

VISUALIZACIÓN ESTEREOSCÓPICA DEL ERROR EN ALGORITMOS NUMÉRICOS PARA PROBLEMAS NO LINEALES

Carlos E. Neuman

Departamento de Matemáticas (FIQ)
Univ. Nacional del Litoral, Sgo. del Estero 2829, 3000 Santa Fe, Argentina
E-mail: ceneuman@fiqus.unl.edu.ar

y

Alicia G. Vilchez

Gabinete de Informática (FIQ)
Univ. Nacional del Litoral, Sgo. del Estero 2829, 3000 Santa Fe, Argentina
E-mail: alguvi@unl.edu.ar

Trabajo realizado con el apoyo del proyecto CAID 12/H168 de la UNL, Santa Fe

ABSTRACT

Adaptive techniques related to quasilinearization and error analysis and applied to nonlinear equations are studied in this paper. The main objective is to develop a methodology oriented to the graphic and stereoscopic based assessment of algorithms for nonlinear two point boundary value problems and related problems. Several *a posteriori* error estimation techniques are immersed in the stereoscopic device toolbox (simultaneous analysis of pE and pE'). The observed stereoscopic structures are able to deal with the adaptive processing. The methods are gauged and the error estimators compared against true errors.

RESUMEN

En este artículo se estudian técnicas adaptativas relacionadas con la cuasilinearización y el análisis del error aplicadas a ecuaciones no lineales. El principal objetivo es desarrollar una metodología orientada al ensayo gráfico y estereoscópico de algoritmos para problemas de borde de dos puntos y problemas relacionados. Se sumergen varias técnicas de estimación del error a posteriori en la caja de herramientas del dispositivo estereoscópico (análisis simultáneo de pE y pE'). Las estructuras estereoscópicas observadas son útiles para diseñar el procesamiento adaptativo. Los métodos se calibran y los estimadores se comparan con errores de referencia.

INTRODUCCIÓN

Los modelos que requieren una representación mediante ecuaciones no lineales presentan dificultades tanto para el modelado como para la obtención de soluciones exactas o aproximadas. Es por eso que las técnicas de adaptación asociadas al análisis de errores y a la cuasilinearización adquieren gran interés dado que permiten garantizar, bajo hipótesis específicas para cada modelo, la calidad de las soluciones aproximadas y uniformar los errores de aproximación. En este trabajo se presenta una metodología para la construcción y evaluación de algoritmos para problemas no lineales, entre los que se toman como ejemplo la resolución aproximada de problemas no lineales de dos puntos y el modelado de una versión simplificada de un reactor catalítico, y

para el análisis y evaluación del error de los mismos utilizando un dispositivo auxiliar basado en la representación de los errores en un ambiente estereoscópico. Se estudian métodos para obtener soluciones aproximadas para estos problemas. Se desarrollan métodos de cuasilinearización que permiten convertir los problemas no lineales en sucesiones monótonas de problemas lineales, marco en el cual se desarrolla el esquema de adaptación de mallas. Se complementan dichos métodos con diversas técnicas de estimación de errores *a posteriori* utilizando para ello una caja de herramientas diseñada para analizar estereoscópicamente objetos en 3D con el fin de analizar en forma simultánea pE y pE' , de modo de obtener representaciones 3D comparables en el espacio tridimensional. En base a esta información visual se desarrollan algoritmos adaptativos hasta lograr el nivel de aproximación y la uniformidad deseadas, se calibra la calidad de los métodos desarrollados y se evalúan los estimadores de error propuestos. Las estructuras que se observan en las representaciones estereoscópicas son de relativamente simple observación visual pero difíciles de reducir a un proceso algorítmico automatizado. Sin embargo en este trabajo se avanza en la dirección de un procesamiento independiente de la supervisión del operador.

Diversos procesos de la Ingeniería Química admiten modelos del tipo de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales y algebraicas o requieren la solución de este tipo de ecuaciones para su diseño y optimización. En [7, 8] se presentan algunos de estos problemas y en las referencias de estos artículos se citan trabajos que amplían el panorama de las aplicaciones. En [2], [9], [13], y, especialmente, en [11] se hallarán numerosos ejemplos para la aplicación de los métodos desarrollados en este trabajo.

Cuando se trata de modelos que requieren el planteo mediante ecuaciones no lineales se presentan dificultades para el modelado y para la obtención de soluciones exactas o aproximadas. Por ello las técnicas de adaptación asociadas al análisis de errores y a la cuasilinearización tienen gran interés puesto que permiten garantizar, bajo hipótesis específicas para cada modelo, la calidad de las soluciones aproximadas y uniformar los errores de aproximación.

Las técnicas estudiadas en este trabajo se aplican a problemas de suma importancia como la ecuación de Riccati

$$u' + u^2 + a_1(x)u + a_2(x) = 0 \quad (1)$$

que lo es por sí misma y por su conexión con la ecuación de segundo orden

$$w'' + a_1(x)w' + a_2(x)w = 0 \quad (2)$$

Se estudian, asimismo, problemas del tipo

$$u'' = f(u), \quad u(0) = 0, \quad u(b) = 0 \quad (3)$$

y sus generalizaciones, también aquí, mediante la técnica que se denomina cuasilinearización (ver [4]), es posible convertir el problema no lineal en una sucesión monótona de problemas lineales, marco en el cual se desarrolla el esquema de adaptación de mallas. Estos problemas provienen de otros más generales del tipo de la ecuación de Poisson y ecuaciones no lineales como

$$\Delta u = f(u) \quad (4)$$

con condiciones de frontera adaptadas al modelo en cuestión.

Los problemas geométricos son fáciles de visualizar, pero pueden ser complicados de resolver. Muchos problemas que podrían ser resueltos instantáneamente por una persona mirando una pieza de papel (por ejemplo si un punto está en el interior de un polígono) requieren programas de computadora no triviales. Para problemas más complicados, como en la mayoría de las aplicaciones, el método de solución apropiado para su implementación en la computadora puede ser bastante diferente del método de solución apropiado para una persona.

PROBLEMAS DE DOS PUNTOS

En esta sección se estudia una formulación general del problema clásico de dos puntos

$$u'' = f(x, u, u'), \quad 0 < x < 1, \quad a_0 u(0) - a_1 u'(0) = \gamma_1, \quad b_0 u(1) + b_1 u'(1) = \gamma_2 \quad (5)$$

que, bajo condiciones generales, es posible llevar a la forma homogénea mediante un cambio de variables.

Se supondrá que la función f es suave lo cual es una hipótesis muy poco restrictiva para las aplicaciones a procesos. En la parte II del capítulo 12 del texto de Hartman (1973) se demuestra que, bajo condiciones de regularidad de la función f (menos restrictivas que las del presente trabajo) hay existencia y unicidad de solución del problema de borde de dos puntos no lineal. Asimismo se remite al lector al texto de Bellman (1967).

Ejemplo: En la etapa de calibración se estudia el siguiente problema test

$$u'' = e^u, \quad 0 < x < 1, \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 0 \quad (6)$$

del que existe su solución analítica (omitida por razones de espacio)

Se construye toda una familia de ejemplos que provienen de las ecuaciones de Jacobi. En este trabajo también se aplicaron los métodos al caso del siguiente problema test

$$u'' = \frac{-2}{x} u u', \quad 0 < x < 1, \quad 2u(0) - u'(0) = -1, \quad 2u(1) + 4u'(1) = 2 \quad (7)$$

cuya solución analítica también es conocida (y omitida en este trabajo).

EL MÉTODO DE BELLMAN Y KALABA

Dado el problema

$$u'' = f(x, u, u'), \quad 0 < x < 1, \quad a_0 u(0) - a_1 u'(0) = \gamma_1, \quad b_0 u(1) + b_1 u'(1) = \gamma_2 \quad (8)$$

se desea hallar una solución aproximada. En el caso que la función f contiene no linealidades, los distintos métodos de discretización llevan a la necesidad de resolver sistemas no lineales de ecuaciones lo que encierra un sinnúmero de dificultades técnicas. El método de Bellman-Kalaba (ver [4],[3]) se basa en linealizar el problema en el entorno de una solución aproximada e iterar el proceso hasta alcanzar un nivel satisfactorio de ajuste. A partir del problema precedente se propone

$$u_n'' = f(x, u_{n-1}, u_{n-1}') + (u_n - u_{n-1}) f_u(x, u_{n-1}, u_{n-1}') + (u_n' - u_{n-1}') f_{u'}(x, u_{n-1}, u_{n-1}'), \quad 0 < x < 1 \quad (9)$$

con las condiciones de frontera

$$a_0 u_n(0) - a_1 u_n'(0) = \gamma_1, \quad b_0 u_n(1) + b_1 u_n'(1) = \gamma_2 \quad (10)$$

que, para cada n , si se suponen conocidas las funciones u_{n-1} y u_{n-1}' , se trata de un problema lineal que se ataca mediante el método de elementos finitos, colocación, diferencias finitas u otro método adecuado, como se describe a continuación.

En este método de quasilinealización también es posible linealizar las condiciones de frontera en el caso que el problema presente condiciones no lineales. En este trabajo, orientado en su aplicabilidad a problemas de control en general las condiciones pueden suponerse lineales sin demasiada pérdida de generalidad. Un poco más adelante en este trabajo se muestra cómo se realiza en el caso de la ecuación de Euler.

En el caso del ejemplo precedente, cuando se aplica la cuasilinearización resulta la sucesión $\{u_n\}$ de soluciones aproximadas, donde $u_0 = 0$ y la u_{n+1} satisface

$$u''_{n+1} = e^{u_n}(1 + u_{n+1} - u_n) \quad (11)$$

con las condiciones de borde homogéneas de la ecuación original aplicadas a todas estas ecuaciones lineales.

Una aplicación del presente método en vista a la cual se desarrolla este trabajo es el caso de la optimización de un funcional de la forma

$$J(u) = \int_0^b g(t, u, u') dt \quad (12)$$

con la condición $u(0) = c$. La correspondiente ecuación de Euler resulta

$$\frac{\partial g}{\partial u} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial g}{\partial u'} \right) = 0 \quad (13)$$

con la condición final $\frac{\partial g}{\partial u'}|_{t=b} = 0$. Omitimos la forma cuasilinear de la ecuación de Euler. Debe partirse de una elección de la función inicial u_0 y, en pocos pasos se obtiene una aproximación de la extremal del problema de optimización.

DIFERENCIAS FINITAS, ELEMENTOS FINITOS Y COLOCACIÓN

Se utiliza [1] para la formulación de los métodos en diferencias y colocación y [14], [6], y [15] para la de los métodos de elementos finitos para problemas lineales y no lineales.

Por ejemplo, dada una partición elemental $x_0 = 0 < x_1 < \dots < x_N < x_{N+1} = 1$ para el problema (6) cuasilinearizado, el sistema de ecuaciones resulta

$$\frac{1}{h_i \frac{h_i + h_{i+1}}{2}} u_{i-1}^{(n)} - \frac{2}{h_i h_{i+1}} u_i^{(n)} + \frac{1}{h_{i+1} \frac{h_i + h_{i+1}}{2}} u_{i+1}^{(n)} = e^{u_i^{(n-1)}} (1 + u_i^{(n)} - u_i^{(n-1)}), \quad 1 \leq i \leq N, \quad (14)$$

$$u_0^{(n)} = 0, \quad u_{N+1}^{(n)} = 0 \quad (15)$$

Una formulación análoga permite obtener soluciones aproximadas por los otros métodos. Los mismos conducen a resultados similares.

La formulación mediante el MEF se basa en establecer la forma débil del problema. Desarrollando las ecuaciones de esta formulación por elemento e integrando por partes en cada elemento se pueden relacionar los errores locales con los residuos locales de la ecuación.

ESTIMACIONES DEL ERROR

Para la construcción de métodos de estimación del error se remite al lector a [5]. El problema planteado en forma de operador

$$Lu = f \quad (16)$$

puede aproximarse mediante los problemas discretos

$$L_i u_{h_i} = f_i, \quad i = 1, 2 \quad (17)$$

donde, en general, $h_1 > h_2$, y en aplicaciones prácticas $h_1 = 2h_2$, h_i es la norma de la partición correspondiente a la malla M_{h_i} , $i = 1, 2$. La solución de malla mezcla $u_{h_1, h_2, \alpha}$ se obtiene de

$$((1 - \alpha)L_{1 \rightarrow 2} + \alpha L_2)u_{h_1, h_2, \alpha} = ((1 - \alpha)f_{1 \rightarrow 2} + \alpha f_2) \quad (18)$$

que, en el caso $\alpha = \frac{1}{2}$ resulta

$$(L_{1 \rightarrow 2} + L_2)u_{h_1 h_2} = (f_{1 \rightarrow 2} + f_2) \quad (19)$$

Se calculan los residuos

$$r_i = L_i u_{h_1 h_2} - f_i, \quad i = 1, 2 \quad (20)$$

con la solución $u_{h_1 h_2}$ adaptada a las mallas involucradas, estos se utilizan para estimar los errores de aproximación y comparar con los estimadores obtenidos en la siguiente sección.

En este trabajo se representan las diferencias $u_{h_2} - u_{h_1 h_2}$ y $u'_{h_2} - u'_{h_1 h_2}$ (que se pueden obtener a partir de los residuos) como estimadores cualitativos de los correspondientes errores $u - u_{h_2}$ y $u' - u'_{h_2}$.

MÉTODO DE ZADUNAIISKY

Dado el problema

$$u'' = f(x, u), \quad u(0) = u_0, \quad u(b) = u_1 \quad (21)$$

se plantea el pseudoproblema

$$z'' = f(x, z) + P'' - f(x, P), \quad (22)$$

$$z(0) = u_0, \quad z(b) = u_1 \quad (23)$$

donde P es un polinomio que se obtiene de integrar dos veces el polinomio interpolante Q a los valores aproximados del segundo miembro de la ecuación (21) evaluado en la solución aproximada. En la práctica (ver [16]) se integra una ecuación auxiliar para el error $w = z - u$ de la forma

$$w'' = \frac{\partial f}{\partial u}(x, z)w + P'' - f(x, P), \quad (24)$$

$$w(0) = 0, \quad w(b) = 0 \quad (25)$$

en forma análoga se obtiene w' .

ANÁLISIS ESTEREOSCÓPICO

En [12] se desarrolla una caja de herramientas diseñada para el análisis de datos en múltiples dimensiones y en especial mediante imágenes estereoscópicas en 3D.

En los gráficos se representa $pE = -\log |error|$ y $pE' = -\log |\partial_x(error)|$ versus x de modo de obtener representaciones 3D comparables en el espacio tridimensional. El error representado puede ser el error exacto, la estimación del error, residuos locales y errores estimados por el método de Zadunaisky.

En la Fig. 1 se comparan los resultados con las versiones superconvergentes correspondientes al paso constante (y más pequeño). En la Fig. 2 se representan los errores exactos y los estimadores de doble malla con el agregado de algunas de sus proyecciones con el fin de hacer más claro el análisis de los resultados. Se representan en verde los errores exactos y en azul los estimadores de doble malla. Se observa un comportamiento cualitativo análogo lo que permite utilizar unos u otros como parámetros de calidad relativa de las aproximaciones.

En la Fig. 3 se representan los errores exactos y los estimadores de error por el método de Zadunaisky. Puede observarse que el comportamiento cualitativo de los errores es similar.

En la Fig. 4 se representan los errores exactos para varias aproximaciones luego de aplicar el proceso de refinamiento de mallas tendiente a uniformar el error de aproximación. En color verde se representan los errores correspondientes a una malla inicial. Se efectúa una corrección de prueba de la malla cuyos errores se representan en azul. Observado el efecto de la corrección se efectúa un refinamiento de la malla anterior que se representa en negro. Aquí es posible

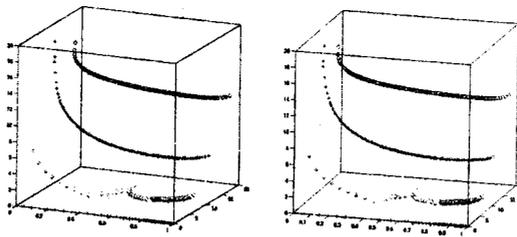


Figura 1: pE y pE' vs x , comparación de los casos de malla regular e irregular donde se observa el efecto de superconvergencia asociado a la primera

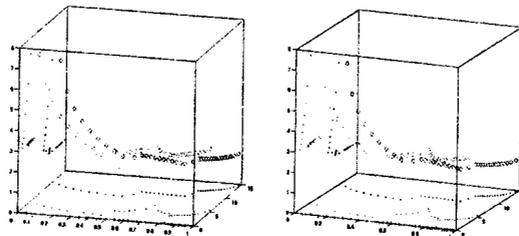


Figura 2: pE y pE' vs x , se representan los errores exactos y los estimadores de doble malla con el agregado de algunas de sus proyecciones

observar que hay comportamientos diferenciales en las distintas zonas de elementos. Se refina en la secciones izquierda y media y se logra mejorar en una de ellas el error (representado en cyan) por lo que se refina nuevamente para lograr uniformar el error en la parte media, lo que se representa en color magenta. Cabe destacar que al ajustar el error en la solución se logra una gran aproximación en la derivada de la solución en los extremos del dominio de integración. En la presente ilustración se ha omitido, con el fin de lograr sencillez en el ejemplo, el proceso de adaptación al pasar de cada una de las soluciones aproximadas a la siguiente.

Algoritmo adaptativo

El proceso por el cual se adapta la malla ha sido explicado en el ejemplo precedente (ver Fig. 4). Se efectúan modificaciones locales de las mallas haciéndolas más gruesas o más finas en las distintas secciones del dominio (basándose en la observación visual, la que puede complementarse con el estudio detallado de los residuos) y en función de los resultados se refina o no cada sección de la malla hasta lograr el nivel de aproximación y la uniformidad deseadas.

Adoptada una solución aproximada (nivel k) se la asigna a la condición actual y se ataca el problema de aproximar la siguiente solución numérica (nivel $k + 1$) en este proceso nuevamente se está en condiciones de refinar selectivamente la malla de elementos con el fin de uniformar los errores en el nuevo nivel de aproximación

La caja de herramientas para procesamiento de pares estereoscópicos

Se utiliza para la implementación del algoritmo precedente una caja de herramientas (programada en Matlab, pero que admite su traducción automática a un ambiente analítico y gráfico basado en C++) que permite la representación de los pares estereoscópicos en el formato representado en este trabajo y también para su observación *on-line* en la pantalla del procesador

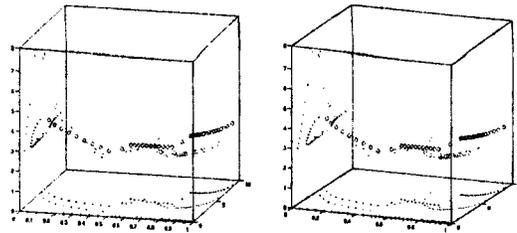


Figura 3: pE y pE' vs x , se representan los errores exactos y los estimadores de error por el método de Zadunaisky.

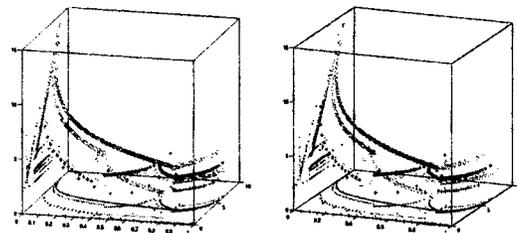


Figura 4: pE y pE' vs x , se representan los errores exactos: verde: malla inicial, azul: malla gruesa de prueba, negro: refinamiento de la malla anterior, cyan: refinamiento adaptativo de la malla previa, magenta: refinamiento adaptativo de la malla cyan.

utilizando anteojos con filtros especiales que dejan pasar selectivamente los colores con los que se desarrollan los gráficos. La caja de herramientas también está diseñada para facilitar la manipulación de las imágenes en el espacio 3D.

Posibilidad de procesamiento automatizado

De los métodos descritos se deduce la dificultad que se presenta para el procesamiento automatizado del conjunto de rutinas del algoritmo adaptativo propuesto. Una de las principales características del mismo es su carácter holístico que admite una posibilidad de realización cuando se procesa en forma interactiva y, en función de un conjunto de observaciones, pues en este caso el operador experto toma decisiones (en el contexto de lo que se denominan matemáticas experimentales) que permiten manipular en forma positiva grandes conjuntos de información concurrente y modificar la estructura de las aproximaciones para lograr el objetivo deseado. La posibilidad de automatizar estos procedimientos se basa en la capacidad para analizar el conjunto de resultados y extraer patrones de comportamiento (en este caso de los errores de aproximación) para lograr alcanzar la meta deseada (por ejemplo hacer que los niveles de error sean uniformes, o no superen una cierta cota).

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado una metodología para la construcción y evaluación de algoritmos de resolución aproximada de problemas de dos puntos no lineales y para el análisis y evaluación del error de los mismos. Se utiliza un dispositivo auxiliar basado en la representación de los errores en un ambiente estereoscópico provisto por un toolbox gráfico basado en Matlab lo que

facilita la evaluación por parte del operador y la toma de decisiones de optimización del substrato geométrico del algoritmo de solución numérica de este tipo de problemas. Las estructuras que se observan en las representaciones estereoscópicas son de relativamente simple observación visual pero difíciles de reducir a un proceso algorítmico automatizado. Sin embargo en el presente trabajo se han dado pasos en la dirección de un procesamiento independiente de la supervisión del operador.

REFERENCIAS

- [1] Ascher, U.M., Mattheij, R.M.M., y Russell, R.D., *Numerical Solution of Boundary Value Problems of Ordinary Differential Equations*, SIAM (1995) Philadelphia.
- [2] Bellman, R. *Introduction to the Mathematical Theory of Control Processes. Vol I: Linear Equations and Quadratic Criteria (1967). Vol II: Nonlinear Processes (1971)*, Academic Press (1967) New York.
- [3] Bellman, R. *Methods of Nonlinear analysis. Vol I (1970). Vol II (1973)*, Academic Press (1970) New York.
- [4] Bellman, R. y Kalaba, R.E., *Quasilinearization and Nonlinear Boundary-Value Problems*, Elsevier (1965) New York
- [5] Bergallo, M.B., Neuman, C.E., y Sonzogni, V.E., Composite mesh concept based FEM error estimation and solution improvement, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **188** (2000) 755-774.
- [6] Carey, G.F. y Oden, J.T. *Finite Elements: A Second Course*, Prentice-Hall (1983) E. Cliffs, NJ
- [7] Costanza, V. y Neuman, C.E., An Adaptive Control Strategy for Nonlinear Processes, *Chemical Engineering Science* **50**(13) (1995) 2041-2053.
- [8] Costanza, V. y Neuman, C.E., Flexible operation through optimal tracking in nonlinear processes, *Chemical Engineering Science* **55** (2000) 3113-3122.
- [9] Fleming, W.H. y Rishel, R.W., *Deterministic and Stochastic Optimal Control*, Springer-Verlag, 1975, New York.
- [10] Hartman, P., *Ordinary Differential Equations*, J.Hopkins (1973) Baltimore
- [11] Kalman, R., Falb, P., y Arbib, M., *Topics in Mathematical System Theory*, McGraw-Hill (1969) New York.
- [12] Neuman, C.E. y Vilchez, A.G., *Algoritmos geométricos y gráficos en 3D. Laboratorios de Matemática. 3ª edición, corregida y aumentada*, eCAM, LN 1 (2001) Santa Fe (en prensa).
- [13] Sontag, E. D., *Mathematical Control Theory*, Springer-Verlag (1990) New York.
- [14] Strang, G., y Fix, G.J., *An Analysis of the Finite Element Method*, Prentice-Hall (1973) Englewood Cliffs, NJ.
- [15] White, R.E., *An Introduction to the Finite Element Method with Applications to Nonlinear Problems*, Wiley (1985) New York.
- [16] Zadunaisky, P.E., On the Estimation of Errors Propagated in the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations, *Numerische Mathematik*, **27** (1976) 21-39.