

EXTENSIÓN DEL METODO ONE-LEG MULTISTEP CON ESTABILIDAD MARGINAL

Gustavo Boroni^a, Ernesto Kofman^b, Pablo Lotito^a y Alejandro Clause^a

^aCONICET-CNEA y Universidad Nacional del Centro, 7000, Tandil, Argentina

^bCIFASIS-CONICET, UNR, Riobamba 245 Bis, Rosario, Argentina

gboroni@gmail.com, kofman@fceia.edu.ar, plotito@exa.unicen.edu.ar, clause@exa.unicen.edu.ar

Palabras clave: problemas de valor inicial, sistemas stiff, estabilidad, one-leg multistep.

Resumen. En este trabajo se presenta una nueva clase de método multipaso para problemas de valor inicial modelados por ecuaciones diferenciales ordinarias. Esta nueva clase de método se basa en la extensión del método One-Leg Multistep (OLM), el cual utiliza una fórmula multipaso no lineal para calcular la solución en el siguiente punto de integración. La extensión propuesta en este trabajo es una combinación de OLM_k con el método multipaso lineal clásico. Como resultado de esta extensión se mantiene la precisión y se mejora la estabilidad respecto de OLM_k .

INTRODUCCIÓN

Considérese la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias dado por:

$$y'(t) = f(t, y(t)) \quad (1)$$

en un intervalo $[t_0, t_f]$, con valores iniciales $y(t_0) = y_0$.

El método One-Leg Multipaso de orden k (OLM_k) propone el siguiente esquema numérico para resolver (1)

$$p'(t) = f(t, p(t)), \quad (2)$$

donde p es una aproximación de orden k de la solución y .

Cuando se aplica a un tiempo específico t_e la Ec. 2 permite generar una formula no lineal implícita

$$p'(t_e) = f(t_e, p(t_e)), \quad (3)$$

la cual puede ser utilizada para aproximar el valor de $y(t_n)$.

La elección del valor de t_e tiene un impacto fundamental en la precisión y en la estabilidad de OLM_k. Dahlquist [Dahlquist 1983] demostró que existe un tiempo t^+ tal que la formula OLM_k produce un método de orden $k+1$. Posteriormente, Janssen [Janssen and Van Hentenryck 2003] demostró que existe un tiempo t^* tal que si la formula de OLM_k es $A(\psi)$ -estable, donde ψ es el ángulo de estabilidad. La región de estabilidad no tiene intersección con C^+ , y es de orden k con mayor precisión que BDF_k.

En el presente trabajo se propone un método que combina el método OLM_k con el método multipaso lineal clásico, donde se mantienen las propiedades respecto de la precisión y el orden del método OLM_k, al mismo tiempo que se mejora sustancialmente el ángulo de estabilidad ψ y la región de estabilidad.

1 MÉTODOS ONE-LEG MULTIPASO

Cuando el paso de tiempo h es constante, los polinomios de la Ec. 2 se puede escribir como

$$\begin{aligned} p(t) &= \sum_{j=0}^k \xi_j \nabla^j y_n, \\ p'(t) &= \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \xi'_j \nabla^j y_n, \\ \xi_j(\tau) &= \frac{1}{j!} \prod_{m=0}^{j-1} (\tau + m - k), \\ \xi'_j(\tau) &= \xi_j(\tau) \delta_j(\tau), \\ \delta_j(\tau) &= \sum_{m=0}^{j-1} \frac{1}{(\tau + m - k)} \quad (1 \leq j \leq k), \end{aligned} \quad (5)$$

donde el radio τ es un parámetro característico.

Cuando $\tau=0$, OLM_k(0) se reduce a el método BDF_k, esto es

$$\sum_{j=1}^k \frac{1}{j} \nabla^j y_n - hf(t_n, y_n) = 0. \quad (6)$$

2 MÉTODO OLM EXTENDIDO

La Ec. 5 se puede reescribir en función del radio τ

$$\frac{1}{h} \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau) y_{n-i} = f\left(t_n, \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) y_{n-i}\right). \quad (7)$$

El método que proponemos es este trabajo (OLML_k) combina la Ec. 7 con el método multipaso lineal clásico, llegando a

$$\frac{1}{h} \sum_{j=0}^m \delta_j \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau - j) y_{n-i} = \sum_{j=0}^m \delta_j f\left(t_{n-j}, \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) y_{n-i-j}\right), \quad (8)$$

aplicando la igualdad $t_e = t_n + h(\tau - j) = t_{n-j} + h\tau$.

El término $\tau - j$ se utiliza sobre parámetro de α_i y el término t_{n-j} se aplica sobre las f . En este trabajo no se provee de una fórmula general para las constantes δ_j , no obstante esto se propone un algoritmo sencillo para calcular valores de δ_j .

2.1 Precisión y error

Considerar la forma lineal de una formula OLM_k(τ) (que vamos a denotar LMM_k(τ) - Linear Multistep Method)

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau) y_{n-i} = h \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) f_{n-i}, \quad (9)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_j(\tau) &= \varphi_j'(\tau), \\ \beta_j(\tau) &= \varphi_j(\tau), \\ \varphi_j(\tau) &= \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq j}}^k \frac{(\tau - m)}{j - m}, \\ f_{n-i} &= f(t_{n-i}, y_{n-i}). \end{aligned} \quad (10)$$

A partir del trabajo de Janssen [Janssen et. al. 2002] se puede verificar que las Ecs. 7 y 9 tienen orden $\leq k$. En el caso en que las Ecs. 7 o 9 tengan orden k , las formulas tienen el mismo orden, la misma constante de error (la misma precisión) y la misma estabilidad lineal. Efectivamente, considerar el operador diferencia lineal

$$L[y(t_n), h] = \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau) y_{n-i} - h \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) y_{n-i}', \quad (11)$$

de LMM_k(τ) y el operador diferencia asociado de OLM_k(τ)

$$\Phi[y(t_n), h, \tau] = \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau) y_{n-i} - hf\left(t, \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) y_{n-i}\right). \quad (12)$$

A partir del teorema de caracterización del error a partir del polinomio interpolación [Atkinson 1988], se obtiene la expansiones de $L[y(t_n), h]$ y $\Phi[y(t_n), h, \tau]$

$$\begin{aligned} L[y(t_n), h] &= C_{k+1}(\tau)h^{k+1}y^{k+1}(t_n) + O(h^{k+2}), \\ \Phi[y(t_n), h, \tau] &= C_{k+1}(\tau)h^{k+1}y^{k+1}(t_n) + O(h^{k+2}). \end{aligned} \tag{13}$$

Luego, si $C_{k+1}(\tau) \neq 0$ $LMM_k(\tau)$ y $OLM_k(\tau)$ tienen el mismo orden k y la misma constante de error $C_{k+1}(\tau)$, y si $C_{k+1}(\tau) = 0$ las formulas tiene orden $k+1$ y no necesariamente la misma constante de error.

Siguiendo la misma metodología se obtienen conclusiones similares para el método $OLML_k$. Tomando el operador diferencia Γ del método propuesto y el correspondiente operador diferencia lineal Λ

$$\begin{aligned} \Lambda[y(t_n), h] &= \sum_{j=0}^m \delta_j \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau - j)y_{n-i} - h \sum_{j=0}^m \delta_j \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau)y'_{n-i-j}, \\ \Gamma[y(t_n), h, \tau] &= \sum_{j=0}^m \delta_j \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau - j)y_{n-i} - h \sum_{j=0}^m \delta_j f\left(t, \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau)y_{n-i-j}\right), \end{aligned} \tag{14}$$

las expansiones Γ y Λ quedan representadas por

$$\begin{aligned} \Lambda[y(t_n), h] &= \sum_{j=0}^m \delta_j C_{j,k+1}(\tau)h^{k+1}y^{k+1}(t_n) + O(h^{k+2}), \\ \Gamma[y(t_n), h, \tau] &= \sum_{j=0}^m \delta_j C_{j,k+1}(\tau)h^{k+1}y^{k+1}(t_n) + O(h^{k+2}), \end{aligned} \tag{15}$$

donde la constante de error $\sum_{j=0}^m \delta_j C_{j,k+1}(\tau)$ cumple con las mismas propiedades mencionadas para $C_{k+1}(\tau)$.

Es importante remarcar que el valor de $\sum_{j=0}^m \delta_j C_{j,k+1}(\tau)$ no es igual al de $C_{k+1}(\tau)$. Se puede ver que ambas ecuaciones son funciones con respecto al radio τ . No obstante, la primera ecuación también es función de los valores de las constantes δ_j .

El radio τ se puede determinar a partir de la propiedad “*si la constante de error es igual 0 las formulas son de orden $k+1$, y si la constante de error es distinto de 0 las formulas son de orden k* ”.

En el trabajo de Dahlquist [Dahlquist 1983] se formalizó esta afirmación, permitiendo caracterizar los valores del radio τ^+ (y por ende el valor de t^+) para $OLM_k(\tau)$.

Teorema [Dahlquist 1983]. “Si la formula $OLM_k(\tau)$ es de orden $k+1$, τ^+ es una raíz de la constante de error”.

La formula $C_{k+1}(\tau)$ tiene k raíces en el intervalo $[0, k]$, pero no todas las raíces hacen que la formula de $OLM_k(\tau)$ sea 0-estable [Hairer and Wanner 1991]. Como consecuencia se define τ^+ como la raíz más a la derecha de $C_{k+1}(\tau)$ tal que $OLM_k(\tau)$ sea 0-estable. La tabla 1 muestra los valores de τ^+ para k-step ($1 \leq k \leq 6$).

k	1	2	3	4	5	6
τ^+	0.5	1.5774	2.618	3.6444	4.6634	5.6781

Tabla 1. Valores de τ^+ para $1 \leq k \leq 6$.

Por otra parte, en el trabajo de Janssen [Janssen and Van Hentenryck 2003] se demostró que existe un tiempo t^* tal que la formula de $OLM_k(\tau^*)$ tiene mejores propiedades de estabilidad y precisión respecto de $OLM_k(\tau^+)$ y BDF_k .

En lo que sigue se analizarán las propiedades de estabilidad del método $OLML_k$, comparándolo con OLM_k y BDF_k para el mismo τ^* .

2.2 Estabilidad

Cuando el sistema ODE es un sistema lineal de la forma $y' = Ay$, la formula de $OLM_k(\tau)$ y $LMM_k(\tau)$ son equivalentes. Considerando el primer y el segundo polinomio característico asociados a $OLM_k(\tau)$

$$\begin{aligned}\rho(\tau, x) &= \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau) x^i, \\ \sigma(\tau, x) &= \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) x^i.\end{aligned}\tag{16}$$

Aplicando la definición de Lambert [Lambert 1991], la región de estabilidad R_A de $OLM_k(\tau)$ es parte de la región definida por:

$$\hat{h}(\tau, \theta) = \rho(\tau, e^{i\theta}) / \sigma(\tau, e^{i\theta}),\tag{17}$$

donde $0 \leq \theta \leq 2\pi$. En las figuras 1-6 se puede ver las regiones de estabilidad de las fórmulas de $OLM_k(\tau)$. Las curvas representan la parte real de $\hat{h}(\tau, \theta) = \rho(\tau, e^{i\theta}) / \sigma(\tau, e^{i\theta})$, y la intersección de éstas con el eje x sobre el intervalo $[k-1, \tau]$ representa el intervalo de estabilidad de $OLM_k(\tau)$ (los puntos que se encuentran fuera de este intervalo no son tenidos en cuenta ya que para dichos casos el método $OLM_k(\tau)$ no sería $A(0)$ -estable [referencia]). En las figuras 1-6 se puede observar que para $k \geq 2$ el intervalo de estabilidad de $OLM_k(\tau^*)$ es mayor que el intervalo de estabilidad de $OLM_k(\tau^+)$. Además τ^* es un punto atractivo a utilizar ya que su intervalo de estabilidad es precisamente R_0^- , lo cual permite obtener mejores propiedades de estabilidad. Para analizar esta propiedad, recordemos algunas definiciones y teoremas de estabilidad [Janssen and Van Hentenryck 2003].

Definición. (Precisamente $A(\psi)$ -estable y precisamente $A(0)$ -estable). Un método con región de estabilidad R_A se dice precisamente $A(\psi)$ -estable en $0 \leq \psi \leq \pi/2$ si es $A(\psi)$ -estable y $R_A \cap C^+ = \emptyset$; se dice precisamente $A(0)$ -estable si es precisamente $A(\psi)$ -estable para algún $\psi \in]0, \pi/2[$; y se dice precisamente A -estable si $R_A = C_0^-$.

Teorema. (Condición necesaria de precisamente $A(\psi)$ -estable en $OLM_k(\tau)$). Si $OLM_k(\tau)$ es precisamente $A(0)$ -estable, luego τ es una raíz de $\sigma(\tau, -1)$.

Como consecuencia del teorema anterior τ^* se define como la raíz más derecha de $\sigma(\tau, -1)$ [Janssen and Van Hentenryck 2003]. En la tabla 2 se muestran los valores de τ^* para $1 \leq k \leq 6$.

k	1	2	3	4	5	6
τ^*	0.5	1.7071	2.8229	3.8924	4.935	5.9613

Tabla 2. Valores de τ^* para $1 \leq k \leq 6$.

Las propiedades de estabilidad del método $OLM_k(\tau)$ para τ^* son

- Para $1 \leq k \leq 6$, $OLM_k(\tau^*)$ es convergente y A(0)-estable;
- $OLM_1(\tau^*)$ y $OLM_2(\tau^*)$ son precisamente A-estable;
- $OLM_3(\tau^*)$ y $OLM_4(\tau^*)$ son precisamente A(0)-estable;
- $OLM_5(\tau^*)$ y $OLM_6(\tau^*)$ son en su mayoría precisamente A(0)-estable;
- $OLM_7(\tau^*)$ no es convergente.

2.3 Región de estabilidad para el método $OLML_k$

El primer y el segundo polinomio característico asociados al método $OLML_k$ son

$$\begin{aligned} \rho_E(\tau, x) &= \sum_{j=0}^m \delta_j \sum_{i=0}^k \alpha_i(\tau - j) x^i, \\ \sigma_E(\tau, x) &= \sum_{j=0}^m \delta_j \sum_{i=0}^k \beta_i(\tau) x^{i-j}. \end{aligned} \quad (18)$$

Luego la región de estabilidad del método $OLML_k$ está definida por

$$\hat{h}_E(\tau, \theta) = \rho_E(\tau, e^{i\theta}) / \sigma_E(\tau, e^{i\theta}), \quad (19)$$

donde $0 \leq \theta \leq 2\pi$.

En las Fig. 1-6 se muestra la función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_k(\tau)$ respecto de τ , para $1 \leq k \leq 6$.

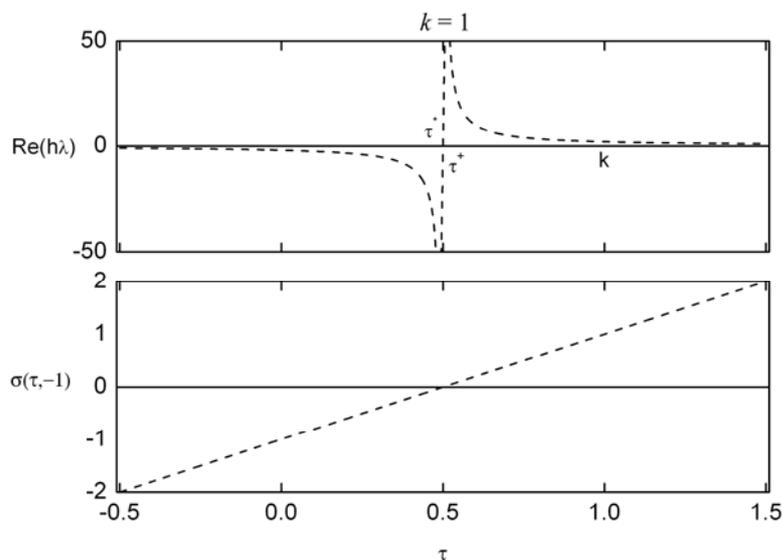


Figura 1. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_1(\tau)$.

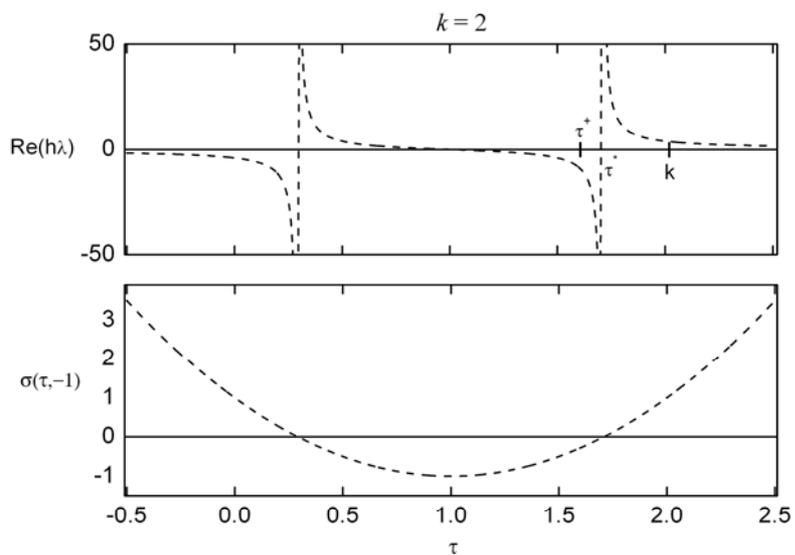


Figura 2. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_2(\tau)$.

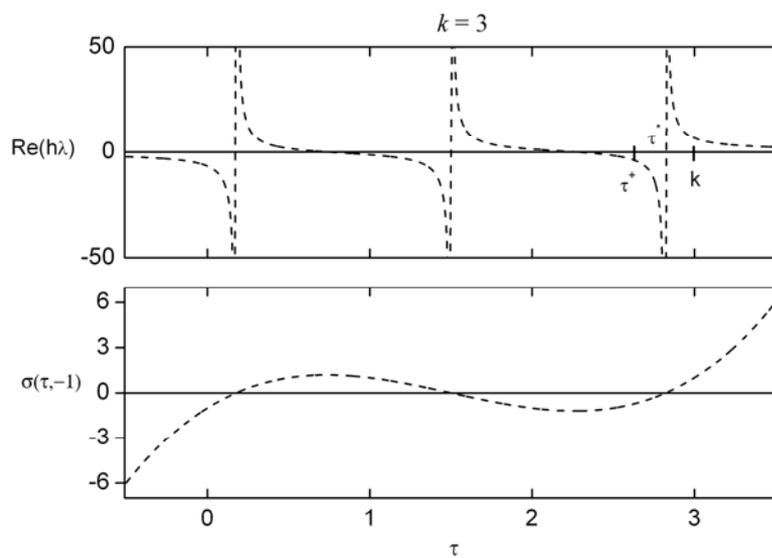


Figura 3. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_3(\tau)$.

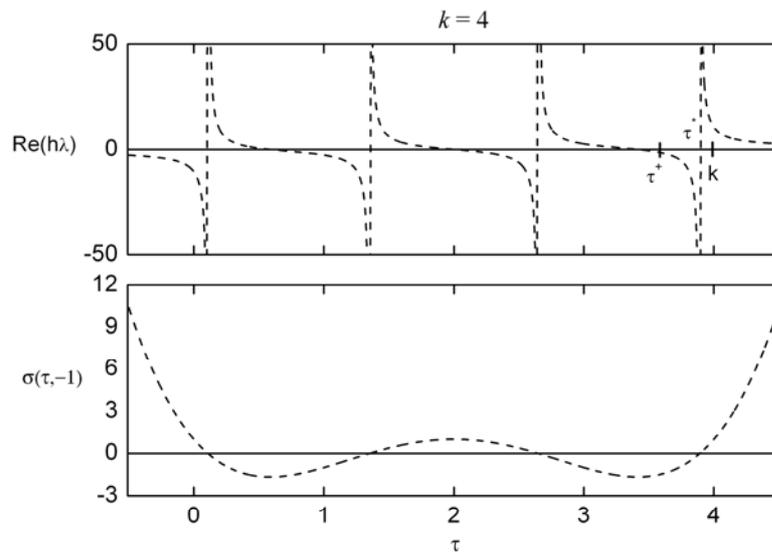


Figura 4. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_4(\tau)$.

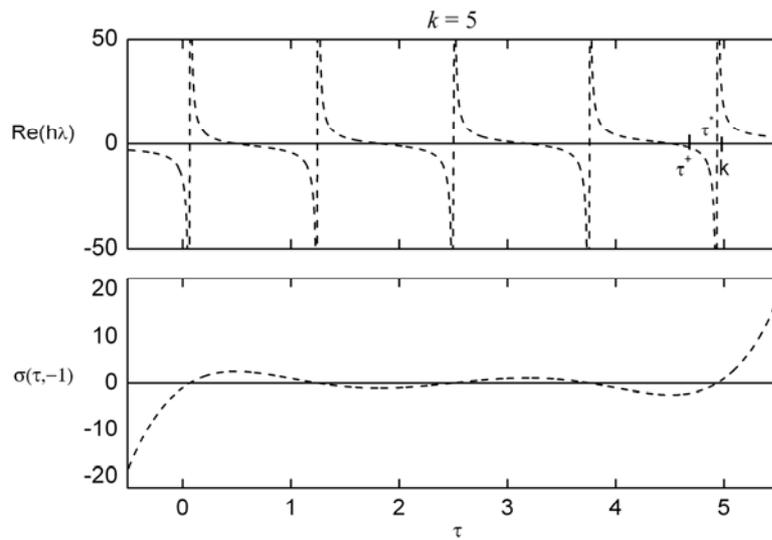


Figura 5. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_5(\tau)$.

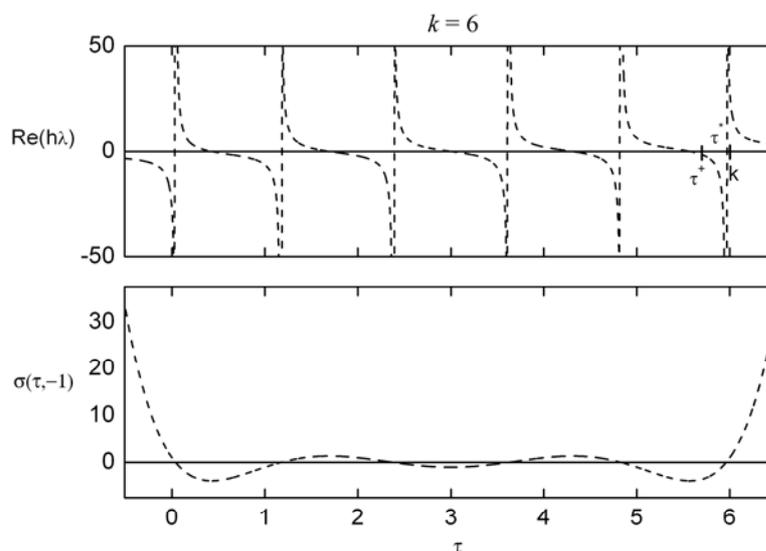


Figura 6. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_6(\tau)$.

Lema. Si τ^* es raíz $\sigma(\tau, -1)$, entonces es raíz $\sigma_E(\tau, -1)$.

Demostración: por definición

$$\sigma_E(\tau, x) = \sum_{i=0}^m \delta_i \sum_{j=0}^k \beta_j(\tau) x^{j-i}. \quad (20)$$

Desarrollando la ecuación $\sigma_E(\tau, -1)$

$$\sigma_E(\tau, -1) = \sum_{i=0}^m \delta_i \sum_{j=0}^k \beta_j(\tau) (-1)^{j-i} = \sum_{i=0}^m \delta_i (-1)^i \sum_{j=0}^k \beta_j(\tau) (-1)^j. \quad (21)$$

Luego si τ^* es raíz $\sigma(\tau, -1)$

$$\sum_{j=0}^k \beta_j(\tau) (-1)^j = 0, \quad (22)$$

por consiguiente $\sigma_E(\tau^*, -1) = 0$.

En las Figs. 1-6 se puede observar estos resultados. Para $1 \leq k \leq 7$ se desprenden las siguientes propiedades de estabilidad para el método $OLML_k$

Para $1 \leq k \leq 6$, $OLM_k(\tau^*)$ es convergente y A(0)-estable;

- $OLM_1(\tau^*)$ y $OLM_2(\tau^*)$ son precisamente A-estable;
- $OLM_3(\tau^*)$ y $OLM_4(\tau^*)$ son precisamente A(0)-estable;
- $OLM_5(\tau^*)$ y $OLM_6(\tau^*)$ son precisamente A(0)-estable;
- $OLM_7(\tau^*)$ es en su mayoría precisamente A(0)-estable.

2.4 Angulo de estabilidad

Hasta aquí hemos demostrado que tanto el orden como la propiedades de estabilidad del método $OLML_k$ son comparables a las de $OLM_k(\tau)$. Estudiaremos en esta sección una propiedad en la que difieren ambos métodos, dando una ventaja significativa a $OLML_k$.

El ángulo de estabilidad ω es el ángulo que se forma en el plano $Re(\lambda h)$ - $Im(\lambda h)$ entre el

eje $\text{Re}(\lambda h)$ y la recta a recta pendiente a la curva que pasa por $[0,0]$. En las figuras 7-12 se puede ver para $1 \leq k \leq 6$ las regiones de estabilidad para los métodos BDF_k , OLM_k y OLML_k .

Para el cálculo del ángulo de estabilidad del método OLML_k se ha utilizado $m=1$, con un grado de libertad sobre δ_0 ($\delta_1=1-\delta_0$). Para seleccionar el valor de δ_0 se aplica un algoritmo numérico muy sencillo, tomando como valor inicial $\delta_0=1$ y calculando el nuevo δ_0 a partir de $\delta_{0,\text{new}}=\delta_0+d_\delta$ con $d_\delta=0.1$. Para cada δ_0 se va ajustando su valor siempre que se refleje una variación del ángulo de estabilidad respecto de su valor anterior. Con este procedimiento se obtuvo para $1 \leq k \leq 6$ una mejora significativa en el ángulo de estabilidad con $\delta_0=11$.

En la tabla 3 se compara el ángulo de estabilidad de los métodos BDF_k , OLM_k y OLML_k para k -steps. La columna asociada al porcentaje de cambio indica la mejora porcentual en la comparación de dos métodos. Se puede ver que el método OLML_k tiene en todos los k -steps mejor ángulo de estabilidad respecto de OLM_k y BDF_k . En general se observa que la región de estabilidad del nuevo método se acerca más a la región de estabilidad ideal, *i.e.* ángulo de 90° .

Otra mejora sustancial se da particularmente en el caso $k=7$, para el cual el método OLML_k es convergente y precisamente $A(0)$ -estable en la mayoría de los casos, situación que no se da para OLM_k y BDF_k . En la Fig. 13 se muestra la función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $\text{OLML}_7(\tau)$. En la Fig. 14 se muestra el ángulo de estabilidad para $k=7$.

k	BDF_k	OLM_k	OLML_k	Porcentaje de cambio $\text{OLM}_k - \text{BDF}_k$	Porcentaje de cambio $\text{OLML}_k - \text{BDF}_k$	Porcentaje de cambio $\text{OLML}_k - \text{OLM}_k$
2	90°	90°	90°	0%	0%	0%
3	86°	84°	90°	-2%	5%	7%
4	73°	72°	85°	-1%	16%	18%
5	52°	55°	72°	6%	38%	31%
6	18°	25°	48°	39%	167%	92%

Tabla 3. Ángulo de estabilidad para $1 \leq k \leq 6$.

3 CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó el método OLML_k que combina el método OLM_k con el método multipaso lineal clásico. Este nuevo método mantiene las propiedades de precisión y el orden del método OLM_k , y al mismo tiempo presenta mejoras sustanciales en el ángulo de estabilidad ψ y la región de estabilidad. En este sentido se obtuvo que el ángulo de estabilidad del método OLML_k es significativamente mejor en comparación de los métodos OLM_k y BDF_k , haciendo que la región de estabilidad del nuevo método se acerque a la región de estabilidad ideal.

Por último, la ventaja quizás más importante del método OLML_k que lo diferencia de OLM_k y BDF_k es que para $k=7$ es convergente y precisamente $A(0)$ -estable en la mayoría de los casos. Este resultado es el que marca la continuidad del presente trabajo, donde se estudiarán los casos $k > 7$.

REFERENCIAS

- Atkinson K. E., *An Introduction to Numerical Analysis*, Wiley, New York, 1988.
- Dahlquist G., *On one-leg multistep methods*, SIAM J. Numer. Anal., 20, pp 1130–1138, 1983.
- Hairer E. and Wanner G., *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- Janssen M. and Van Hentenryck P., *Precisely $A(\alpha)$ -stable One-Leg Multistep Methods*, BIT Numerical Mathematics 43, pp 761–774, 2003.
- Janssen M., Van Hentenryck P., and Deville Y., *A constraint satisfaction approach to parametric differential equations*, SIAM J. Numer. Anal., 40(5), pp. 1896–1939, 2002.
- Lambert J. D., *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems*, Wiley, New York, 1991.

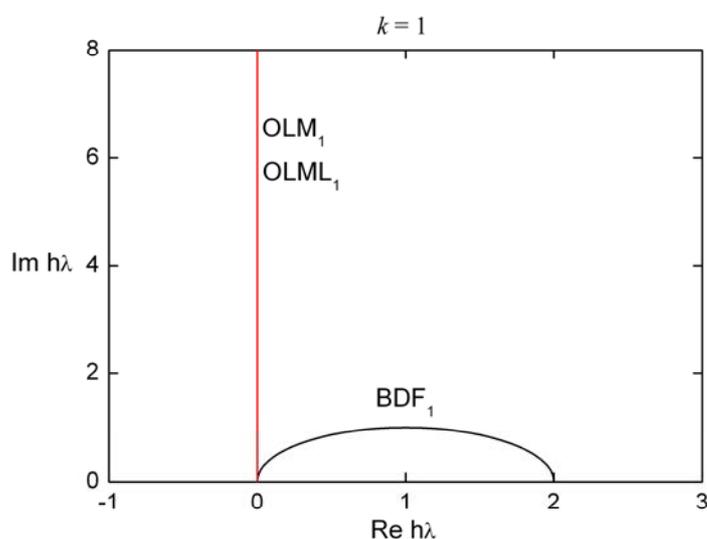


Figura 7. Región de estabilidad de BDF_1 , $OLM_1(\tau^*)$ y $OLML_1(\tau^*)$.

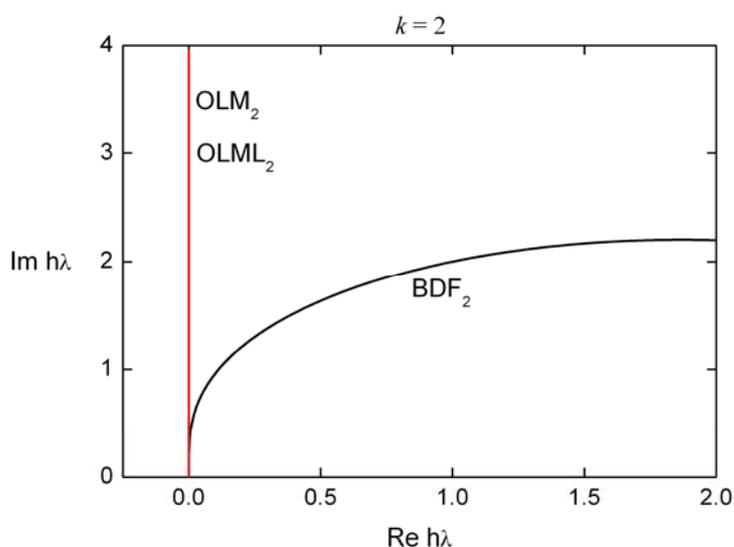


Figura 8. Región de estabilidad de BDF_2 , $OLM_2(\tau^*)$ y $OLML_2(\tau^*)$.

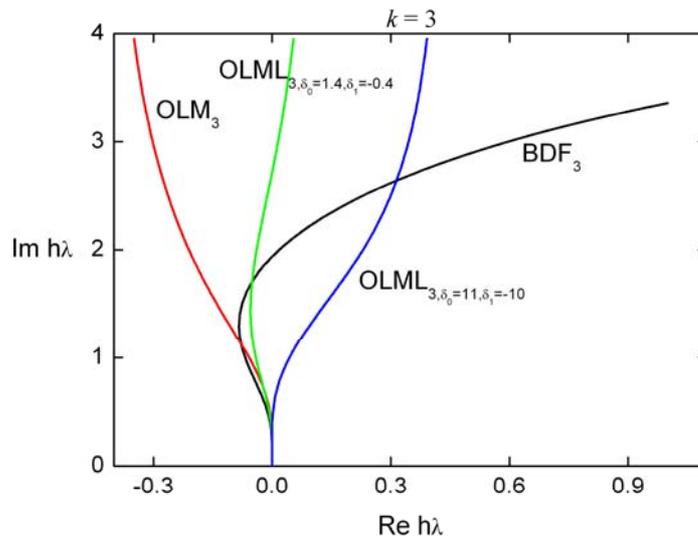


Figura 9. Región de estabilidad de BDF_3 , $OLM_3(\tau^*)$ y $OLML_3(\tau^*)$.

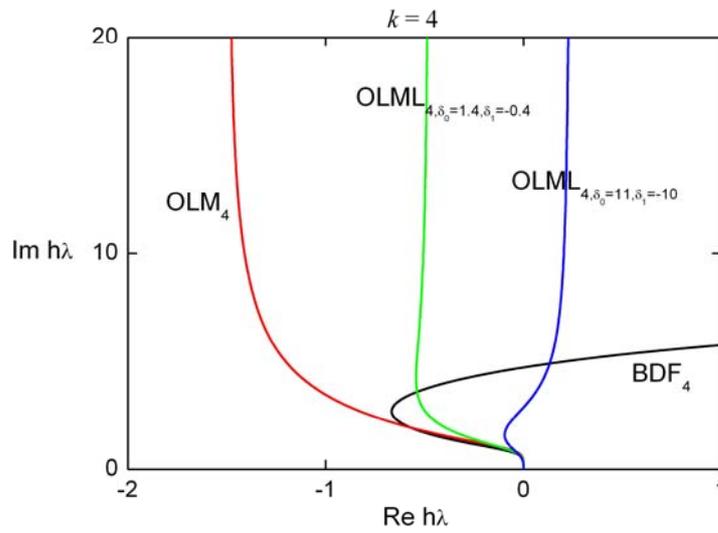


Figura 10. Región de estabilidad de BDF_4 , $OLM_4(\tau^*)$ y $OLML_4(\tau^*)$.

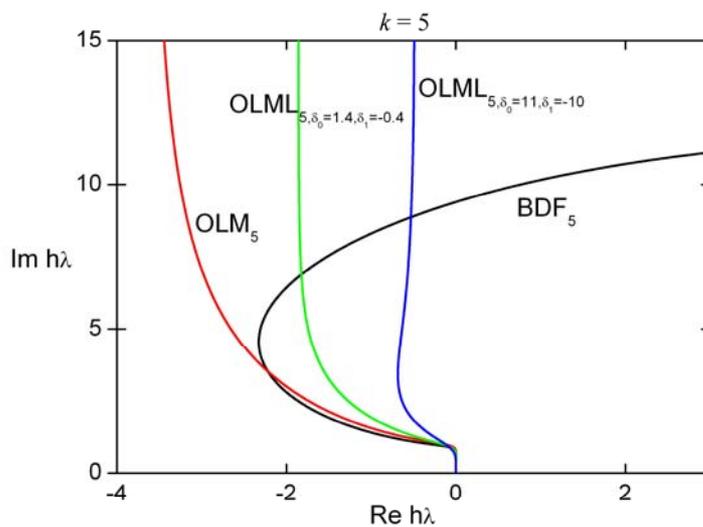


Figura 11. Región de estabilidad de BDF_5 , $\text{OLM}_5(\tau^*)$ y $\text{OLML}_5(\tau^*)$.

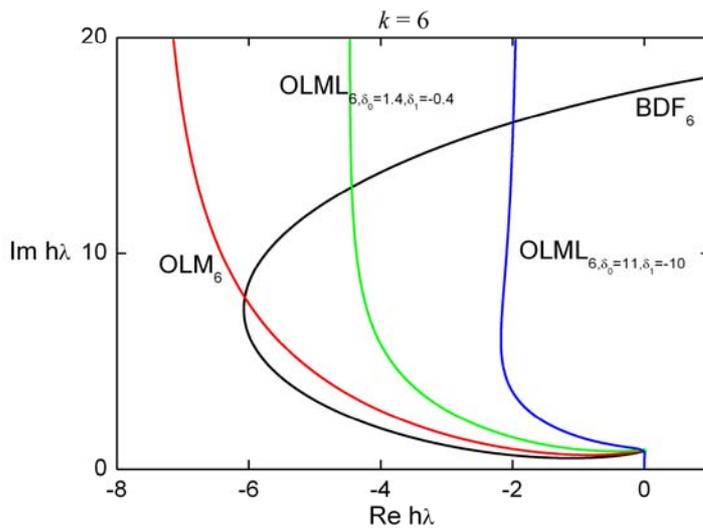


Figura 12. Región de estabilidad de BDF_6 , $\text{OLM}_6(\tau^*)$ y $\text{OLML}_6(\tau^*)$.

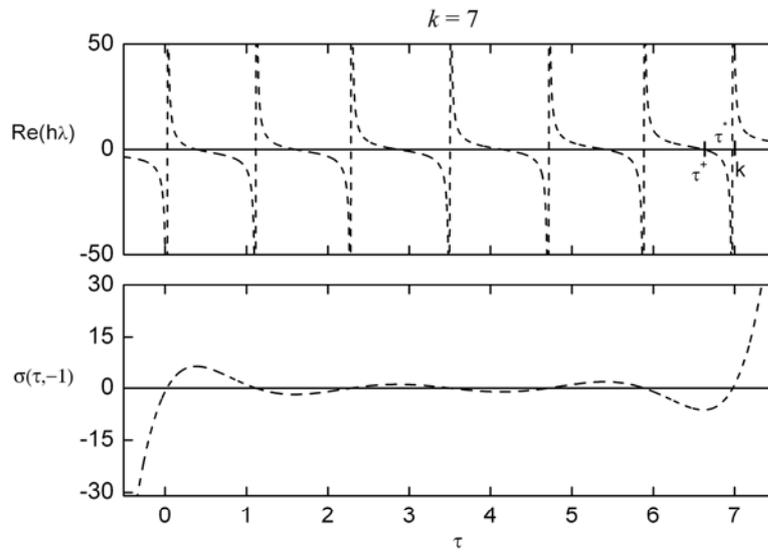


Figura 13. Función \hat{h} y el intervalo de estabilidad de $OLM_7(\tau)$.

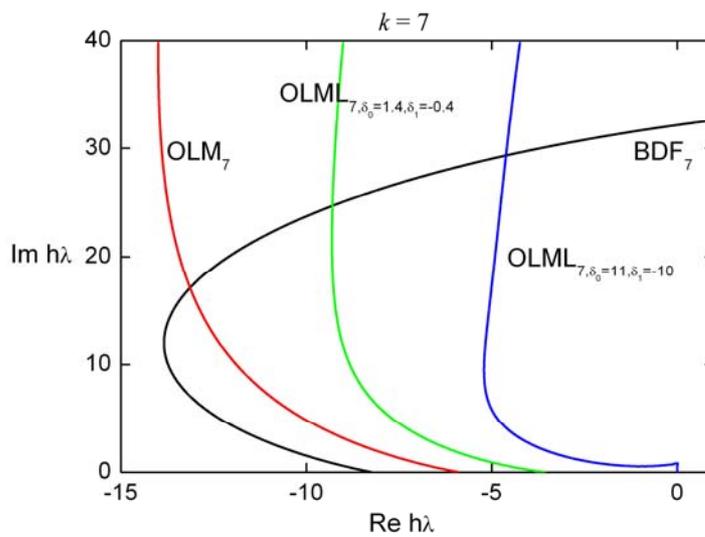


Figura 14. Región de estabilidad de BDF_7 , $OLM_7(\tau^*)$ y $OLML_7(\tau^*)$.