Algoritmos de arranque para métodos Runge–Kutta implícitos.

S. González–Pinto[1] J.I. Montijano–Torcal[2]
S. Pérez–Rodríguez[1]

Resumen

En este trabajo estudiamos el comportamiento de ciertos algoritmos de iniciación (ó de arranque) para las iteraciones de tipo Newton, que se suelen usar al resolver las ecuaciones de etapa de métodos Runge–Kutta implícitos cuando se aplican a problemas de valor inicial de tipo stiff. Analizamos la extrapolación clásica de Lagrange de las etapas del paso anterior y algunas variantes que no necesitan ningún coste computacional adicional, estudiando el orden de dichos algoritmos sobre problemas no stiff y sobre la clase general de problemas stiff disipativos.

Introducción

Consideremos la resolución numérica de los problemas de valores iniciales stiff

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(0) = y_0 \in I\!R^m, \quad t \in [0, T], \tag{1}$$

donde $f : [0, T] \times I\!R^m \to I\!R^m$ se supone suficientemente suave en un entorno tubular de la solución única $y(t),\ t \in [0, T]$ de (1).

Para la solución de (1) consideramos métodos Runge–Kutta implícitos de s etapas en los que el paso de (t_0, y_0) a $(t_1 = t_0 + h, y_1)$ viene dado por

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_0 + c_i h, X_i), \tag{2}$$

donde las etapas internas X_i se obtienen al resolver el sistema

$$X_i = y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_0 + c_j h, X_j) \quad (i = 1, \ldots, s). \tag{3}$$

Como es usual, denotaremos $c = (c_1, \ldots, c_s)^T$ el vector de los nodos, $b = (b_1, \ldots, b_s)^T$ el vector de los pesos y $A = (a_{ij}) \in I\!R^{s\times s}$ la matriz de coeficientes del método RK. Como es habitual supondremos tácitamente que $Ae = c$, donde $e = (1, \ldots, 1)^T \in I\!R^s$.

Una vez que se ha resuelto el sistema algebraico (3), normalmente mediante una iteración de Newton modificado, queremos computar buenas aproximaciones Y_i^0 a las etapas internas del RK del siguiente paso $(t_1 = t_0 + h, y_1) \to (t_2 = t_1 + rh, y_2)$ y comenzar de nuevo el proceso iterativo para el nuevo sistema

$$Y_i = y_1 + \bar{h}\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_1 + c_j\bar{h}, Y_j) \quad (i = 1, \ldots, s), \tag{4}$$

donde $r = \bar{h}/h$ se puede suponer de tamaño moderado, normalmente $r \in (0, 2]$.

Con este fin vamos a considerar los dos siguientes tipos de algoritmos de arranque, que pueden implementarse prácticamente sin coste adicional:

Algoritmos de arranque de Tipo I:

$$Y_i^0 = \gamma_i y_0 + \sum_{j=1}^{s} \alpha_{ij} X_j, \;\; i = 1, ..., s. \tag{5}$$

Algoritmos de arranque de Tipo II:

$$Y_i^0 = y_0 + h\delta_i f(t_0, y_0) + h\sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} f(t_0 + c_j h, X_j), \;\; i = 1, ..., s. \tag{6}$$

Los coeficientes $\{\gamma_i, \alpha_{ij}\}$ y $\{\delta_i, \beta_{ij}\}$ sólo van a depender de la razón de cambio de paso r y de los coeficientes del método RK.

Diremos que un algoritmo de arranque Y_i^0 es de orden q si es el mayor entero tal que

$$\max_{1\le i\le s} |Y_i - Y_i^0| = \mathcal{O}(h^{q+1}).$$

Normalmente el término $\mathcal{O}(h^{q+1})$ dependerá de las diferenciales elementales sucesivas de f, de la razón de paso r y de los coeficientes del método RK. Por otro lado, diremos que el algoritmo Y_i^0 tiene orden stiff q si $\max_{1\le i\le s} |Y_i - Y_i^0| = \mathcal{O}(h^{q+1})$ pero donde ahora el término $\mathcal{O}(h^{q+1})$ puede depender de las derivadas sucesivas de la solución exacta $y(t)$ de (1), pero es independiente de las diferenciales elementales de f cuando se consideran separadamente, por lo que no depende de la stiffness del problema.

Obsérvese de (3) que en realidad los algoritmos de Tipo I son un caso particular de los de Tipo II con $\delta_i = 0,\; i = 1, \ldots, s$ si

$$\gamma_i + \sum_{j=1}^{s} \alpha_{ij} = 1. \tag{7}$$

En este caso, denotando $\mathcal{A} = (\alpha_{ij})$ y $\mathcal{B} = (\beta_{ij})$, los coeficientes de los algoritmos correspondientes están relacionados por $\mathcal{B} = \mathcal{A}A$. Además, si A es no singular, todos los algoritmos de Tipo II con $\delta_i = 0,\; i = 1, \ldots, s$ pueden expresarse también como uno de Tipo I con $\mathcal{A} = \mathcal{B}A^{-1}$. Por otra parte, desde que $Y_i = y_0 + \mathcal{O}(h)$ y $X_i = y_0 + \mathcal{O}(h)$, la condición (7) será necesaria para que Y_i^0 tenga orden al menos 0. Por tanto, vamos a considerar solamente algoritmos de Tipo I que satisfagan (7).

Esquemas similares a estos se han estudiado en [11] para el caso no stiff; en [8, 9] para métodos aplicados a problemas hamiltonianos no stiff; en [15] para el caso stiff aunque no queda claro que las condiciones de orden inverso que allí se estudian sean apropiadas para métodos Runge–Kutta completamente implícitos; en [7] se orientan hacia la computación en paralelo; en [14] y [12] para ecuaciones diferenciales algebraicas.

Nuestro objetivo en este trabajo es bastante diferente, ya que estamos interesados en algoritmos para la computación secuencial y resolvemos el sistema (4) hasta que dos iteraciones sucesivas estén lo suficientemente cerca, i.e., $\max_i |Y_i^{k+1} - Y_i^k| < \mathrm{Tol}$, y no con un número fijo de iteraciones como se hace en [7].

Por otro lado, en [6, Cap. IV.8], los autores recomiendan como algoritmos de arranque para el esquema Newton simplificado la interpolación polinómica de Lagrange de las etapas internas X_i e y_0 del paso anterior evaluada en los puntos $t = 1 + rc_i$, como mejor que tomar $Y_i^0 = y_1$ (ambos casos son de Tipo I). Los autores basan sus consideraciones en el comportamiento de tales algoritmos sobre una gran variedad de problemas stiff integrados con su código RADAU5 (que usa la fórmula Radau IIA de tres etapas). Es bien conocido que los algoritmos basados en la interpolación de Lagrange de las etapas internas del paso anterior X_i e y_0 dan buenos valores iniciales en general cuando el método RK usado es de colocación. Aquí intentamos dar un soporte teórico a este hecho y analizar además otros algoritmos de posible interés para la integración de problemas stiff.

En las siguientes secciones estudiamos el orden clásico de los algoritmos propuestos mediante la teoría de las B–series y su orden stiff, tomando como primera aproximación el problema stiff test de Prothero y Robinson [13], para pasar luego a los problemas disipativos.

En este resumen sólo vamos a exponer los resultados teóricos obtenidos para métodos RK de alto orden con matriz de coeficientes A no singular: Gauss, Radau IA–IIA y Lobatto IIIC. En [5] demostramos todas estas propiedades, presentando varios experimentos numéricos que confirman dichos resultados, y además estudiamos el caso del método RK–Lobatto IIIA.

Orden no stiff de los algoritmos de arranque

En esta sección estudiamos el máximo orden alcanzable por los algoritmos de arranque propuestos en la sección anterior sobre problemas no stiff.

Aquí vamos a usar las condiciones simplificadoras

$$B(p): \quad b^T c^{j-1} = 1/j, \ (1 \le j \le p), \qquad C(q): \quad Ac^{j-1} = c^j/j, \ (1 \le j \le q),$$

donde $c^j = (c_1^j, \ldots, c_s^j)^T$, y llamamos *orden de etapa* del RK (A, b) al mayor entero τ tal que se verifican $B(\tau)$ y $C(\tau)$. Diremos que un RK es no confluente si todos los c_i son distintos entre sí. Además, vamos a denotar $\{\bar{l}_j(t)\}_{j=1}^s$ a la base de polinomios fundamentales de Lagrange asociada a los nodos $\{c_1, \ldots, c_s\}$ y $\{l_j(t)\}_{j=0}^s$ a la base asociada a los nodos $\{c_0 = 0, c_1, ..., c_s\}$. Con esta notación demostramos los siguientes teoremas.

Teorema 1 *Supongamos que un RK (A, b) de s etapas no confluente con matriz A no singular, satisface $B(s-1)$ y $C(s-1)$. Entonces, para los algoritmos de arranque de Tipo I tenemos que* *(a) Existe una familia s-paramétrica de orden $s-1$ (con $\gamma_j, j = 1, ..., s$ como parámetros libres). En particular, eligiendo $\gamma_j = 0; j = 1, \ldots, s$, los coeficientes del algoritmo de Tipo I resultante son*

$$\alpha_{ij} = \bar{l}_j(1 + rc_i), \quad 1 \leq i, j \leq s. \tag{8}$$

(b) Existe un único algoritmo de orden máximo s. Si además se verifican $B(s)$ y $C(s)$ los coeficientes de dicho algoritmo de arranque vienen dados por

$$\gamma_i = l_0(1 + rc_i), \qquad \alpha_{ij} = l_j(1 + rc_i), \qquad 1 \leq i, j \leq s. \tag{9}$$

Teorema 2 *Supongamos que un RK de s etapas no confluente con A no singular, satisface $B(s-1)$ y $C(s-1)$. Entonces para los algoritmos de arranque de Tipo II tenemos que*
(a) Existe una familia s–paramétrica de orden s (con $\delta_j,\ j = 1, \ldots, s$ como parámetros libres). Además si se verifica $B(s)$ y $C(s)$ y elegimos $\delta_j = 0,\ j = 1, \ldots, s$, el único algoritmo de orden s es

$$\beta_{ij} = \int_0^{1+rc_i} \bar{l}_j(t)dt, \quad 1 \leq i, j \leq s, \tag{10}$$

y dicho algoritmo coincide con el de Tipo I dado en el Teorema 1–(b).
(b) Suponiendo que se verifican $B(s)$ y $C(s)$, existe un único algoritmo de arranque de orden $s+1$ que puede calcularse por la fórmula alternativa:

$$Y_i^0 = y_1 + rh\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\mathcal{F}_j, \quad i = 1, ..., s, \qquad \mathcal{F}_j = P(1 + rc_j),\ j = 1, ..., s, \tag{11}$$

siendo $P(x)$ el polinomio de interpolación de las derivadas en el paso anterior, i.e.,

$$P(0) = f(t_0, y_0), \ \ P(c_j) = f(t_0 + c_j h, X_j),\ j = 1, \ldots, s.$$

Orden stiff de los algoritmos de arranque

Los resultados de orden de los algoritmos propuestos deducidos en la sección anterior se basan en la teoría de las series de Butcher y son relevantes sólo para problemas no stiff. Como una primera aproximación al caso stiff, vamos a estudiar el comportamiento de estos algoritmos cuando el método RK se aplica a la ecuación lineal de Prothero y Robinson [13],[6, Cap. IV.15]. Posteriormente estudiaremos el orden sobre una clase más general de problemas no lineales stiff.

El modelo de Prothero y Robinson.

Consideremos el modelo de Prothero y Robinson

$$y' = f(t, y) = \lambda(y - \phi(t)) + \phi'(t), \quad y(0) = \phi(0), \quad Re(\lambda) \leq 0, \tag{12}$$

donde $\phi(t)$ se supone suficientemente suave en $[0, T]$.

Usando los resultados dados por ejemplo en [10] obtenemos el siguiente desarrollo en potencias de h para las etapas internas exactas Y_i de (4), si $z = \lambda h$:

$$\begin{gathered}
Y_i = R_i(z)(y_0 - \phi(t_0)) + \phi(t_0) + \sum_{j\geq 1} \frac{\phi^{(j)}(t_0)}{j!} v_{i,j}(z) h^j, \\
v_{i,j}(z) = -z\mu_{i,j} + j\mu_{i,j-1}, \quad j \geq 1, \\
\mu_{i,k} = p_i^T (I - z\bar{A})^{-1} \bar{c}^k, \quad k \geq 0 \\
p_i^T = (b^T, rA_i^T), \quad \bar{A} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ eb^T & A \end{pmatrix}, \\
R_i(z) = R(z) T_i(rz), \quad R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}e, \quad T_i(z) = e_i^T (I - zA)^{-1} e.
\end{gathered} \tag{13}$$

Además, si el método RK (A, b) es AS y ASI–estable (ver [1], [2]) se tiene la acotación uniforme

$$\sup_{Re(z)\leq 0} \max_{1\leq i\leq s} |v_{ij}| \leq K_j < \infty, \quad (j \geq 1).$$

También conseguimos el desarrollo de la aproximación Y_i^0 dada por el algoritmo de arranque de tipo II siguiente (recordemos que el tipo I es un caso particular de este):

$$\begin{gathered}
Y_i^0 = \tilde{R}_i(z)(y_0 - \phi(t_0)) + \phi(t_0) + \sum_{j\geq 1} \frac{\phi^{(j)}(t_0)}{j!} \tilde{v}_{i,j}(z) h^j, \\
\tilde{v}_{i,j}(z) = -z\tilde{\mu}_{i,j} + j\tilde{\mu}_{i,j-1}, \quad j \geq 1, \\
\tilde{\mu}_{i,0} = \delta_i + \beta_i^T (I - zA)^{-1} e, \qquad \tilde{\mu}_{i,j} = \beta_i^T (I - zA)^{-1} c^j, \quad j \geq 1 \\
\tilde{R}_i(z) = 1 + z\delta_i + z\beta_i^T (I - zA)^{-1} e, \qquad \beta_i^T = (\beta_{i1}, ..., \beta_{is}).
\end{gathered} \tag{14}$$

Además, al ser A no singular, con la ASI–estabilidad del método RK se demuestra la acotación uniforme en todo el semiplano complejo negativo de los coeficientes $\tilde{v}_{ij}(z)$.

Para analizar el comportamiento de los algoritmos de arranque nos centramos en tres aspectos: la acotación de los coeficientes $\tilde{v}_{i,j}(z)$, el orden del algoritmo, esto es, el máximo $j \geq 1$ tal que $v_{i,j}(z) - \tilde{v}_{i,j}(z) = 0$ para todo $i = 1, \ldots, s$ y todo z con $Re\ z \leq 0$, y la acotación de la diferencia $R_i(z) - \tilde{R}_i(z)$. Así demostramos los siguientes teoremas:

Teorema 3 *Si un RK (A, b) de s etapas no confluente con A no singular verifica las condiciones simplificadoras $B(s-1)$ y $C(s-1)$ y es ASI-estable y AS-estable, entonces*
(a) La familia s–paramétrica de algoritmos de Tipo I de orden $s-1$ dada en el Teorema 1–(a) tiene también orden stiff $s-1$ sobre la ecuación de Prothero y Robinson.
(b) Existe un único algoritmo de arranque de Tipo I de orden stiff $s-1$ que alcanza orden s sobre cuadraturas, i.e., para el caso $\lambda = 0$. Si además se verifican $B(s)$ y $C(s)$ dicho algoritmo alcanza orden stiff máximo s (para cualquier $Re\ z \leq 0$) y sus coeficientes son los dados en (9) del Teorema 1–(b).

Teorema 4 *Supongamos que estamos en las mismas condiciones del Teorema 3. Entonces para los algoritmos de arranque de Tipo II tenemos:*
(a) Existe una familia $2s$–paramétrica de algoritmos de orden stiff $s-1$ sobre la ecuación de Prothero y Robinson. Si además buscamos orden s sobre cuadraturas (i.e. para $z = 0$) obtenemos la familia s–paramétrica dada en el Teorema 2-(a).

(b) Si se supone $C(s)$ y $B(s)$ la familia s–paramétrica anterior alcanza orden stiff s. Además, si elegimos $\delta_i = 0$, $i = 1, \ldots, s$, los coeficientes del único algoritmo de orden máximo s vienen dados por (10) del Teorema 2–(a).
(c) Suponiendo $C(s)$, $B(s)$, el orden stiff $s+1$ no se puede alcanzar en general para todo Re $z \leq 0$. Sin embargo, si pedimos orden s en general y orden $s+1$ en los puntos particulares $z = 0$ o $z = \infty$, podemos obtener un algoritmo único.

Comparación de las funciones de amplificación del error: Si estamos en las mismas condiciones del Teorema 3, tenemos para $1 \leq i \leq s$ que

$$R_i(\infty) = 0, \qquad \tilde{R}_i(\infty) = \begin{cases} 1 - \beta_i^T A^{-1} e & \text{si } \delta_i = 0 \\ \infty & \text{si } \delta_i \neq 0. \end{cases}$$

Orden stiff sobre problemas disipativos.

Vamos a estudiar el orden stiff de los algoritmos de arranque de Tipo I y II sobre una clase más general de ecuaciones diferenciales no lineales que suelen considerarse habitualmente cuando se estudia la convergencia de los métodos Runge–Kutta o los multipaso (ver por ejemplo [4], [3], [6]).

Vamos a suponer que la función derivada f verifica una condición de Lipschitz por un lado (donde la norma considerada será la norma euclídea asociada a un producto escalar $|v|^2 = \langle v, v \rangle$),

$$\langle y - z, f(t, y) - f(t, z) \rangle \leq \nu |y - z|^2, \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall y, z \in I\!R^m. \tag{15}$$

donde $\nu = \mathcal{O}(1)$, prestando atención principalmente al caso $\nu = 0$, i.e., cuando el problema es disipativo. También consideraremos que las derivadas de la solución exacta $y(t)$ verifican

$$|y^{(l)}(t)| \leq M_l = \mathcal{O}(1), \quad \forall t \in [0, T], \quad l = 1, \ldots, q+1, \tag{16}$$

donde q denota el orden de etapa del RK considerado. Diremos además que un RK es diagonalmente estable si existe una matriz diagonal D definida positiva tal que $DA + A^T D$ es definida positiva.

Teorema 5 *Sea un RK (A, b) de s etapas no confluente con A no singular que verifica $B(s-1)$, $C(s-1)$ y que es diagonalmente estable. Entonces, considerando la suposición local $y_0 = y(t_0)$, la familia de algoritmos de arranque s–paramétrica de Tipo I de orden $s-1$ dada en el apartado (a) del Teorema 1 tiene orden stiff $s-1$. Además, si se verifican $B(s)$ y $C(s)$, el único algoritmo de Tipo I de orden s dado por el polinomio de extrapolación de Lagrange, como se indica en el apartado (c) del Teorema 1, tiene también orden stiff s.*

Teorema 6 *Si consideramos un RK (A, b) de s etapas que verifica las mismas hipótesis del Teorema 5, entonces, tomando $y_0 = y(t_0)$ para los algoritmos de arranque de Tipo II tenemos que*
(a) La familia $2s$–paramétrica considerada en el Teorema 4-(a) tiene orden stiff $s-1$.

Cuadro 1: *Gauss y Radau IIA (A no singular, $C(s)$)*

	orden no stiff	orden stiff	orden P-R en $z=0$	orden P-R en $z=\infty$	$\tilde{R}_i(\infty)$
$\mathcal{L}_s^1$	$s-1$	$s-1$	$s-1$	$s-1$	0
$\mathcal{L}_s^0$	s	s	s	s	acotado
$\mathcal{M}_{s+1}^{II,1}$	$s+1$	s	$s+1$	s	∞
$\mathcal{M}_{s+1}^{II,2}$	s	s	s	$s+1$	∞

Cuadro 2: *Radau IA y Lobatto IIIC (A no singular, $C(s-1)$)*

	orden no stiff	orden stiff	orden P-R en $z=0$	orden P-R en $z=\infty$	$\tilde{R}_i(\infty)$
$\mathcal{L}_s^1$	$s-1$	$s-1$	$s-1$	$s-1$	0
$\mathcal{L}_s^0$	$s-1$	$s-1$	$s-1$	$s-1$	acotado
$\mathcal{M}_s^I$	s	$s-1$	$s-1$	$s-1$	acotado

(b) Si también se tiene $B(s)$ y $C(s)$, existe una familia s–paramétrica de algoritmos con orden stiff s (tomando como parámetros a δ_i ($i=1,\ldots,s$) por ejemplo). Si elegimos $\delta_i=0$ ($i=1,\ldots,s$), entonces los coeficientes β_{ij} vienen dados por la extrapolación polinómica de Lagrange como se indica en (10).

Algunos algoritmos importantes.

Tipo I.

$\mathcal{L}_s^0$: polinomio de extrapolación de Lagrange en $X_1,\ldots,X_s$ e y_0 (9).

$\mathcal{L}_s^1$: polinomio de extrapolación de Lagrange en $X_1,\ldots,X_s$ ($\gamma_i=0$)(8).

$\mathcal{M}_s^I$: algoritmo de Tipo I de orden s (clásico) con A no singular y $C(s-1)$.

Tipo II.

$\mathcal{M}_{s+1}^{II,1}$: algoritmo de Tipo II de orden clásico $s+1$.

$\mathcal{M}_{s+1}^{II,2}$: algoritmo de orden clásico s y orden $s+1$ en $z=\infty$ (sobre el modelo de Prothero y Robinson).

En las Tablas 1 y 2 resumimos las propiedades de los algoritmos considerados.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto de investigación DGA P21/97.

Referencias

[1] K. Burrage, W. H. Hundsdorfer, J.G. Verwer, “A study of B-convergence of Runge-Kutta methods”, *Computing*, **36**, (1986), 17–34.

[2] M. Calvo, S. González–Pinto, J.I. Montijano, “Runge–Kutta methods for the numerical solution of stiff semilinear initial value problems”, *enviado a BIT*, (1998).

[3] K. Dekker, J.G. Verwer, *Stability of Runge–Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*, North Holland, Amsterdam, 1984.

[4] R. Frank, J. Schneid, C.W. Ueberhuber, "The concept of B-convergence", *SIAM J. Numer.Anal.*, **18**, (1981), 753–780.

[5] S. González–Pinto, J.I. Montijano, S. Pérez–Rodríguez, "On the starting algorithms for fully implicit Runge–Kutta methods", *enviado a BIT*, (1999).

[6] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer–Verlag, 1991.

[7] P.J. van der Houwen, B.P. Sommeijer, " Preconditioning in parallel Runge-Kutta methods for stiff initial value problems", *J. Comput. Math. Appl.*, **28**, 10-12, (1994), 17-31.

[8] M.P. Laburta, "Starting algorithms for IRK methods", *J. Comput. Appl. Math.*, **83**, (1997), 269-288.

[9] M.P. Laburta, "Construction of starting algorithms for the RK-Gauss methods", *J. Comput. Appl. Math.*, **90**, (1998), 239-261.

[10] C. Mac Donald, W. Enright, "Implications of order reduction for implicit Runge–Kutta methods", *Numerical Algorithms*, **2**, (1992), 351-370.

[11] S.P. Nørsett and P.G. Thomsen, "Local error control in SDIRK-methods", *BIT*, **26**, (1986), 100-113.

[12] H. Olsson and G. Söderlind, "Stage value predictors and efficient Newton iterations in implicit Runge–Kutta methods", *SIAM Journal on Scientific Computing*, **20**, 1 (1999), 185–202.

[13] A. Prothero, A. Robinson, "On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations", *Math. Comp.*, **28**, (1974), 145-162.

[14] T. Roldán, I. Higueras, "IRK methods for DAE: starting algorithms", Dept. of Mathematics and Computer Science, Univ. Pública Navarra, Spain, 1998.

[15] J. Sand, "Starting methods for the iteration of IRK's", Dept. of Computer Science, Univ. Copenhagen, Denmark, 1989.

1 Departamento Análisis Matemático. Universidad de La Laguna. 38271 Tenerife, Spain, email: sgonzalez@ull.es, sperezr@ull.es

2 Departamento Matemática Aplicada. Universidad de Zaragoza. 50009 Zaragoza, Spain, email: monti@posta.unizar.es