# INICIALIZADORES PARA LAS ECUACIONES IMPLICITAS DE LOS METODOS RUNGE–KUTTA DE GAUSS

M. P. Laburta*
Departamento de Matemática Aplicada
Centro Politécnico Superior. Universidad de Zaragoza.

**Resumen:**

En este trabajo se muestran resultados sobre la existencia y orden máximo alcanzable por distintos algoritmos que proporcionan valores iniciales para el esquema iterativo que resuelve las ecuaciones implícitas que aparecen en los métodos Runge-Kutta implícitos bajo ciertas hipótesis sobre sus coeficientes. En particular, se obtienen algoritmos de distintos órdenes para la fórmula Runge-Kutta de Gauss de tres etapas (canónica), y se presentan experimentos numéricos en donde se pone de manifiesto la superior eficiencia de los de mayor orden.

## 1. Introducción

Supongamos un método Runge–Kutta implícito (IRK) de $s$ etapas representado mediante la tabla de Butcher de sus coeficientes en la forma

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^{\top} \end{array} \quad = \quad \begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array} \tag{1}$$

donde $c = Ae, \; e = (1, \dots, 1)^{\top} \in \mathbb{R}^s$.

Sin pérdida de generalidad consideraremos problemas de valor inicial autónomos de la forma

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y'(t) & = & F(y(t)), \quad t \in [t_0, t_0 + T], \\ y(t_0) & = & y_0 \in \mathbb{R}^D, \end{array} \right. \tag{2}$$

*Subvencionado parcialmente por el proyecto PB93-0305 de la DGCYT

con solución única en el intervalo considerado suponiendo que la función $F(y)$ es suficientemente diferenciable. El método (1) proporciona una aproximación $y_1$ a la solución de (2) en $t_0 + h$ dada por

$$
\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + h \sum_{i=1}^{s} b_i F(Y_i), && (3)\\
Y_i &= y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} F(Y_j), \qquad i = 1, \ldots, s. && (4)
\end{aligned}
$$

Por consiguiente en cada paso de la integración se debe resolver un sistema algebraico de $sD$ ecuaciones para determinar las etapas intermedias $Y_i$.

Entre los métodos IRK, las fórmulas de Gauss–Legendre son especialmente interesantes por sus buenas propiedades de estabilidad. Destaquemos que son las únicas que poseen orden maximal y que además son A y B-estables [4], lo que justifica su aplicación a una gran cantidad de sistemas diferenciales. Por otra parte, estos métodos son simplécticos cuando se aplican a sistemas Hamiltonianos arbitrarios [6], es decir, para cada $h$ fijo, la transformación que define el método $y_1 = \Psi(y_0; h)$, es canónica. Esta propiedad hace que estas fórmulas puedan utilizarse para estudiar el comportamiento cualitativo de ciertos sistemas físicos en largos intervalos de tiempo [7].

Denotando $y = (p^\top, q^\top) \in \mathbb{R}^{2d=D}$, un sistema Hamiltoniano autónomo de ecuaciones diferenciales ordinarias se puede escribir en la forma

$$y'(t) = -J H_y(y(t)),$$

donde $H_y$ es el vector gradiente de la función Hamiltoniana $H = H(y)$ y

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \in M_{2d}(\mathbb{R}),$$

con $0$ e $I$ respectivamente la matriz nula y la matriz identidad de orden $d$, siendo $d$ el número de grados de libertad del sistema.

Utilizando series de Butcher [2], en este trabajo se presentan distintos algoritmos para la obtención de valores iniciales que permitan comenzar las iteraciones para la resolución de las ecuaciones implícitas (4) que aparecen en el método IRK (3)-(4). Se les llama algoritmos de inicialización, y se estudia el orden máximo que pueden alcanzar bajo ciertas hipótesis sobre los coeficientes del método RK, añadiendo evaluaciones de función derivada en algunos casos. Finalmente se han realizado experimentos numéricos con la fórmula de Gauss–Legendre de tres etapas donde se ponen de manifiesto las ventajas de la utilización de inicializadores de orden superior sobre los de órdenes más bajos.

## 2. Series de Butcher de las etapas

Los valores iniciales que nos permitirán comenzar las iteraciones en cada paso, se obtendrán teniendo en cuenta cierta información numérica del paso previo. Tras haber finalizado el paso de $t_0$ a $t_1 = t_0 + h$ para el que se han obtenido las etapas $Y_i$, $i = 1, \dots, s$ y la solución numérica $y_1$ según (3)-(4), las etapas $\widehat{Y}_i$ del paso siguiente de $t_1$ a $t_2 = t_1 + rh$, pueden ponerse

$$\widehat{Y}_i = y_1 + rh \sum_{j=1}^{s} a_{ij} F(\widehat{Y}_j) = y_0 + h \left( \sum_{j=1}^{s} b_j F(Y_j) + r \sum_{j=1}^{s} a_{ij} F(\widehat{Y}_j) \right), \qquad i = 1, \dots, s,$$

por lo que cada $\widehat{Y}_i$ puede considerarse formalmente como la solución numérica que da el método RK

$$\begin{array}{c|c} \tilde{c} & \widetilde{A} \\ \hline & \tilde{b}_i^\top \end{array} \quad = \quad \begin{array}{c|cccccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} & 0 & \cdots & 0 \\ 1 + rc_1 & b_1 & \cdots & b_s & ra_{11} & \cdots & ra_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 + rc_s & b_1 & \cdots & b_s & ra_{s1} & \cdots & ra_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s & ra_{i1} & \cdots & ra_{is} \end{array}$$

a partir de $(t_0, y_0)$. Por consiguiente, de acuerdo con la teoría de las series de Butcher, podemos poner

$$\widehat{Y}_i = y_0 + \sum_{\substack{\tau \in T \\ \rho(\tau) \geq 1}} \frac{\alpha(\tau)\gamma(\tau)}{\rho(\tau)!} \left( \tilde{b}_i^\top \widetilde{\Phi}(\tau) \right) \mathsf{F}(\tau)(y_0) h^{\rho(\tau)}, \quad i = 1, \dots, s,$$

donde $T$ es el conjunto de árboles de raíz, $\rho(\tau)$ el orden del árbol $\tau$, $\alpha(\tau)$ la cardinalidad de $\tau$ y $\mathsf{F}(\tau)(y_0)$ la diferencial elemental de $F$ asociada al árbol $\tau$ en el punto $y_0$. La definición de estas funciones puede verse con detalle junto con las de $\gamma : T \longrightarrow \mathbb{R}$ y $\widetilde{\Phi} : T \longrightarrow \mathbb{R}^{2s}$ en [3].

El sistema algebraico (4) lo resolveremos mediante algún esquema iterativo, y por eso debemos disponer de ciertos algoritmos que nos permitan obtener valores iniciales para comenzar las iteraciones. Los llamaremos *inicializadores* o *algoritmos de inicialización* para el método IRK considerado.

Como se sabe, valores iniciales alejados de los valores de la solución exacta buscada del sistema a resolver, pueden implicar la no convergencia de las iteraciones, y aún en el caso de que la haya, la implementación del método puede ser excesivamente costosa si el número de iteraciones es elevado. De acuerdo con estas observaciones, un aspecto importante en el diseño de métodos iterativos eficientes para la resolución de (4) es el cálculo de valores iniciales lo más aproximados posibles a la solución buscada. Con objeto de medir la calidad de tales aproximaciones introducimos la siguiente:

**Definición 2.1** Un algoritmo de inicialización que proporciona los valores $Y_i^0$, $i = 1, \dots, s$, para comenzar un esquema iterativo que resuelva (4) se dice de orden $p$ cuando éste es el mayor entero tal que

$$\|Y_i - Y_i^0\| = O(h^{p+1}), \quad h \to 0, \quad i = 1, \dots, s,$$

para todo PVI (2).

# 3. Inicializadores sin costo adicional

Se consideran valores iniciales obtenidos a partir de expresiones del tipo

$$\widehat{Y}_i^0 = y_0 + h\sum_{j=1}^{s} b_{ij} F(Y_j), \quad i = 1, \ldots, s, \tag{5}$$

en las que los parámetros a determinar son los coeficientes $b_{ij}$ que dependerán de la razón de paso $r$. Su obtención se hará intentando que la aproximación inicial tenga el mayor orden posible respecto de la correspondiente etapa que deseamos calcular. Para su estudio tendremos en cuenta los siguientes resultados cuya demostraciones, al igual que las de otros presentados en este trabajo, serán objeto de una publicación posterior.

**Proposición 3.1** *Para el algoritmo (5) y denotando* $\hat{b}_i^\top = (b_{i1}, \ldots, b_{is}) \in \mathbb{R}^s$, *se tiene:*

a) *Los valores* $\widehat{Y}_i^0$, $i = 1, \ldots, s$ *pueden ponerse*

$$\widehat{Y}_i^0 = B(\omega_i^0, y_0)(h) = \sum_{\substack{\tau \in T \\ \rho(\tau) \geq 0}} \alpha(\tau)\omega_i^0(\tau)\mathsf{F}(\tau)(y_0)\frac{h^{\rho(\tau)}}{\rho(\tau)!}, \quad i = 1, \ldots, s,$$

*con*

$$\begin{cases} \omega_i^0(\emptyset) = 1, \\ \omega_i^0(\tau) = \gamma(\tau)\hat{b}_i^\top \Phi(\tau), \quad \tau \in T, \ \rho(\tau) \geq 1. \end{cases}$$

b) *El orden del algoritmo de inicialización (5) es $p$ si éste es el mayor entero tal que*

$$\tilde{b}_i^\top \widetilde{\Phi}(\tau) - \hat{b}_i^\top \Phi(\tau) = 0, \quad \forall i = 1, \ldots, s, \quad \forall \tau \in T, \ 1 \leq \rho(\tau) \leq p.$$

Recordamos ahora [3] la siguiente definición:

**Definición 3.1** Un método RK se dice que verifica las propiedades $B(p)$ y $C(q)$ cuando sus coeficientes verifican:

$$\begin{array}{rcrcl} B(p) & : & b^\top c^{k-1} & = & \frac{1}{k}, \ k = 1, \ldots, p, \\ C(q) & : & Ac^{k-1} & = & \frac{c^k}{k}. \ k = 1, \ldots, q. \end{array}$$

Se puede demostrar:

**Teorema 3.2** *Sean (3)-(4) las ecuaciones de un método IRK de $s$ etapas, $s \geq 2$, tal que*

– $c_i \neq c_j \ \forall i \neq j$,

– *verifica las propiedades $B(p)$ y $C(q)$ con $p, q \geq s - 1$.*

*Para este método con paso variable se consideran inicializadores de un paso sin costo adicional del tipo (5) donde los parámetros son los $b_{ij}$ que dependerán de la razón de paso $r$. Entonces:*

a) *El orden máximo que alcanza un inicializador de ese tipo es $s$.*

b) *Existe un único inicializador de orden $s$ del tipo considerado.*

c) *Si el método IRK es de colocación, el único inicializador de orden $s$ del tipo (5) es el que proporciona el polinomio de colocación $u(t) \in \Pi_s(t)$ tal que*

$$\begin{cases} u(t_0 + c_i h) = Y_i, & i = 1, \dots, s, \\ u(t_1) = y_1, \end{cases}$$

*tomando*

$$\widehat{Y}_i^0 = u(t_1 + c_i r h), \quad i = 1, \dots, s.$$

# 4. Inicializadores con una evaluación adicional por paso

Intentando mejorar el orden de los valores iniciales que aproximan las etapas intermedias en cada paso, consideramos inicializadores del tipo

$$\widehat{Y}_i^0 = y_0 + h \left[ b_{i,0} F(y_0) + \sum_{j=1}^{s} b_{i,j} F(Y_j) + b_{i,s+1} F(y_1) \right], \quad i = 1, \dots, s, \tag{6}$$

por lo que necesitamos hacer a lo más una evaluación adicional de función derivada por paso.

Para este tipo de inicializadores se puede dar una propiedad análoga a la Proposición 3.1 y como allí, trataremos de hallar los coeficientes $b_{i,0}, b_{i,1}, \dots, b_{i,s}, b_{i,s+1}$, de modo que la serie de Butcher en $y_0$ que representa a $\widehat{Y}_i^0$ aproxime a la etapa $\widehat{Y}_i$ hasta el mayor orden posible. En este sentido se puede demostrar el siguiente resultado:

**Teorema 4.1** *Sea un método IRK de $s$ etapas cuyos coeficientes están dados en la tabla (1) verificando*

– $c_i \neq c_j \; \forall i \neq j, \; c_i \neq 0 \; \forall i,$

– $B(p), \; p \geq s$ *y* $C(s)$.

*Supuesto que se implementa con paso variable, se consideran para dicho método inicializadores con una evaluación adicional por paso del tipo (6) donde los parámetros $b_{i,j}$ dependerán de la razón de paso $r$. Entonces:*

a) *El orden máximo que alcanza un inicializador de ese tipo es $s + 1$.*

b) *Existen infinitos inicializadores de orden $s + 1$ del tipo que se está considerando.*

# 5. Inicializadores con dos evaluaciones adicionales por paso

Siguiendo con la idea de obtener aproximaciones iniciales de orden superior, se proponen también algoritmos en los que además de evaluar la función derivada en cada punto de la red que se va obteniendo, necesitan hacer otra evaluación en un punto en principio arbitrario. Se trata de determinar los coeficientes $b_{i,j}$, (que dependerán de la razón de paso $r$), junto con $\mu, \mu_0, \mu_1, \ldots, \mu_s, \mu_{s+1}$ de modo que

$$\widehat{Y}_i^0 = y_0 + h\left[b_{i,0}F(y_0) + \sum_{j=1}^{s} b_{i,j}F(Y_j) + b_{i,s+1}F(y_1) + b_{i,s+2}F(Y_\mu)\right], \tag{7}$$

con

$$Y_\mu = y_0 + h\left[\mu_0 F(y_0) + \sum_{j=1}^{s} \mu_j F(Y_j) + \mu_{s+1}F(y_1)\right],$$

aproxime a $\widehat{Y}_i$ hasta el mayor orden posible. Para ello se estudiarán las series de Butcher que representan respectivamente a $\widehat{Y}_i^0$ e $\widehat{Y}_i$ de modo análogo a lo establecido en la Proposición 3.1.

Con objeto de que se simplifique el número de ecuaciones para el estudio del orden del inicializador se impone que

$$(\mu_0, \mu_1, \ldots, \mu_s, \mu_{s+1})\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & c_1 & \cdots & c_1^{s-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & c_s & \cdots & c_s^{s-1} \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \left(\mu, \mu^2/2, \ldots, \mu^s/s\right), \tag{8}$$

y se puede demostrar el siguiente resultado:

**Teorema 5.1** *Sea un método IRK de $s$ etapas cuyos coeficientes dados en la tabla (1) verifican*

– $c_i \neq c_j$ $(i \neq j)$, $c_i \neq 0, 1$ $\forall i$,

– $B(p)$, $p \geq s$ *y* $C(s)$.

*Aplicamos este método con paso variable al problema (2) y consideramos para aquel inicializadores del tipo (7) que necesitan dos evaluaciones adicionales de función por paso. Imponiendo (8) como hipótesis simplificadoras se tiene:*

a) *El máximo orden que puede alcanzar un inicializador del tipo (7) es $s+2$.*

b) *Existen infinitos inicializadores de orden $s+2$ del tipo considerado.*

# 6. Inicializadores para el método RK-Gauss de tres etapas

Las fórmulas de Gauss de $s$ etapas verifican las propiedades $B(2s)$ y $C(s)$ y se les puede aplicar los resultados expuestos anteriormente. Además como es bien sabido, son métodos de colocación.

Estudiando las series de Butcher correspondientes y de acuerdo a los resultados presentados, se han obtenido para la fórmula RK de Gauss de tres etapas los siguientes inicializadores:

- Orden 3 sin costo adicional del tipo (5).
- Orden 4 con una evaluación adicional por paso del tipo (6).
- Orden 5 con dos evaluaciones adicionales por paso del tipo (7).

# 7. Experimentos numéricos

Se ha integrado el problema de los dos cuerpos tomando como condiciones iniciales

$$q_1 = 1 - e, \quad q_2 = 0, \quad p_1 = 0 \quad p_2 = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}},$$

donde $e$ es la excentricidad de la órbita. La función Hamiltoniana es [1]:

$$H(p,q) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}.$$

Su solución es periódica de periodo $2\pi$ y por ello puede medirse fácilmente el error global cometido en la integración numérica tras un múmero entero de periodos.

Este problema se ha integrado con la fórmula de Gauss de tres etapas cuya tabla de coeficientes es [3]:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^{\mathsf{T}} \end{array} \quad = \quad \begin{array}{c|ccc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30} \\ \frac{1}{2} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array}$$

En cada paso se han resuelto las correspondientes ecuaciones implícitas hasta niveles de redondeos utilizando iteración funcional simple.

En la tabla 7.1 se muestra el número de iteraciones por paso que necesitan en promedio cada uno de los inicializadores cuando la excentricidad es $e = 0.5$.

Como se observa, el promedio de iteraciones por paso que necesita cada inicializador es aproximadamente una menos que el inicializador de un orden inferior, y eso mismo ocurre cuando se consideran otras excentricidades. Se confirma además el resultado señalado en [5]:

$$\|Y - Y^{k+1}\| = O(h)\|Y - Y^k\|,$$

donde $Y = (Y_1^\top, \ldots, Y_s^\top)^\top \in \mathbb{R}^{sD}$, $Y^k = ((Y_1^k)^\top, \ldots, (Y_s^k)^\top)^\top \in \mathbb{R}^{sD}$, siendo $Y_i^k$ la aproximación a la $i$-ésima etapa obtenida tras $k$ iteraciones.

| **Pasos/per.** | **Inic. orden 3** | **Inic. orden 4** | **Inic. orden 5** |
|---|---|---|---|
| 32 | 10.91 | 10.09 | 9.13 |
| 64 | 8.28 | 7.33 | 6.61 |
| 128 | 6.41 | 5.41 | 4.76 |
| 256 | 5.18 | 4.19 | 3.65 |
| 512 | 4.46 | 3.46 | 2.42 |
| 1024 | 3.56 | 2.56 | 1.50 |
| 2048 | 3.20 | 2.20 | 1.23 |

Tabla 7.1: $e$=0.5, iteraciones por paso

En las tablas 7.2, 7.3 y 7.4 se muestran, respectivamente para las excentricidades $e = 0.1, 0.5$ y $0.9$, el número de evaluaciones de función derivada calculadas tras finalizar el primer periodo con cada inicializador.

| **Pasos/per.** | **Inic. orden 3** | **Inic. orden 4** | **Inic. orden 5** |
|---|---|---|---|
| 16 | 720 | 697 | 667 |
| 32 | 1038 | 983 | 912 |
| 64 | 1587 | 1465 | 1318 |
| 128 | 2454 | 2201 | 1974 |
| 256 | 3849 | 3340 | 2836 |
| 512 | 6330 | 5309 | 4338 |
| 1024 | 10854 | 8809 | 6703 |
| 2048 | 18441 | 14351 | 10257 |

Tabla 7.2: $e$=0.1, evaluaciones de función tras un periodo

| **Pasos/per.** | **Inic. orden 3** | **Inic. orden 4** | **Inic. orden 5** |
|---|---|---|---|
| 16 | 747 | 733 | 706 |
| 32 | 1047 | 1001 | 939 |
| 64 | 1590 | 1471 | 1396 |
| 128 | 2460 | 2207 | 2082 |
| 256 | 3978 | 3472 | 3316 |
| 512 | 6843 | 5822 | 4734 |
| 1024 | 10932 | 8887 | 6646 |
| 2048 | 19647 | 15554 | 11667 |

Tabla 7.3: $e$=0.5, evaluaciones de función tras un periodo

| **Pasos/per.** | **Inic. orden 3** | **Inic. orden 4** | **Inic. orden 5** |
|---|---|---|---|
| 512 | 6756 | 5756 | 4980 |
| 1024 | 11253 | 9220 | 7453 |
| 2048 | 18729 | 14681 | 12456 |
| 4096 | 30639 | 22459 | 22657 |
| 8192 | 54939 | 38549 | 43026 |

Tabla 7.4: $e$=0.9, evaluaciones de función tras un periodo

Se observa que para $e = 0.1$ y 0.5 siempre compensa en los términos considerados un inicializador sobre otro de orden inferior. Cuando la excentricidad es 0.9, la dificultad del problema obliga a tomar pasos más pequeños que en los casos anteriores para que las iteraciones converjan y el error global se mantenga dentro de unos límites aceptables. Es por eso por lo que un inicializador de orden bajo puede dar menos de 2 iteraciones por paso y puesto que al menos siempre se itera una vez, ya no puede existir esa diferencia aproximada de 1 iteración por paso con respecto a otro inicializador de un orden mayor, lo que lleva a que aquel necesite hacer menos evaluaciones de función derivada.

# 8. Conclusiones

Se ha estudiado la existencia y el orden máximo alcanzable por distintos inicializadores para las ecuaciones implícitas de métodos IRK, con costo adicional o sin él en términos de evaluaciones de la función derivada, bajo ciertas hipótesis sobre los coeficientes del método RK.

Los experimentos numéricos vienen a confirmar que el número de iteraciones por paso en promedio que necesita un inicializador de un cierto orden, es superior al requerido por otro de orden superior. Esto para el problema estudiado y utilizando iteración funcional simple, se traduce en general en una superior eficiencia de los algoritmos de inicialización de mayor orden si se tiene en cuenta el número total de evaluaciones de función derivada.


### Agradecimientos

Deseo agradecer a los profesores Manuel Calvo y Juan I. Montijano sus muy valiosas sugerencias que han contribuído a la elaboración de este trabajo.


# Bibliografía


[1] Arnold, V.I.: Dynamical Systems III. Springer-Verlag, 1987.

[2] Butcher, J.C.: The numerical analysis of ordinary differential equations. Runge–Kutta and general linear methods. John Wiley & Sons, 1987.

[3] Hairer, E., Norsett, S.P., Wanner G.: Solving ordinary differential equations I, nonstiff problems. Springer-Verlag, 1987.

[4] Hairer, Wanner G.: Solving ordinary differential equations II, stiff and differential-algebraic problems. Springer-Verlag, 1991.

[5] Jackson, K.R., Kvaerno, A., Norsett, S.P.: The use of Butcher series in the analysis of Newton-like iterations in Runge-Kutta formulas. Applied Numerical Mathematics 15, 1994, 341-356.

[6] Sanz-Serna, J.M.: Runge–Kutta schemes for Hamiltonian systems. BIT 28, 1988, 877-883.

[7] Sanz-Serna, J.M., Calvo M.P.: Numerical Hamiltonian problems. Chapman & Hall, 1994.