

Algunos resultados sobre métodos de tipo Runge-Kutta

MARI PAZ CALVO

DPTO. DE MATEMÁTICA APLICADA Y COMPUTACIÓN

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

e-mail: maripaz@mac.cie.uva.es

El objetivo de esta comunicación es exponer algunos de los resultados de la investigación que he realizado, gracias a los cuales obtuve el Premio SEMA al joven investigador en su edición de 2000. He querido incluir en el título el término *Runge-Kutta* porque es el elemento unificador de todos mis trabajos, incluidos los más recientes.

Mi investigación se ha desarrollado en el campo de la integración numérica de ecuaciones diferenciales, dentro de lo que se ha llamado posteriormente *integración geométrica*. Más precisamente se ha centrado en el estudio de métodos simplécticos para la integración numérica de sistemas Hamiltonianos de ecuaciones diferenciales ordinarias, sin duda, la familia de integradores geométricos más estudiada.

A partir de 1993, fecha en que visité el Departamento de Matemática Aplicada y Física Teórica de la Universidad de Cambridge, inicié una segunda línea de investigación, también dentro de la integración geométrica, orientada hacia el estudio de métodos numéricos para integrar los llamados flujos isoespectrales.

Más recientemente, y en colaboración con otros miembros del Departamento de Matemática Aplicada y Computación de la Universidad de Valladolid, he comenzado a interesarme por cuestiones relacionadas con la integración temporal de las ecuaciones diferenciales ordinarias que surgen tras la discretización espacial de ecuaciones en derivadas parciales de evolución.

El índice de los temas que voy a tratar es el siguiente:

1. Integración simpléctica de sistemas Hamiltonianos

1.1 Caracterización de métodos de tipo Runge-Kutta simplécticos

1.2 Condiciones de orden para métodos de tipo Runge-Kutta simplécticos

- 1.3 Desarrollo de métodos simplécticos de paso variable
- 1.4 Desarrollo de métodos simplécticos de orden alto
- 1.2 Propagación del error en la integración simpléctica
- 2. Integración numérica de flujos isoespectrales
 - 2.1 Desarrollo de métodos isoespectrales
 - 2.2 Propagación del error en la integración con métodos isoespectrales
- 3. Incursiones en la integración temporal de EDPs de evolución
 - 3.1 Métodos linealmente implícitos para ecuaciones de convección-reacción-difusión
 - 3.2 Reducción de orden para problemas de valores iniciales y en la frontera

1 Integración simpléctica de sistemas Hamiltonianos

Los sistemas Hamiltonianos están relacionados con numerosas ramas de las matemáticas y tienen muchos campos de aplicación (mecánica clásica, estadística y cuántica, óptica, astronomía, dinámica molecular, física de plasmas, etc.). Recordemos que si Ω es un dominio en el espacio orientado \mathbf{R}^{2d} de los puntos $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (p_1, \dots, p_d, q_1, \dots, q_d)$ y $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ es una función real, suficientemente regular definida en Ω , el sistema Hamiltoniano de ecuaciones diferenciales con Hamiltoniano H está dado por

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad i = 1, \dots, d. \quad (1.1)$$

El entero d es el número de grados de libertad y Ω el espacio de las fases. Es bien conocido que dichos sistemas tienen muchas propiedades que no poseen otras ecuaciones diferenciales. Todas estas propiedades son consecuencia del hecho de que el flujo de un sistema Hamiltoniano preserva la estructura simpléctica del espacio de las fases [4]. Cuando un sistema Hamiltoniano es integrado numéricamente, el flujo exacto es reemplazado por una aproximación. Para la mayor parte de los integradores convencionales esta aproximación no es simpléctica y, por tanto, la solución numérica que generan no posee las propiedades características de la solución exacta. Los integradores simplécticos son métodos numéricos especialmente diseñados para la simulación

de sistemas Hamiltonianos y por definición reemplazan el flujo exacto por una aproximación simpléctica. Hasta hace no muchos años los sistemas Hamiltonianos! os eran integrados numéricamente con métodos convencionales, no específicamente contruidos para preservar las ‘propiedades Hamiltonianas’. En los últimos quince años han aparecido multitud de publicaciones relacionadas con la integración simpléctica y se ha constituido así un campo de conocimiento bien definido. Los primeros integradores simplécticos que aparecieron en la literatura estaban basados en funciones generatrices [28] y requerían derivadas de orden alto de la función Hamiltoniana. Esto les hacía, por un lado, de difícil programación para Hamiltonianos generales y, por otro, de implementación sumamente cara. En 1988 F. M. Lasagni, J. M. Sanz-Serna e Y. B. Suris descubrieron (independientemente) que existen métodos Runge-Kutta simplécticos [38, 44, 50]. Este descubrimiento fue importante pues en este tipo de métodos no son necesarias nada más que las derivadas primeras de! 1 Hamiltoniano aunque, como contrapartida, se necesitan varias ! evaluaciones de estas derivadas en cada paso. Hay que notar que los métodos Runge-Kutta simplécticos son necesariamente implícitos y, por tanto, costosos [44]. Para obtener métodos simplécticos y explícitos análogos a los Runge-Kutta es necesario restringir la atención a ciertas familias de sistemas Hamiltonianos.

1.1 Caracterización de métodos de tipo Runge-Kutta simplécticos

En muchas aplicaciones, la función Hamiltoniana tiene la forma

$$H = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p} + V(\mathbf{q}), \quad (1.2)$$

donde M es una matriz constante simétrica e invertible y V una función de d variables. En Mecánica, \mathbf{q} representa las coordenadas Lagrangianas, \mathbf{p} los correspondientes momentos, M es la matriz de masas, $T = (1/2) \mathbf{p}^T M^{-1} \mathbf{p}$ es la energía cinética, V la energía potencial y H la energía total. Cuando la función Hamiltoniana está dada por (1.2), las ecuaciones del movimiento (1.1) se pueden escribir como el sistema d -dimensional de segundo orden

$$M \frac{d^2 \mathbf{q}}{dt^2} = -\nabla V(\mathbf{q}), \quad (1.3)$$

donde ∇ denota gradiente. Aunque (1.3) se puede reescribir como un sistema Hamiltoniano de primer orden y ser integrado numéricamente con un método Runge-Kutta simpléctico, es más conveniente utilizar métodos específicos para problemas de segundo orden [35] que además, en el contexto de la integración simpléctica, pueden aportar la ventaja de ser explícitos. Se eligieron los métodos

Runge-Kutta-Nyström [35] para la integración de (1.3) y en [17] presentamos una demostración rigurosa de la necesidad de las condiciones suficientes de canonicidad para métodos Runge-Kutta-Nyström formuladas por Suris [51]. Este trabajo [17] se enmarca dentro de una línea de investigación que se había iniciado años antes en el Departamento de Matemática Aplicada y Computación de la Universidad de Valladolid, donde previamente se habían establecido las condiciones de canonicidad para métodos Runge-Kutta y Runge-Kutta particionados respectivamente [44, 1]. En esta misma línea se puede incluir también [22], artículo en el que presentamos condiciones necesarias y suficientes para que una B-serie corresponda a un método simpléctico. Una B-serie es una serie formal en la que cada término de la serie aparece asociado a un árbol con raíz. Ejemplos de B-series son el desarrollo del flujo exacto de (1.1) y el desarrollo de la solución numérica de (1.1) que se obtiene con un método Runge-Kutta o con un método Runge-Kutta multiderivada. Cuando las condiciones de canonicidad de [22] se aplican al caso particular de la B-serie generada por un método Runge-Kutta se recuperan las ya conocidas condiciones para que un método Runge-Kutta sea simpléctico [38, 44, 50]. Otra consecuencia de los resultados probados en [22] es la no existencia de métodos Runge-Kutta multiderivada simplécticos [36].

1.2 Condiciones de orden para métodos de tipo Runge-Kutta simplécticos

Es bien conocido que las condiciones que deben satisfacer los coeficientes de un método de tipo Runge-Kutta para tener un orden dado se obtienen comparando los desarrollos de Taylor del método numérico y de la solución exacta. Estas condiciones se pueden escribir de manera sistemática utilizando teoría de grafos, más precisamente, distintos tipos de árboles con raíz (árboles con raíz para métodos Runge-Kutta, árboles bicolor con raíz para métodos Runge-Kutta particionados, árboles especiales de Nyström con raíz para métodos Runge-Kutta-Nyström, etc.).

Cuando se consideran métodos de tipo Runge-Kutta simplécticos, los coeficientes del método deben satisfacer además las correspondientes condiciones de canonicidad. En [46] sus autores probaron que, como consecuencia de estas ligaduras entre los coeficientes, para métodos Runge-Kutta simplécticos algunas condiciones de orden son redundantes. Consideraciones similares se probaron en [1] para métodos Runge-Kutta particionados simplécticos. En [17] probamos que las condiciones que deben satisfacer los coeficientes de un método Runge-Kutta-Nyström para ser simpléctico actúan como *hipótesis simplificadoras* en las condiciones de orden, es decir, pueden usarse para reducir el número de

condiciones (no lineales) que hay que imponer a los coeficientes del método para asegurar un orden dado. Lo que se concluye es que para métodos Runge-Kutta-Nyström simplécticos hay que imponer una condición de orden por cada árbol especial de Nyström en lugar de una condición de orden por cada árbol especial de Nyström con raíz [35]. Se presentaron además en [17] funciones generatrices para el número de condiciones de orden independientes para métodos Runge-Kutta-Nyström generales y simplécticos. En el caso particular de métodos explícitos estos resultados se mejoraron unos años más tarde. Un método Runge-Kutta particionado (RKP) simpléctico y explícito puede interpretarse como un ejemplo de método obtenido por composición [39]. Por tanto, el orden de este tipo de métodos puede estudiarse mediante las habituales condiciones de orden [6], o bien, utilizando el formalismo de Lie [39, 47]. Sin embargo, el número de condiciones de orden presentado en [39] para métodos RKP simplécticos explícitos era menor que el encontrado en [1] para métodos RKP simplécticos generales. En [10] investigamos las condiciones de orden para métodos RKP simplécticos explícitos utilizando las clásicas condiciones de orden asociadas a los árboles bicolor y obtuvimos el mismo número de condiciones de orden que en [39] con el formalismo de Lie. El carácter ! explícito del método actúa reduciendo aún más el número de condiciones de orden independientes que hay que imponer sobre los coeficientes del método. En el caso de métodos Runge-Kutta-Nyström simplécticos explícitos se efectuó un análisis similar y se mejoraron los resultados presentados por McLachlan en [39] utilizando el formalismo de Lie.

1.3 Desarrollo de métodos simplécticos de paso variable

Tras la publicación de las condiciones de canonicidad para los métodos de tipo Runge-Kutta, se comprobó que algunas familias bien conocidas de métodos Runge-Kutta eran simplécticas. Tal es el caso de los métodos de Gauss [44], de algunos métodos de Lobatto y de algunos métodos de Radau. También se desarrollaron algunos métodos simplécticos nuevos (ver [47] y las referencias que allí se citan), aunque todos ellos fueron implementados únicamente con paso fijo.

En [20] (ver también [18], [19]) construimos un par encajado de métodos Runge-Kutta-Nyström explícitos de órdenes 3 y 4. El método de orden 4 es simpléctico, no se deriva de ningún método Runge-Kutta particionado previamente conocido y se construyó para que minimizase los coeficientes del término dominante del desarrollo del error local, siguiendo las ideas apuntadas por Dormand, El-Mikkawy y Prince en la construcción de métodos Runge-Kutta-Nyström convencionales [26]. La construcción del método de orden 3 también se hizo utilizando técnicas de optimización propuestas en [26]. El par encajado de [20] es el primer algoritmo simpléctico de paso variable construido

en la literatura.

Para estudiar la eficiencia del nuevo código, fue utilizado para la integración de diversos sistemas Hamiltonianos, aunque los resultados obtenidos no fueron tan satisfactorios como se esperaba (ver Sección 1.5 para una explicación más detallada). De los experimentos numéricos incluidos en [20] se concluye que el método simpléctico implementado con paso variable presenta un comportamiento más parecido al de códigos de paso variable convencionales que al de la implementación con paso fijo del propio integrador simpléctico. Es más, mientras la implementación con paso variable del método Runge-Kutta-Nyström propuesto en [26] aventaja al correspondiente código con paso fijo, para el método simpléctico es el método implementado con paso fijo el que produce mejores resultados. No obstante, el método Runge-Kutta-Nyström simpléctico de [20] implementado con paso fijo llega a ser más eficiente que el código no simpléctico de [26] implementado con paso variable, para tiempos de integración largos.

El problema de la integración simpléctica con paso variable sin perder el buen comportamiento de los integradores simplécticos de paso fijo fue un problema abierto durante algunos años. En 1997 Hairer [34] y Reich [42] propusieron independientemente una solución a este problema basada en la utilización de transformaciones de Poincaré. Más precisamente, el sistema Hamiltoniano original es transformado en un nuevo sistema Hamiltoniano de modo que integrar el sistema transformado con un método simpléctico con paso fijo es equivalente a integrar con paso variable el sistema original.

En [15] hicimos un estudio comparativo de distintas técnicas que combinan integradores geométricos (simplécticos o reversibles) con la utilización de paso variable. Se concluye que es posible desarrollar códigos simplécticos de paso variable que para problemas Hamiltonianos sean competitivos con software estándar.

Como los métodos simplécticos que se pueden combinar con las técnicas de paso variable antes mencionadas tienen que ser necesariamente implícitos, es importante que la resolución de las ecuaciones no lineales que surgen al aplicar un método Runge-Kutta implícito sea eficiente. En este sentido han aparecido recientemente en la literatura nuevas estrategias para elegir el iterante inicial que reducen el número de iteraciones necesarias en la resolución de las ecuaciones no lineales que definen las etapas [?, 37, 43]. Continuando en esta línea, en [7] proponemos nuevos algoritmos inicializadores de orden alto que utilizados con el método de Gauss de orden 4 hacen del correspondiente código simpléctico de paso variable un integrador competitivo para sistemas Hamiltonianos. Además, los algoritmos que se proponen en [7], aunque se han desarrollado en el contexto

de la integración simpléctica de sistemas Hamiltonianos son también válidos para combinar con métodos Runge-Kutta implícitos generales.

1.4 Desarrollo de métodos simplécticos de orden alto

A pesar de que la implementación con paso variable del método Runge-Kutta-Nyström simpléctico de [20] no resultó tan eficiente como se esperaba, los experimentos de [20] revelaron que en la integración a largo plazo de sistemas Hamiltonianos de la forma (1.3) la implementación con paso fijo de dicho método es más eficiente que el código no simpléctico optimizado de paso variable del mismo orden de [26].

En [21] nos propusimos construir un método Runge-Kutta-Nyström simpléctico y explícito de orden 8 y compararlo con códigos Runge-Kutta-Nyström no simplécticos de paso variable del mismo orden [27]. Hasta ese momento se disponía en la literatura de algún método simpléctico de orden seis [40] y de tres integradores simplécticos explícitos de orden ocho construidos por Yoshida en [53], utilizando el formalismo de Lie.

En [21] probamos en primer lugar que las bien conocidas *hipótesis simplificadoras* para métodos Runge-Kutta-Nyström [35] son compatibles con las condiciones de canonicidad, dando lugar a integradores que se pueden interpretar como métodos de composición [21, 47]. Para estos métodos el número de condiciones de orden independientes que deben satisfacer sus coeficientes es menor que para métodos Runge-Kutta-Nyström simplécticos más generales. Construimos en [21] un método Runge-Kutta-Nyström simpléctico explícito de orden 7, que compuesto con su adjunto da lugar a un método Runge-Kutta-Nyström simpléctico, simétrico y explícito de orden 8. La construcción de dicho método se hizo atendiendo a los criterios de optimización propuestos en [26, 27], de modo que las constantes de error del nuevo método resultaron considerablemente menores que las de los métodos de Yoshida (! ver [21] y [47]). El método así construido se manifestó más eficiente que los integradores simplécticos de [53], pero no es competitivo con el código estándar de paso variable de [27]. La principal razón de la ineficiencia de los integradores simplécticos de orden 8 es el alto número de etapas (y, por consiguiente, de evaluaciones de función) que requieren para que se satisfagan las condiciones de canonicidad.

1.5 Propagación del error en la integración simpléctica

Ya se ha mencionado en la Sección 1.3 que mientras para los integradores convencionales la utilización de paso variable supone una mejora para el método,

para los integradores simplécticos el ir de paso variable a paso fijo se traduce en una pérdida de eficiencia. En esta sección comentamos con un poco más de detalle los resultados que obtuvimos en este sentido y que están recogidos en [20] y [9].

En [20] se estudia por primera vez el efecto de utilizar paso variable en combinación con integradores simplécticos y se da una justificación rigurosa de un conjunto de fenómenos observados en los experimentos numéricos, algunos de ellos ya observados previamente en la literatura. Más precisamente, se integró el problema de Kepler con condiciones iniciales correspondientes a órbitas 2π -periódicas de distintas excentricidades. Se utilizaron métodos Runge-Kutta-Nyström de orden 4, uno simpléctico y el otro no simpléctico y ambos se implementaron tanto con paso fijo como con paso variable. Demostramos que para métodos de orden p , salvo términos $O(h^{2p})$, el error después de integrar durante N periodos crece, en general, cuadráticamente con N . Además, los términos cuadráticos en N aparecen en la dirección tangente a la solución, lo cual corresponde a un error de fase a lo largo de la trayectoria. Como consecuencia, el error en la energía tras integrar durante N periodos es, salvo términos $O(h^{2p})$, N veces el error en la energía después del primer periodo.

En el caso de que el método sea simpléctico y se implemente con paso fijo, los términos que crecen cuadráticamente con N son en sí mismos $O(h^{2p})$, de donde se deduce que, salvo términos $O(h^{2p})$, el error después de integrar durante N periodos crece sólo linealmente con N y que el error en la energía se mantiene acotado (también salvo términos $O(h^{2p})$). El análisis realizado se basa en interpretar formalmente la solución numérica calculada con un método de paso fijo como la solución exacta de una ecuación diferencial perturbada [32, 33] (análisis regresivo). Si la ecuación de partida es Hamiltoniana y el integrador utilizado es un método simpléctico de paso fijo, la ecuación perturbada también es Hamiltoniana [45, 33]. Desgraciadamente, para pasos variables no es válido el mismo argumento.

Las conclusiones de [20] son válidas no sólo para el problema de Kepler, sino para cualquier oscilador no lineal con un grado de libertad.

En [9] probamos que para problemas con soluciones periódicas y para sistemas integrables, el error cuando se integra con métodos simplécticos de paso fijo o con métodos simétricos de paso fijo o paso variable reversible [49] crece sólo linealmente con el tiempo, frente al crecimiento cuadrático observado para integradores convencionales. De nuevo, la herramienta utilizada en las demostraciones es el análisis regresivo de los errores [45, 33].

2 Integración numérica de flujos isoespectrales

Los flujos isoespectrales surgen en ciertos modelos utilizados en dinámica molecular y también están relacionados con diversos problemas de Álgebra Lineal Numérica (ver [23] y los ejemplos allí descritos). La forma general de un flujo isoespectral es una ecuación diferencial matricial

$$L'(t) = [B(L(t)), L(t)], \quad t \geq 0, \quad (2.4)$$

donde $L(0)$ es una matriz real $d \times d$, $B(L)$ es una función matricial de L y $[\cdot, \cdot]$ denota el conmutador de dos matrices. La elección de la matriz $B(L)$ caracteriza la dinámica del flujo $L(t)$. En muchas aplicaciones el dato inicial $L(0)$ es una matriz simétrica y $B(L)$ es antisimétrica, lo que hace que la solución de (2.4) sea simétrica para todo $t \geq 0$. La propiedad que caracteriza a los flujos isoespectrales es que los autovalores de la matriz solución $L(t)$ son independientes del tiempo t [29, 52]. Cuando un flujo isoespectral se integra numéricamente con un método convencional no es cierto, en general, que los autovalores de la solución numérica se mantengan constantes. Un integrador numérico se llama isoespectral cuando al integrar sistemas diferenciales de la forma (2.4), los autovalores de las aproximaciones numéricas que genera coinciden con los autovalores del dato inicial $L(0)$. En [12] probamos, en primer lugar, que los métodos Runge-Kutta no son isoespectrales para $d > 2$. Es cierto que cualquier método Runge-Kutta preserva los invariantes lineales de la solución y que los métodos Runge-Kutta simplécticos conservan además los invariantes cuadráticos [24, 44, 47]. Los métodos Runge-Kutta simplécticos son, por tanto, isoespectrales para $d \leq 2$. Sin embargo, para $d > 2$, la conservación de los autovalores de la solución implica la conservación de ciertos invariantes cúbicos [52] que no son preservados por los métodos Runge-Kutta [12].

El hecho de que los autovalores de la solución de (2.4) sean constantes es crucial, sobre todo en problemas procedentes de Álgebra Lineal Numérica. Ello motivó el que nos planteásemos la construcción de métodos isoespectrales para la integración numérica de (2.4).

2.1 Desarrollo de métodos isoespectrales

Flaschka probó en [29] que la solución del problema (2.4) está relacionada con la solución de los sistemas diferenciales lineales

$$U'(t) = B(L(t))U(t), \quad \text{con } L(t) = U(t)L(0)U^{-1}(t), \quad t \geq 0 \quad (2.5)$$

y

$$V'(t) = -V(t)B(L(t)), \quad \text{con } L(t) = V^{-1}(t)L(0)V(t), \quad t \geq 0. \quad (2.6)$$

La condición inicial es en ambos casos la matriz identidad, lo que hace que $V(t) = U^{-1}(t)$.

Los métodos isoespectrales que proponemos en [12] y [14] están basados en definir las aproximaciones al flujo isoespectral utilizando la contrapartida discreta del formalismo de Flaschka (2.5). Nótese que si L es una matriz simétrica y $B(L)$ es antisimétrica (supuestos frecuentes en las aplicaciones), la solución de (2.5) es ortogonal y $U^{-1}(t)$ puede ser reemplazada por $U^T(t)$, con las consiguientes ventajas desde el punto de vista numérico. Similares consideraciones son válidas para la solución de (2.6).

En [12] proponemos un procedimiento general para la obtención de integradores isoespectrales de orden arbitrariamente alto. La idea es integrar (2.5) con un método unitario, es decir, que preserve el carácter ortogonal de la solución. La versión discreta de (2.5) genera aproximaciones a la solución de (2.4) que, además de ser simétricas si $L(0)$ lo es, van siendo ortogonalmente semejantes al dato inicial y, por tanto, comparten sus autovalores. Como integradores unitarios se eligieron los métodos de Gauss combinados con interpolación de Hermite para aproximar las matrices $B(L(t))$ en los niveles de tiempo en los que son necesarias. En [12] probamos que la interpolación utilizada no afecta al orden del integrador temporal. El precio que hay que pagar es que los esquemas resultantes son necesariamente implícitos.

En [14] presentamos una alternativa que evita el uso de integradores implícitos. En lugar de resolver (2.5) con un método unitario, utilizamos un método arbitrario pero para que las aproximaciones a la solución de (2.4) sigan siendo semejantes es necesario calcular en cada paso la inversa de una matriz $d \times d$. La utilización de métodos no unitarios para la integración de (2.5) supone la pérdida de simetría de la solución numérica aunque la solución exacta sea simétrica. Se pudo conseguir, sin embargo, que dicha falta de simetría no se manifieste (por tener orden superior al del integrador temporal) al ir alternando un paso en la integración numérica de (2.5) con un paso en la integración de la ecuación adjunta (2.6). Dado el carácter lineal de (2.5) y (2.6), se pensó en la utilización de métodos de Taylor para integrar (2.5) y (2.6).

En [11] se caracterizan los flujos ortogonales y se estudia el efecto de utilizar métodos Runge-Kutta para su integración numérica. Como la conservación de la ortogonalidad es equivalente a la preservación de un invariante cuadrático, se concluye que los métodos simplécticos son los candidatos adecuados para la integración de flujos ortogonales. Se estudia también el efecto de considerar la ecuación adjunta de un flujo ortogonal y cómo es posible utilizar integradores no unitarios alternando la integración numérica de (2.5) con la de (2.6) para que no se manifieste (por tener orden superior al del integrador temporal) la no

ortogonalidad de la solución numérica. Estas ideas fueron la base de los métodos iso espectrales semiexplícitos de [14].

2.2 Propagación del error en la integración con métodos iso espectrales

Los métodos iso espectrales propuestos en [12] fueron utilizados para integrar las ecuaciones de la red de Toda [52]. En los experimentos numéricos incluidos en [12] se observa al representar gráficamente la evolución del error con el tiempo que dicho error parece decrecer exponencialmente cuando se utiliza un método iso espectral de segundo orden mientras que se mantiene casi constante cuando se utiliza la regla implícita del punto medio (integrador unitario pero no iso espectral). En los experimentos de [13] se obtienen la mismas conclusiones para métodos de orden más alto. En [13] profundizamos en el estudio de la dinámica de la solución exacta de la red de Toda [25] (convergencia exponencial hacia la matriz diagonal de autovalores) y demostramos que se tiene el mismo comportamiento para las soluciones generadas con integradores numéricos de un paso, ya sean métodos Runge-Kutta o integradores iso espectrales construidos mediante el formalismo de Flaschka. El diferente comportamiento observado es debido únicamente a que el primer integrador es iso espectral mientras que el segundo no lo es. Más precisamente, lo que probamos es que la matriz diagonal hacia la que converge la solución numérica no es la misma en ambos casos. Mientras para métodos iso espectrales dicha matriz diagonal es la matriz de autovalores hacia la que también converge la solución exacta, para integradores convencionales de orden p los elementos diagonales de la matriz límite son sólo aproximaciones de orden p a los autovalores exactos de la matriz inicial. Por tanto, si se está interesado en que los autovalores de la solución numérica coincidan con los de la matriz inicial, es preciso recurrir a métodos iso espectrales aunque sean más costosos.

3 Incursiones en la integración temporal de EDPs de evolución

3.1 Métodos linealmente implícitos para ecuaciones de convección-reacción-difusión

Cuando una ecuación en derivadas parciales de evolución es discretizada en espacio, es preciso integrar numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias resultante. Es bien conocida la ineficiencia de los integradores explícitos para estos fines, dado el carácter rígido de los sistemas diferenciales

que se obtienen. Por otra parte, si se utilizan métodos implícitos hay que resolver las ecuaciones no lineales para lo cual es preciso disponer de buenas aproximaciones de la matriz jacobiana. En el contexto de métodos espectrales, las habituales aproximaciones lineales a la matriz jacobiana no siempre producen los resultados esperados [30].

En [8] superamos estas dificultades proponiendo la utilización de métodos Runge-Kutta linealmente implícitos para la integración temporal de las ecuaciones semidiscretas que aparecen tras la discretización espacial de ecuaciones de convección-reacción-difusión. La idea, ya utilizada antes por otros autores [5], es combinar un método Runge-Kutta implícito para la integración de la parte lineal de la ecuación con un método Runge-Kutta explícito para tratar los términos no lineales de la misma. Estudiamos las propiedades de estabilidad de los nuevos métodos, dando una extensión adecuada del concepto de L -estabilidad. Construimos dos métodos Runge-Kutta linealmente implícitos de paso variable de órdenes 3 y 4 respectivamente. Aunque esta clase de métodos ya había sido considerada [5], no existían implementaciones de paso variable en la literatura. Además, los métodos propuestos en [8] tienen propiedades de estabilidad más adecuadas a los problemas que se quieren resolver que los esquemas del mismo tipo ya existentes. Los métodos propuestos se utilizaron para la integración de la ecuación de Burgers con distintos valores del parámetro de difusión y también para integrar una ecuación de reacción-difusión en un dominio bidimensional. Las propiedades de estabilidad de los nuevos métodos los hacen competitivos frente a unas fórmulas BDF de orden y paso variables.

3.2 Reducción de orden para problemas de valores iniciales y en la frontera

Otro de los problemas que surge en la integración temporal de las ecuaciones diferenciales ordinarias obtenidas tras la discretización espacial de ecuaciones en derivadas parciales de evolución es el de la reducción de orden cuando se utilizan métodos Runge-Kutta. Es bien conocido que al integrar problemas de valores iniciales y en la frontera con un método Runge-Kutta de orden p , el orden de convergencia está gobernado no por el orden clásico del método Runge-Kutta, sino por el llamado orden de las etapas. El problema de la reducción de orden ha sido estudiado por diversos autores [2, 3, 41, 48] que han sugerido diferentes soluciones. En [16] proponemos una nueva estrategia para evitar la reducción de orden de los métodos Runge-Kutta cuando se utilizan para integrar numéricamente problemas lineales, autónomos, no homogéneos de valores iniciales y en la frontera. La idea básica es la siguiente. La solución del problema original se descompone en suma de dos términos, uno de ellos

computable en función de los datos del problema y el otro, solución de un problema de valores iniciales adecuado que no se ve afectado por la reducción de orden. La estrategia propuesta se puede aplicar tanto al problema semidiscreto como al totalmente discreto, consiguiendo con ello el orden completo tanto en espacio como en tiempo. Además, puede combinarse con discretizaciones espaciales convencionales (diferencias finitas o elementos finitos), a diferencia de lo que sucede con otros enfoques aparecidos previamente en la literatura. Presentamos también en [16] resultados numéricos que ponen de manifiesto que con la estrategia propuesta se puede recuperar el orden clásico del método Runge-Kutta.

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento al Profesor J. M. Sanz-Serna por iniciarme en la investigación e influir tan positivamente en mi trayectoria profesional y también a todos los matemáticos con los que he colaborado durante estos años.

Referencias

- [1] L. Abia & J. M. Sanz-Serna, *Partitioned Runge-Kutta methods for separable Hamiltonian problems*, Math. Comput. 60 (1993), 617–634.
- [2] I. Alonso-Mallo, *Explicit single step methods with optimal order of convergence for partial differential equations*, Appl. Numer. Math. 31 (1999), 117–131.
- [3] I. Alonso-Mallo & C. Palencia, *Optimal orders of convergence in Runge-Kutta methods for linear, non-homogeneous PDEs with singular source terms*, preprint.
- [4] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics, 2nd edition*, Springer, New York, 1989.
- [5] U. M. Ascher, S. J. Ruuth & R. J. Spiteri, *Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential equations*, Appl. Numer. Math. 25 (1997), 151–167.
- [6] J. C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations. Runge-Kutta and General Linear Methods*, John Wiley, Chichester, 1982.
- [7] M. P. Calvo, *High order initial iterants for implicit Runge-Kutta methods: an improvement for variable-step symplectic integrators*, aceptado en IMA J. Numer. Anal.

- [8] M. P. Calvo, J. de Frutos & J. Novo, *Linearly implicit Runge-Kutta methods for advection-reaction-diffusion equations*, aceptado en Appl. Numer. Math.
- [9] M. P. Calvo & E. Hairer, *Accurate long-term integration of dynamical systems*, Appl. Numer. Math. 18 (1995), 95–105.
- [10] M. P. Calvo & E. Hairer, *Further reduction in the number of independent order conditions for symplectic, explicit Partitioned Runge-Kutta and Runge-Kutta-Nyström methods*, Appl. Numer. Math. 18 (1995), 107–114.
- [11] M. P. Calvo, A. Iserles & A. Zanna, *Runge-Kutta methods for orthogonal and isospectral flows*, Appl. Numer. Math. 22 (1996), 152–163.
- [12] M. P. Calvo, A. Iserles & A. Zanna, *Numerical solution of isospectral flows*, Math. Comput. 66 (1997), 1461–1486.
- [13] M. P. Calvo, A. Iserles & A. Zanna, *Conservative methods for the Toda lattice equations*, IMA J. Numer. Anal. 19 (1999), 509–523.
- [14] M. P. Calvo, A. Iserles & A. Zanna, *Semi-explicit methods for isospectral flows*, aceptado en Adv. Comp. Math.
- [15] M. P. Calvo, M. A. López-Marcos & J. M. Sanz-Serna, *Variable step implementation of geometric integrators*, Appl. Numer. Math. 28 (1998), 1–16.
- [16] M. P. Calvo & C. Palencia, *Avoiding the order reduction of Runge-Kutta methods for linear initial boundary value problems*, aceptado en Math. Comput.
- [17] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *Order conditions for canonical Runge-Kutta-Nyström methods*, BIT 32 (1992), 131–142.
- [18] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *Variable steps for symplectic integrators*. En Numerical Analysis 1991, Griffiths, D. F. and Watson, G. A. eds., Longman, London, 1992.
- [19] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *Reasons for a failure. The integration of the two-body problem with a symplectic Runge-Kutta-Nyström code with stepchanging facilities*. En Equadiff 91, Perelló, C., Simó, C. y Sola-Morales, J. de eds., World Scientific, Singapore, 1993.

- [20] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *The development of variable step symplectic integrators, with application to the two-body problem*, SIAM J. Sci. Comput. 14 (1993), 936–952.
- [21] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *High order symplectic Runge-Kutta-Nyström methods*, SIAM J. Sci. Comput. 14 (1993), 1237–1252.
- [22] M. P. Calvo & J. M. Sanz-Serna, *Canonical B-series*, Numer. Math. 67 (1994), 161–175.
- [23] M. T. Chu, *A list of matrix flows with applications*. En Hamiltonian and Gradients Flows, Algorithms and Control, A. Bloch ed., Fields Institute Communications, Amer. Math. Soc., 1994.
- [24] G. J. Cooper, *Stability of Runge-Kutta methods for trajectory problems*, IMA J. Num. Anal. 7 (1987), 1–13.
- [25] P. Deift, T. Nanda & C. Tomei, *Ordinary differential equations and the symmetric eigenvalue problem*, SIAM J. Numer. Anal. 20 (1983), 1–22.
- [26] J. R. Dormand, M. E. A. El-Mikkawy & P. J. Prince, *Families of Runge-Kutta-Nyström formulae*, IMA J. Numer. Anal. 7 (1987), 235–250.
- [27] J. R. Dormand, M. E. El-Mikkawy and J. P. Prince (1987b), *High-order embedded Runge-Kutta-Nyström formulae*, IMA J. Numer. Anal. 7 (1987), 423–430; Corrigendum in 11, pp. 297.
- [28] K. Feng, *Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry*, J. Comput. Math. 4 (1986), 279–289.
- [29] H. Flaschka, *The Toda lattice*, Phys. Rev. B 9 (1974), 1924–1925.
- [30] J. de Frutos & J. Novo, *Linearly implicit Runge-Kutta methods for advection-reaction-diffusion equations*, Appl. Numer. Math. 33 (2000), 217–223.
- [31] S. González-Pinto, J. I. Montijano & S. Pérez-Rodríguez, *On the starting algorithms for fully implicit Runge-Kutta methods*, BIT 40 (2000), 685–714.
- [32] D. F. Griffiths & J. M. Sanz-Serna, *On the scope of the method of modified equations*, SIAM J. Sci. Comput. 7 (1986), 994–1008.
- [33] E. Hairer, *Backward analysis of numerical integrators and symplectic methods*, Annals of Numerical Mathematics 1 (1994), 107–132.

- [34] E. Hairer, *Variable time step integration with symplectic methods*, Appl. Numer. Math. 25 (1997), 219–227.
- [35] E. Hairer, S. P. Norsett & G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems, 2nd edition*, Springer, Berlin, 1993.
- [36] E. Hairer, A. Murua & J. M. Sanz-Serna, *The non-existence of symplectic multi-derivative Runge-Kutta methods*, BIT 34 (1994), 80–87.
- [37] M. P. Laburta, *Starting algorithms for IRK methods*, J. Comput. Appl. Math. 83 (1997), 269–288.
- [38] F. M. Lasagni, *Canonical Runge-Kutta methods*, Z. Angew. Math. Phys. 39 (1988), 952–953.
- [39] R. I. McLachlan, *On the numerical integration of ordinary differential equations by symmetric composition methods*, SIAM J. Sci. Comput. 16 (1995), 151–168.
- [40] D. Okunbor & R. D. Skeel, *Canonical Runge-Kutta-Nyström methods of orders five and six*, J. Comput. Appl. Math. 51 (1994), 375–382.
- [41] D. Pathria, *The correct formulation of intermediate boundary conditions for Runge-Kutta time integration of initial boundary value problems*, SIAM J. Sci. Comput. 18 (1997), 1255–1266.
- [42] S. Reich, *Backward error analysis for numerical integrators*, SIAM J. Numer. Anal. 36 (1999), 1549–1570.
- [43] T. Roldán & I. Higuera, *IRK methods for DAEs: Starting algorithms*, J. Comput. Appl. Math. 111 (1999), 77–92.
- [44] J. M. Sanz-Serna, *Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems*, BIT 28 (1988), 877–883.
- [45] J. M. Sanz-Serna, *Symplectic Integrators for Hamiltonian problems: an overview*, Acta Numerica 1 (1992), 243–286.
- [46] J. M. Sanz-Serna & L. Abia, *Order conditions for canonical Runge-Kutta schemes*, SIAM J. Numer. Anal. 28 (1991), 1081–1096.
- [47] J. M. Sanz-Serna & M. P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall, London, 1994.

- [48] J. M. Sanz-Serna, J. G. Verwer & W. H. Hundsdorfer, *Convergence and order reduction of Runge-Kutta schemes applied to evolutionary problems in partial differential equations*, Numer. Math. 50 (1986), 405–418.
- [49] D. Stoffer, *Variable steps for reversible integration methods*, Computing 55 (1995), 1–22.
- [50] Y. B. Suris, *Preservation of symplectic structure in the numerical solution of Hamiltonian systems*. En Numerical Solution of Differential Equations, Filippov, S. S. ed. Akad. Nauk. SSSR, Inst. Prikl. Mat., Moscow, 1988 (in Russian).
- [51] Y. B. Suris, *The canonicity of mappings generated by Runge-Kutta type methods when integrating the systems $x'' = -\partial U/\partial x$* , U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys. 29 (1989), 138–144.
- [52] M. Toda, *Theory of Nonlinear Lattices*, Springer-Verlag, Berlin (1981).
- [53] H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*, Phys. Lett. A 150 (1990), 262–268.