right.$$

Formalmente:

- Monotonía de la solución para ciertas **funciones convexas** (normas, seminormas, entropía, ...).

\longrightarrow Caracterización del problema monótono.

Caracterización del problema monótono \equiv restricción de paso del método de Euler explícito

\longrightarrow Propiedad de monotonía de la solución numérica (quizás con restricciones de paso \equiv coeficiente CFL).

Radio de absoluta monotonía de un método RK \equiv CFL óptimo

Comportamiento cualitativo de soluciones

- Propiedad de positividad de la solución.
 - Caracterización del problema positivo.
 - Propiedad de positividad de la solución numérica (quizás con restricciones de paso \equiv coeficiente CFL).

 - Métodos RK explícitos, RK implícitos, RK aditivos (Implicit-Explicit IMEX), ...
- Monotonía con normas de producto interno: Métodos RK, RK aditivos

Ejemplo: modelo de Broadwell

Modelo de Broadwell

$$\frac{df_j}{dt} = -\frac{f_j - f_{j-1}}{\Delta x} + \frac{1}{\varepsilon} (h_j^2 - f_j g_j),$$

$$\frac{dh_j}{dt} = -\frac{1}{\varepsilon} (h_j^2 - f_j g_j),$$

$$\frac{dg_j}{dt} = \frac{g_{j+1} - g_j}{\Delta x} + \frac{1}{\varepsilon} (h_j^2 - f_j g_j),$$

donde ε es un parámetro pequeño

ODE aditiva, con términos aditivos

$$F_1 = \begin{pmatrix} -\frac{f_j - f_{j-1}}{\Delta x} \\ 0 \\ \frac{g_{j+1} - g_j}{\Delta x} \end{pmatrix}, \quad F_2 = \frac{1}{\varepsilon} (h_j^2 - f_j g_j) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

→ Discretización del modelo Broadwell continuo.

Ejemplo: modelo de Broadwell

Entropía: función monótona decreciente

$$\mathcal{H}(t) = \int [f(x, t) \log f(x, t) + 2h(x, t) \log h(x, t) + g(x, t) \log g(x, t)] dx$$

Entropía *discreta*: también función monótona decreciente

$$\mathcal{H}_{\Delta x}(t) = \Delta x \sum_j (f_j(t) \log f_j(t) + 2h_j(t) \log h_j(t) + g_j(t) \log g_j(t))$$

Solución exacta: positiva

$$f(x, t) \geq 0, \quad h(x, t) \geq 0, \quad g(x, t) \geq 0$$

Solución *numérica*: también positiva

$$f_j(t) \geq 0, \quad h_j(t) \geq 0, \quad g_j(t) \geq 0$$

Problema: Monotonía de la función de entropía + positividad **numérica**

Ejemplo: modelo de Broadwell

Entropía: función monótona decreciente

$$\mathcal{H}(t) = \int [f(x, t) \log f(x, t) + 2h(x, t) \log h(x, t) + g(x, t) \log g(x, t)] dx$$

Entropía **discreta**: también función monótona decreciente

$$\mathcal{H}_{\Delta x}(t) = \Delta x \sum_j (f_j(t) \log f_j(t) + 2h_j(t) \log h_j(t) + g_j(t) \log g_j(t))$$

Solución exacta: positiva

$$f(x, t) \geq 0, \quad h(x, t) \geq 0, \quad g(x, t) \geq 0$$

Solución **numérica**: también positiva

$$f_j(t) \geq 0, \quad h_j(t) \geq 0, \quad g_j(t) \geq 0$$

Problema: Monotonía de la función de entropía + positividad **numérica**

Ejemplo: modelo de Broadwell

Entropía: función monótona decreciente

$$\mathcal{H}(t) = \int [f(x, t) \log f(x, t) + 2h(x, t) \log h(x, t) + g(x, t) \log g(x, t)] dx$$

Entropía **discreta**: también función monótona decreciente

$$\mathcal{H}_{\Delta x}(t) = \Delta x \sum_j (f_j(t) \log f_j(t) + 2h_j(t) \log h_j(t) + g_j(t) \log g_j(t))$$

Solución exacta: positiva

$$f(x, t) \geq 0, \quad h(x, t) \geq 0, \quad g(x, t) \geq 0$$

Solución **numérica**: también positiva

$$f_j(t) \geq 0, \quad h_j(t) \geq 0, \quad g_j(t) \geq 0$$

Problema: Monotonía de la función de entropía + positividad **numérica**

Ejemplo: modelo de Broadwell

Entropía: función monótona decreciente

$$\mathcal{H}(t) = \int [f(x, t) \log f(x, t) + 2h(x, t) \log h(x, t) + g(x, t) \log g(x, t)] dx$$

Entropía **discreta**: **también** función monótona decreciente

$$\mathcal{H}_{\Delta x}(t) = \Delta x \sum_j (f_j(t) \log f_j(t) + 2h_j(t) \log h_j(t) + g_j(t) \log g_j(t))$$

Solución exacta: positiva

$$f(x, t) \geq 0, \quad h(x, t) \geq 0, \quad g(x, t) \geq 0$$

Solución **numérica**: **también** positiva

$$f_j(t) \geq 0, \quad h_j(t) \geq 0, \quad g_j(t) \geq 0$$

Problema: Monotonía de la función de entropía + positividad **numérica**

Ejemplo: modelo de Broadwell

- Método de Euler Implícito-Implícito

$$\mathbb{A} \longrightarrow \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1 & 0 \end{array} \qquad \tilde{\mathbb{A}} \longrightarrow \begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1 & 0 \end{array}$$

- Positividad de la solución numérica + monotonía de la función de entropía discreta:

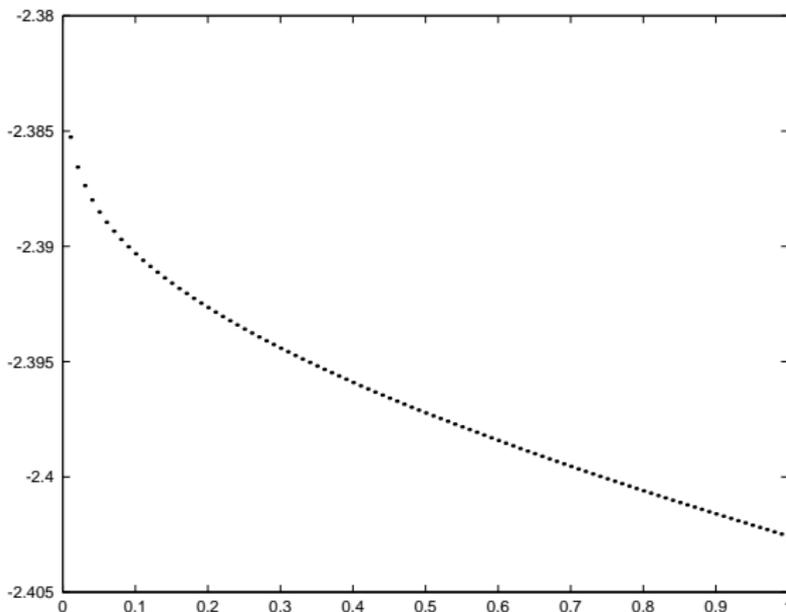
$$h \leq \Delta x$$

→ Otros métodos IMEX (Implicit-Explicit)

Ejemplo: modelo de Broadwell

Positividad y monotonía de la función de entropía:

$$h \leq \Delta x$$

Para $\varepsilon = 0.001$, $h = \Delta x = 0.01$, la función de entropía para $t \in [0, 1]$ 

Sistemas no lineales: Inicialización de esquemas iterativos

- Métodos implícitos \implies resolución de **sistemas no lineales** con un método iterativo
- Buenos inicializadores del método iterativo \implies pocas iteraciones (poco coste computacional)
- Malos inicializadores
 - \implies excesivo número de iteraciones, o
 - \implies no convergencia (peor)
- Problema importante desde el punto de vista práctico
- Logros
 - \longrightarrow Inicializadores con orden elevado. Inicializadores óptimos
 - \longrightarrow Integración numérica con menor coste computacional
 - \longrightarrow Evitamos problemas de convergencia

Sistemas no lineales: Inicialización de esquemas iterativos

Tipo de problemas:

- DAEs de índice 1, 2 y 3: métodos Runge-Kutta generales.
- ODEs y DAEs de índice 1: métodos DIRK
- ODEs de segundo orden: Métodos Runge-Kutta Nyström
- ODEs: Métodos Runge-Kutta aditivos (IMEX) y particionados.

Outline

- 1 Problemas a resolver
 - DAEs
 - Ejemplos
- 2 Líneas de trabajo
 - Estabilidad
 - Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas
 - Comportamiento cualitativo de soluciones
 - Implementación de métodos
- 3 **Dificultades**
- 4 Epílogo

Dificultades

Aplicación de resultados a problemas reales por dos motivos:

- Computación: El desarrollo códigos para la implementación de algoritmos excede de nuestra capacidad de trabajo.
- No manejamos las herramientas y técnicas más recientes de EDPs evolutivas.

Outline

- 1 Problemas a resolver
 - DAEs
 - Ejemplos
- 2 Líneas de trabajo
 - Estabilidad
 - Ecuaciones en derivadas parciales algebraicas
 - Comportamiento cualitativo de soluciones
 - Implementación de métodos
- 3 Dificultades
- 4 **Epílogo**

Epílogo

Con quién quisiéramos contactar:

- Grupos que trabajan en EDPs/PDAEs evolutivas y que tuvieran necesidad de realizar integraciones temporales eficientes.
- Grupos que trabajan en integración temporal de problemas diferenciales.

Qué podemos aportar:

- Nuestra experiencia en el análisis y desarrollo de métodos numéricos eficientes para la integración temporal de problemas diferenciales.
- Capacidad de estudiar y abordar la integración temporal de un problema con técnicas de paralelización, métodos multiescala, etc,