Esquemas Iterativos para Métodos Runge-Kutta tipo Gauss *

S. González-Pinto, C. González-Concepción, J. I. Montijano, S. Pérez Rodríguez.

Resumen

En este artículo consideramos una clase de esquemas iterativos para métodos Runge-Kutta implícitos, estudiando la convergencia de dichos esquemas sobre una familia de problemas stiff no lineales. Se propone además un esquema convergente particular para el método Gauss de dos etapas, analizando su orden y su estabilidad lineal. Al final se incluyen diversos experimentos numéricos para demostrar la eficiencia de este método.

Abstract

In this paper, we consider a class of iterative schemes for implicit Runge-Kutta methods and we study the convergence of these schemes for a family of nonlinear stiff problems. A particular convergent scheme for the two stage Gauss method is proposed and the order and linear stability properties are analyzed. Finally, some numerical experiments are included in order to show the efficiency of the method.

AMS Clasification: 65L05, 65L06, 65L07.

1. Introducción.

Consideremos los problemas de valor inicial para sistemas stiff de $m \geq 1$ ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(t, y(t)), \\ y(t_0) &= y_0, \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde la función f se supone tan regular como sea necesario. Un método Runge-Kutta de s etapas da una aproximación y_{n+1} a la solución $y(t_{n+1})$ en el punto $t_{n+1} = t_n + h$ de la forma:

*Una versión más ampliada de este artículo se encuentra publicada en *Computers Math. Applic. Vol. 27, No. 7 pp. 67-81 (1994)*

$$
\begin{aligned}
Y_i = & \quad y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_n + c_j h, Y_j), \quad i = 1, ..., s, \\
y_{n+1} = & \quad y_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i f(t_n + c_i h, Y_i).
\end{aligned}
$$

Definiendo la matriz de orden $s \times s$ $A = (a_{ij})$ y los vectores columna $b = (b_1, ..., b_s)^T, Y = (Y_1, ..., Y_s)^T \in I\!R^{sm}$ y $F(Y) = (f(t_n+c_1h, Y_1), ..., f(t_n+c_sh, Y_s))^T \in I\!R^{sm}$, las ecuaciones anteriores pueden escribirse de la siguiente forma, usando el producto de Kronecker de matrices $A \otimes B = (a_{ij}B)$:

$$
Y = e \otimes y_n + h(A \otimes I)F(Y), \tag{1.2}
$$

$$
y_{n+1} = y_n + h(b^T \otimes I)F(Y), \tag{1.3}
$$

donde $e = (1, ..., 1)^T \in I\!R^s$. En la práctica, en lugar de (1.3) utilizaremos la forma equivalente, siempre que A sea regular:

$$
y_{n+1} = (1 - b^T A^{-1} e)y_n + (b^T A^{-1} \otimes I)Y, \tag{1.4}
$$

que teóricamente nos da la misma aproximación numérica. Sin embargo, si las ecuaciones implícitas (1.2) son resueltas por un esquema iterativo, Y se aproximará por un vector $Y^k \neq Y$ y entonces (1.3) y (1.4) darán soluciones numéricas diferentes. Esto hace que las propiedades de estabilidad de las correspondientes soluciones no sean las mismas, y, como veremos en la sección 4, será siempre mejor la solución dada por (1.4).

Algunos métodos Runge-Kutta, como los Gauss, son especialmente adecuados para resolver sistemas stiff, dado su alto orden de convergencia y sus buenas propiedades de estabilidad. Por otra parte, su coste computacional es relativamente alto, ya que son completamente implícitos y requieren la solución de un sistema de $ms \times ms$ ecuaciones en cada paso. Esto puede hacerse usando un método de Newton modificado, pero aun así, en cada iteración hay que resolver ms ecuaciones lineales con una matriz de coeficientes que depende del jacobiano de f, $J = \partial f/\partial y$.

Para reducir este coste se han propuesto varios algoritmos en [1]$-$[6] y [8], especialmente para los métodos Gauss. Peter y Thomas [10], después de muchos experimentos numéricos, concluyen que los métodos propuestos por Cooper y Butcher [5] son, en general, los más eficientes para la integración de problemas stiff mediante el Runge-Kutta Gauss de dos etapas. Estos métodos consisten en resolver (1.2) mediante esquemas iterativos de la forma:

$$
\begin{array}{rcl}
[I - h\gamma(I \otimes J)]E^k & = & (BS^{-1} \otimes I)D^{k-1} + (L \otimes I)E^k, \;\; k = 1, 2, ..., \\
Y^k & = & Y^{k-1} + (S \otimes I)E^k,
\end{array} \tag{1.5}
$$

donde J es una aproximación a la matriz jacobiana, Y^j y D^j son vectores de dimensión sm dados por

$$
\begin{array}{l}
Y^j = (Y_1^j, ..., Y_s^j), \\
D^j = e \otimes y_n - Y^j + h(A \otimes I)F(Y^j),
\end{array} \tag{1.6}
$$

B y S son matrices reales no singulares de orden $s \times s$, L es una matriz del mismo orden estrictamente triangular inferior y γ es una constante real positiva. Nótese que si el esquema iterativo (1.5) converge, su límite necesariamente es la solución de (1.2). También hay que observar que dicho esquema (1.5) se puede entender como un caso particular de los métodos iterativos semi-implícitos siguientes:

$$\begin{aligned} (Q \otimes I)Y^k - h(T \otimes I)F(Y^k) &= (e \otimes y_n) - ((I-Q) \otimes I)Y^{k-1} \\ &+ h((A-T) \otimes I)F(Y^{k-1}), \\ & k = 1, 2, ..., \end{aligned} \tag{1.7}$$

con $Q = SB^{-1}(I-L)S^{-1}$ y $T = \gamma SB^{-1}S^{-1}$. Si para cada iteración k la solución Y^k se calcula mediante un método de Newton modificado partiendo de Y^{k-1} como aproximación inicial, iterando sólo una vez y aplicando las ideas de [3], obtenemos precisamente la ecuación (1.5). En el caso de problemas lineales de coeficientes constantes, las ecuaciones (1.7) y (1.5) son equivalentes.

Si el anterior algoritmo lo aplicamos al problema test estándar

$$y' = qy, \quad q \in \mathbb{C},$$

obtenemos

$$Y - Y^k = M(z)(Y - Y^{k-1}), \quad z = qh,$$

donde la matriz $M(z)$ viene dada por

$$M(z) = I - S[(1 - z\gamma)I - L]^{-1}BS^{-1}(I - zA). \tag{1.8}$$

Cooper y Butcher [5] proponen elegir B, S, L y γ de tal forma que el radio espectral de $M(z)$ sea mínimo para $Rez \leq 0$. Así obtienen valores adecuados de estos parámetros para los métodos de Gauss de 2, 3 y 4 etapas. En particular, para el de dos etapas proponen

$$B = \begin{pmatrix} w & cw \\ -w(1+w) & w(1-cw) \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2w & 0 \end{pmatrix}, \quad S = I, \tag{1.9}$$

donde $c = 7 - 4\sqrt{3}$, $w = 2/(\sqrt{6} - \sqrt{2} + 1)$ y $\gamma = \sqrt{3}/6$.

Estos métodos iterativos son convergentes para problemas lineales de coeficientes constantes, y los experimentos numéricos demuestran que son muy eficientes en problemas no lineales en general, aunque desde el punto de vista teórico, no se ha demostrado la convergencia de los métodos sobre tales problemas.

En este artículo, consideramos esquemas iterativos de la forma:

$$Y^k = e \otimes y_n + h(T \otimes I)F(Y^k) + h((A-T) \otimes I)F(Y^{k-1}), \ k = 1, 2, ..., \tag{1.10}$$

$$y_{n+1}^k = (1 - b^T A^{-1} e)y_n + (b^T A^{-1} \otimes I)Y^k, \tag{1.11}$$

donde $T = \gamma I + P$, $\gamma > 0$, y P una matriz estrictamente triangular inferior. Estudiamos condiciones sobre T para que la iteración converja para la clase de ecuaciones diferenciales no lineales $y' = f(t, y)$ tal que

$$\langle f(t, \tilde{y}) - f(t, y), \tilde{y} - y \rangle \leq 0, \ \forall t \in \mathbb{R}, \ \forall \tilde{y}, \ y \in \mathbb{R}^m, \tag{1.12}$$

para algún producto interior $\langle .,. \rangle$ en $I\!R^m$ (llamados *problemas disipativos*). Proponemos un valor particular de T para el Gauss de dos etapas, que es, en cierto sentido, óptimo y estudiamos su orden y sus propiedades de estabilidad. Finalmente, demostramos su eficiencia por medio de varios experimentos numéricos.

Hay que notar que las ecuaciones (1.10) son un caso particular de (1.7) y si las resolvemos por un método de Newton modificado como el anterior, obtenemos las ecuaciones

$$\begin{aligned} [I-h(T\otimes J)]E^k &= e\otimes y_n - Y^{k-1} + h(A\otimes I)F(Y^{k-1}),\ \ k=1,2,..., \\ Y^k &= Y^{k-1}+E^k \end{aligned} \tag{1.13}$$

lo que es un caso particular de (1.5) con $S=I,\ L=T^{-1}P$ y $B=I-L$.

2. Estudio de la Convergencia.

Consideremos un método Runge-Kutta implícito (1.2) (1.3) aplicado a un problema disipativo (1.1), o sea, satisfaciendo (1.12), y supongamos que resolvemos el sistema implícito (1.2) mediante el método iterativo

$$Y^k = e\otimes y_n + h(T\otimes I)F(Y^k) + h((A-T)\otimes I)F(Y^{k-1}),\ \ k=1,2,..., \tag{2.1}$$

Queremos encontrar condiciones sobre la matriz T que aseguren la convergencia de (2.1),ya que es evidente que si este esquema converge, lo hará a la solución de (1.2).

La ecuación (1.2) puede reescribirse de la forma:

$$Y = e\otimes y_n + h(T\otimes I)F(Y) + h((A-T)\otimes I)F(Y). \tag{2.2}$$

Denotando $V^k = Y - Y^k$, $W^k = h(F(Y)-F(Y^k))$ y restando (2.1) de (2.2), obtenemos

$$V^k = ((A-T)\otimes I)W^{k-1} + (T\otimes I)W^k, \tag{2.3}$$

lo que implica

$$W^k = (R\otimes I)W^{k-1} + (T^{-1}\otimes I)V^k,$$

donde $R=T^{-1}(T-A)=I-T^{-1}A$.

Definimos el producto interior de vectores asociado al $\langle .,. \rangle$ como:

$$[V,W] = \sum_{i=1}^{s}\langle V_i, W_i\rangle,$$

si $V=(V_1,...,V_s)^T,\ \ W=(W_1,...,W_s)^T\ \in I\!R^{sm}$.

Sea $D=$diag$(d_1,...,d_s)$ una matriz diagonal definida positiva arbitraria. Multiplicando (2.3) por $D\otimes I$ se tiene

$$[W^k,(D\otimes I)V^k] = [W^k,(D(A-T)\otimes I)W^{k-1}] + [W^k,(DT\otimes I)W^k],$$

Como D es definida positiva, de (1.12) tenemos

$$[W^k,(D\otimes I)V^k] = \sum_{i=1}^{s} d_i h\langle f(t_n+c_ih,Y_i) - f(t_n+c_ih,Y_i^k), Y_i - Y_i^k\rangle \le 0,$$

por tanto

$$[W^k,(DT\otimes I)W^k]\leq [W^k,(D(T-A)\otimes I)W^{k-1}]$$

o bien,

$$[W^k,(M\otimes I)W^k]\leq 2[W^k,(D(T-A)\otimes I)W^{k-1}] \tag{2.4}$$

donde $M=DT+T^TD$.

Teorema 2.1 *Si existe una matriz diagonal definida positiva D que verifica*
(i) $M=DT+T^TD=N^TN$ es definida positiva,
(ii) $\| N^{-T}D(T-A)N^{-1}\|_2< 1/2$,
el esquema iterativo (2.1) es convergente.

Demostración:
Denotando $Z^k=(N\otimes I)W^k$, $\| \; . \; \|$ la norma asociada al producto interior definido, y usando (2.4) tenemos

$$\begin{aligned}\| Z^k\|^2=[Z^k,Z^k] &= [W^k,(M\otimes I)W^k]\\ &\leq 2[Z^k,(N^{-T}D(T-A)N^{-1}\otimes I)Z^{k-1}]\\ &\leq 2\| Z^k\| \, \| Z^{k-1}\| \, \| N^{-T}D(T-A)N^{-1}\|_2\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que

$$\lim_{k\to\infty} Z^k=0 \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} W^k=0 \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} V^k=0,$$

el resultado se obtiene de forma inmediata.□

Ahora vamos a estudiar la convergencia de los esquemas (2.1) aplicado al método Runge-Kutta Gauss de dos etapas, que tiene una tabla de Butcher

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

Para este método, tenemos que determinar unos parámetros $\alpha>0$, $\beta\in I\!R$ y $\lambda>0$ de tal forma que las matrices

$$T=\begin{pmatrix}\alpha & 0\\ \beta & \alpha\end{pmatrix}, \quad D=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & \lambda^2\end{pmatrix},$$

satisfagan las condiciones (i) y (ii) del teorema 2.1. En primer lugar, tomando $r=\beta/(2\alpha)$, si $\lambda^2r^2<1$, la matriz

$$M=2\alpha\begin{pmatrix}1 & \lambda^2 r\\ \lambda^2 r & \lambda^2\end{pmatrix},$$

es definida positiva y tiene una factorización de Cholesky de la forma

$$M = N^T N, \quad N = \sqrt{2\alpha} \begin{pmatrix} 1 & \lambda^2 r \\ 0 & \lambda\sqrt{1-\lambda^2 r^2} \end{pmatrix}.$$

Entonces, las condiciones (i), (ii) se verificarán si $|\lambda r| < 1$ y

$$\| N^{-T} D(T-A) N^{-1} \|_2 < \frac{1}{2}.$$

No es difícil verificar la existencia de esquemas convergentes. Si tomamos, por ejemplo, T como la submatriz triangular inferior de A, o sea,

$$T = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 1/4+\sqrt{3}/6 & 1/4 \end{pmatrix}, \quad A - T = \begin{pmatrix} 0 & 1/4-\sqrt{3}/6 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

sale que

$$\| N^{-T} D(T-A) N^{-1} \|_2 = \frac{2(2\sqrt{3}-3)}{\lambda(12-(7+4\sqrt{3})\lambda^2)}$$

Se demuestra fácilmente que los $\lambda \in (0.1594015..., 0.8381797...)$ verifican las condiciones (i), (ii), con lo que la convergencia está asegurada. Además la norma anterior alcanza su valor mínimo $\sqrt{3}/4$ para $\lambda = 4 - 2\sqrt{3}$.

Por otro lado, también nos interesa encontrar valores de α, β de tal forma que el método (2.1) converja lo más rápido posible. Para un esquema particular una medida de su velocidad de convergencia es el valor

$$v = 2 \inf_{|\lambda r|<1} \| N^{-T} D(T-A) N^{-1} \|_2 \,.$$

Luego, elegiremos los α, β que hagan v lo más pequeño posible.

Después de muchos cálculos, hemos obtenido un mínimo para los valores $\alpha = \sqrt{3}/6$, $\beta = 2\alpha$ que dan las matrices

$$T = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/6 & 0 \\ \sqrt{3}/3 & \sqrt{3}/6 \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{2\alpha} \begin{pmatrix} 1 & \lambda^2 \\ 0 & \lambda\sqrt{1-\lambda^2} \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Para este esquema,

$$v = \frac{2-\sqrt{3}}{2\lambda}$$

con lo que las condiciones (i) y (ii) se satisfacen para $1-\sqrt{3}/2 < \lambda < 1$ y el esquema es convergente. Además, $v = 1 - \sqrt{3}/2 = 0.1339746...$ que se alcanza para $\lambda = 1$.

Mencionemos que Butcher [4], buscando convergencia óptima para el problema lineal escalar $y' = qy$, $q \in \mathbb{C}$, obtuvo precisamente este método. Este autor, además, demostró que el radio espectral de la matriz $M(z)$ dada por (1.8) verifica

$$\rho(M(z)) \leq 1 - \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad para\, Re z \leq 0,$$

$$\lim_{z\to 0} \rho(M(z)) = \lim_{z\to\infty} \rho(M(z)) = 0.$$

3. Análisis del Orden de Convergencia.

Consideremos el método (1.10), (1.11) aplicado al método Runge-Kutta Gauss de dos etapas. Supongamos que el esquema iterativo comienza con unas aproximaciones iniciales Y_i^0, $i = 1, 2$ de orden q a la solución, o sea

$$Y_i - Y_i^0 = \mathcal{O}(h^{q+1}), \quad i = 1, 2.$$

En esta sección probaremos que para cada k, la aproximación y_{n+1}^k tiene orden $p = \min\{k + q, 4\}$, o sea, si $v(t)$ es la solución local de la ecuación diferencial, que verifica $v(t_n) = y_n$, entonces

$$v(t_{n+1}) - y_{n+1}^k = \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Sea y_{n+1} la solución dada por el método de Gauss. Como $v(t_{n+1}) - y_{n+1} = \mathcal{O}(h^5)$ y $v(t_{n+1}) - y_{n+1}^k = v(t_{n+1}) - y_{n+1} + y_{n+1} - y_{n+1}^k$, es suficiente probar que

$$y_{n+1} - y_{n+1}^k = h\mathcal{O}(y_{n+1} - y_{n+1}^{k-1}), \;\; k \geq 1$$

o, de forma equivalente

$$V^k = Y - Y^k = h\mathcal{O}(V^{k-1}).$$

Si la función derivada f es Lipschitz y continua, entonces

$$F(Y) - F(Y^k) = S^k V^k,$$

donde

$$S^k = \begin{pmatrix} S_1^k & 0 \\ 0 & S_2^k \end{pmatrix}, \;\; S_i^k = \int_0^1 \frac{\partial f}{\partial y}(t_n + c_i h, \theta Y_i + (1-\theta) Y_i^k) d\theta, \;\; i = 1, 2,$$

y las matrices S^k están acotadas para todo k cuando $h \to 0$. Entonces, de (1.10) y (1.2),

$$V^k = hP^k V^{k-1},$$

donde $P^k(h) = (I - h(T \otimes I)S^k)^{-1}((A - T) \otimes I)S^{k-1}$ está acotada en un entorno de $h = 0$.

Este resultado nos da el orden de la aproximación y_{n+1}^k obtenida en (1.11). Para las aproximaciones obtenidas por (1.13) probaremos que el resultado anterior también es válido.

Teniendo en cuenta que la solución del Runge-Kutta satisface

$$\begin{aligned} [I - h(T \otimes J)]E &= -Y + e \otimes y_n + h(A \otimes I)F(Y) \equiv 0, \\ Y &= Y + E, \end{aligned}$$

definiendo de nuevo $V^k = Y - Y^k$ y procediendo como antes, llegamos a que

$$[I - h(T \otimes J)](V^k - V^{k-1}) = -V^{k-1} + h(A \otimes I)(F(Y) - F(Y^{k-1})).$$

Por tanto,

$$V^k = hP^{k-1}V^{k-1},$$

con $P^{k-1} = (I - h(T \otimes J))^{-1}(-(T \otimes J) + (A \otimes I)S^{k-1})$.

Notas:

1. Los resultados de orden aquí obtenidos pueden generalizarse fácilmente a estos esquemas aplicados a Runge-Kutta generales.

2. Este análisis puede repetirse para el método (1.5), (1.9) propuesto por Cooper y Butcher. Sin embargo, en este caso, las sucesivas aproximaciones y_{n+1}^k tienen siempre el mismo orden q que la aproximación inicial y_{n+1}^0.

4. Estabilidad Lineal.

En esta sección estudiamos la estabilidad lineal de las aproximaciones y_{n+1}^k dadas por (1.10), (1.11), para el Gauss de dos etapas.

Aplicando el método (1.10) al problema test $y' = qy$, $q \in \mathbb{C}$, llamando $z = qh$, obtenemos

$$Y^k = ey_n + z(A-T)Y^{k-1} + zTY^k$$

Teniendo en cuenta (1.2) es fácil demostrar que

$$Y - Y^k = M(z)(Y - Y^{k-1}) = M(z)^k(Y - Y^0)$$

donde

$$M(z) = z(I - zT)^{-1}(A - T). \tag{4.1}$$

Por otra parte, para el método Gauss de dos etapas se verifica que

$$b^T A^{-1} e = 0,$$

por tanto

$$y_{n+1} = y_n + b^T A^{-1} Y \tag{4.2}$$

$$y_{n+1}^k = y_n + b^T A^{-1} Y^k \tag{4.3}$$

Tomando, por sencillez, como valor inicial $Y^0 = ey_n$, denotando $R(z) = y_{n+1}/y_n$ la función de amplificación del Runge-Kutta, y $R_k(z) = y_{n+1}^k/y_n$ la función de amplificación correspondiente a la iteración k-ésima, obtenemos

$$R_k(z) = R(z) - zb^T A^{-1} M(z)^k A(I - zA)^{-1} e. \tag{4.4}$$

Recordando que $\alpha = \sqrt{3}/6$, $a_{12} = 1/4 - \alpha$ y que $\det(I - zT) = (1 - \alpha z)^2$, descomponemos la matriz $M(z)$ como

$$M(z) = \frac{z}{(1-\alpha z)^2} N(z)$$

donde

$$N(z) = (1-\alpha z)^2 (I - zT)^{-1}(A - T) = a_{12} \begin{pmatrix} 1-\alpha z & 1-\alpha z \\ 1+\alpha z & 1+\alpha z \end{pmatrix}.$$

Además, también en el caso del Gauss de dos etapas se tiene que

$$b^T A^{-1} = \sqrt{3}\,(-1, 1),$$

con lo que, teniendo en cuenta que $Ae = c$ y que

$$R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}e = b^T A^{-1}(I - zA + zI)(I - zA)^{-1}c$$

se llega a que:

$$R_k(z) = \sqrt{3}\left[\phi^T(z) - \frac{z^{k+1}}{(1-\alpha z)^{2k}}\omega_k^T\right](I - zA)^{-1}c \tag{4.5}$$

para $k = 1, 2, ...$, donde

$$\begin{array}{l} \phi^T(z) = (-1 - z(1+\alpha), 1 + z(1-\alpha)), \\ \omega_0^T = (-1, 1), \\ \omega_k^T = 2^k a_{12}^k \alpha z e^T, \;\; k \geq 1 \end{array} \tag{4.6}$$

Simplemente dibujando el módulo de estas funciones en el semiplano complejo negativo, se ve que $|R_1(z)| \leq 1$ y $|R_2(z)| \leq 1$, $\forall\, Re z \leq 0$. Por tanto, las correspondientes aproximaciones y_{n+1}^1, y_{n+1}^2 son A-estables. También es sencillo ver que para $k \geq 3$, el eje imaginario $z = iy$, $y \in I\!R$ no pertenece a la región de estabilidad, o sea, las aproximaciones y_{n+1}^k para $k \geq 3$ no son A-estables.

De todos modos, hemos computado los valores de θ para los cuales las aproximaciones son A(θ)-estables, para las iteraciones $k = 3, 4, ..., 8$, que son:

k	3	4	5	6	7	8
θ	89.7922°	89.96863°	89.99563°	89.99941°	89.99992°	89.999989°

De estos resultados concluimos que, aunque las iteraciones sucesivas no dan métodos A-estables, en la práctica son más que aceptables.

5. Experimentos Numéricos.

En esta sección presentamos algunos experimentos numéricos, en los que el algoritmo que nosotros proponemos se compara con el esquema de Cooper y Butcher. Aunque hemos evaluado los métodos con muchos problemas stiff, aquí, por brevedad, sólo presentamos los resultados obtenidos con uno de los problemas stiff más representativo, el *Oscilador de Van der Pol:*

Problema: [8, pag.157]

$$\begin{array}{l} y_1'(t) = y_2(t), \\ y_2'(t) = \lambda((1 - y_1^2(t))y_2(t) - y_1(t)), \\ y_1(0) = 2, \;\; y_2(0) = 0, \;\; t \in [0, 2], \\ \lambda = 10^6. \end{array}$$

Para comparar los métodos (1.5), (1.9) de Cooper y Butcher y el propuesto (1.13), (2.5), hemos usado un código de paso variable donde el error local se estima por extrapolación. En cada paso, se iteran los esquemas hasta que dos aproximaciones sucesivas se diferencien en menos de una tolerancia especificada, o sea, hasta que

$$\| Y_i^k - Y_i^{k-1} \| < 0.1\, Tol, \;\; i = 1, 2. \tag{5.1}$$

Las aproximaciones iniciales Y_i^0, $i = 1, 2$, se obtienen mediante interpolación de Lagrange en dos puntos $\{\tilde{Y}_1, \tilde{Y}_2\}$ del paso anterior. Por término medio, se hace una evaluación de la matriz jacobiana de f y una factorización LU en cada paso.

Para cada valor de la tolerancia Tol, hemos calculado el coste computacional en términos del número de pasos aceptados y rechazados (NPA y NPR), el número de sistemas lineales de orden 2×2 resueltos (NSL) y el número de descomposiciones LU necesarias para resolverlos (NLU). También hemos computado el máximo error global cometido en el punto final (MEG). Los resultados obtenidos se presentan en las siguientes tablas:

Método Propuesto:

TOL	NPA	NPR	NSL	NLU	MEG
10^{-3}	258	24	2826	277	$0.3175\,10^{-3}$
10^{-4}	378	21	4090	388	$0.1825\,10^{-3}$
10^{-5}	656	37	7044	675	$0.5912\,10^{-4}$
10^{-6}	928	27	10378	941	$0.1613\,10^{-4}$
10^{-7}	1602	20	18174	1612	$0.5492\,10^{-5}$
10^{-8}	2932	18	33296	2941	$0.1111\,10^{-5}$

Método Cooper & Butcher:

TOL	NPA	NPR	NSL	NLU	MEG
10^{-3}	256	22	2784	270	$0.2253\,10^{-3}$
10^{-4}	378	22	4112	388	$0.2001\,10^{-3}$
10^{-5}	648	36	7004	666	$0.5167\,10^{-4}$
10^{-6}	960	29	11322	974	$0.1439\,10^{-4}$
10^{-7}	1622	23	19478	1633	$0.5343\,10^{-5}$
10^{-8}	2928	17	36086	2936	$0.1078\,10^{-5}$

Referencias

[1] C. A. Addison, I. Gladwell, *Second derivative methods applied to implicit first and second order systems*, Int. J. Num. Meth. in Engng. **20**, 1211-1231 (1984).

[2] T. A. Bickart, *An efficient solution process for implicit Runge-Kutta methods*, SIAM J. Numer. Anal.**14**, 1022-1027 (1977).

[3] J. C. Butcher, *On the implementation of implicit Runge-Kutta methods*, BIT **16**, 237-240 (1976).

[4] J. C. Butcher, *Some implementation schemes for implicit Runge-Kutta methods*, Proceedings of the Dundee Conference on Numerical Analysis, 1979 Lecture Notes in Mathematics, N° 773 pp. 12-24 (1980).

[5] C. J. Cooper, J. C. Butcher, *An iteration scheme for implicit Runge-Kutta methods*, IMA Journal of Numerical Analysis **3**, 127-140 (1983).

[6] C. J. Cooper, R. Vignesvaran, *A scheme for the implementation of implicit Runge-Kutta methods*, Computing **45**, 321-332 (1990).

[7] K. Dekker, J. G. Verwer, *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*, Elsevier Science Publisher B. V., Netherlands (1984).

[8] E. Hairer, G. Wanner, *Solving ordinary differential equations II (Second edition)*, Springer-Verlag, Berlin (1991).

[9] S. P. Norsett, *Semi-explicit Runge-Kutta methods*, Report Mathematics and Computation N° 6/74, Dept. of Mathematics, Univ. of Trondheim. 75, 76, 80, 246 (1974).

[10] K. D. Peat, R. M. Thomas, *Implementation of iteration schemes for implicit Runge-Kutta methods*, Numerical Analysis Report N° 169, Dept. of Mathematics, Univ. Manchester, (1989).

[11] L. F. Shampine, *Evaluation of implicit formulas for the solution of ODE's*, BIT **19**, 495-502 (1979).

[12] R. D. Skeel, A. K. Kong, *Blended linear multistep methods*, ACM TOMS **3**, 326-345 (1977).

S. González-Pinto, S. Pérez Rodríguez
Dpto. Análisis Matemático
Universidad de La Laguna
38271 La Laguna-Tenerife, Spain

C. González Concepción
Dpto. Economía Aplicada
Universidad de La Laguna
38071 La Laguna-Tenerife, Spain

J. I. Montijano
Dpto. Matemática Aplicada
Universidad de Zaragoza
50009 Zaragoza, Spain