

SOLUCION NUMERICA DE PROBLEMAS DE FRONTERA
ORDINARIOS MEDIANTE METODOS GLOBALES

V. Pereyra y R.D. Russell

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE COMPUTACION
CARACAS.

Department of Mathematics, Simon Fraser Univ.
Burnaby, B.C. CANADA.

*Actas, Panel '80, VII Conf. Latinoamericana
de Informatica, 420-426 (1980)*

1. INTRODUCCION

Los autores de esta nota son individualmente coautores de dos programas para resolver problemas de frontera para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales. Estos programas son respectivamente: COLSYS (Ascher, Christiansen y Russell [1979]) y PASVA3 (Lentini y Pereyra [1974]).

En la solución numérica de estos problemas se distinguen dos clases - de métodos básicos que denominaremos "de valores iniciales" y "globales". Los métodos de valores iniciales están basados en variantes del método balístico ("Shooting") y hay varias implementaciones disponibles (Bulirsch, Stoer y Deuflhard [1979]), England, Nichols y Reid [1973] , Gladwell [1978] , Scott y Watts [1975] . Los métodos globales, de los que nos ocuparemos mas en detalle, no utilizan el Software disponible para problemas de valores iniciales, sino que resuelven grandes sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. En general son mas estables numéricamente, mas complejos de implementar y presentan una serie de nuevos problemas que recién ahora se están empezando a resolver.

Entre estos problemas podemos mencionar: la solución de los sistemas de ecuaciones esparcidas resultantes, la elección automática de redes ó puntos de discretización, estimación de errores y mejoramiento de las tasas de convergencia, entre otros.

En las secciones 2 y 3 describiremos brevemente los dos programas, indicando lo que pensamos son sus puntos fuertes y sus debilidades.

El objetivo real de este trabajo es el de realizar comparaciones entre estos dos programas en una amplia gama de problemas, bajo condiciones supervisadas por los autores y con objetivos en los que éstos están de acuerdo a priori. En este sentido, éste es probablemente el primer proyecto de comparación de Software matemático que se realiza bajo estas condiciones y esperamos tener para la fecha del Simposio algunos resultados preliminares que reportar.

2. PASVA3: UN PROGRAMA ADAPTATIVO EN DIFERENCIAS FINITAS PARA RESOLVER PROBLEMAS DE FRONTERA.

La serie de programas PAS___ comenzó en 1973 con el Trabajo de grado de M. Lentini [1973] . Una versión mejorada y con resultados adicionales fué publicada luego en Lentini y Pereyra [1974] . Este programa se aplica a sistemas de primer orden de la forma.

$$(2.1a) \quad y' = f(t,y) \quad , \quad t \in [a,b] \quad ,$$

$$(2.1b) \quad B_a y(a) + B_b y(b) = c$$

$y, f, c \in \mathbb{R}^n$, B_a, B_b matrices de $m \times m$, y extiende las ideas de Pereyra [1973a].

Se supone aquí que los datos son bastante regulares.

En versiones posteriores (Lentini y Pereyra [1974b, 1977], Pereyra [1973b, 1976, 1977, 1978]) se introdujeron considerables mejoras y en particular se amplió la clase de problemas al permitir condiciones de frontera no lineales de la forma

$$(2.1c) \quad g(y(a), y(b)) = 0.$$

PASVA3 es la versión oficial mas reciente de esta familia de programas basados en diferencias finitas sobre redes de puntos no necesariamente uniformemente espaciados. El método básico es la regla de los trapecios, que ha sido cuidadosamente analizado por H.B. Keller [1974]. Se consigue un orden de convergencia variable en forma adaptativa por medio del método de correcciones diferidas (Pereyra [1967, 1968]) y las redes de puntos se eligen también en forma adaptativa por medio de la equidistribución asintótica del error local de truncamiento (Pereyra y Sewell [1975]). Otra de las importantes características de este programa es que produce estimaciones asintóticas del error global de truncamiento muy precisas.

En Pereyra [1979] damos mas detalles históricos y técnicos sobre el desarrollo de este programa y también un recetario de métodos para reducir un número de problemas distintos a la forma (2.1a) - (2.1c). Estas reducciones se han utilizado en muchas aplicaciones (Concus y Pereyra [1978], Pereyra, Lee y Keller [1977], Pereyra, Keller y Lee [1979], Pereyra [1979], Wilts [1979], Lentini y Keller [1979a, 1979b], Lentini [1979]), y aunque valiosas en términos del aprovechamiento del Software disponible, se ha llegado a la conclusión de que en algunos casos hacen un uso ineficiente de las técnicas involucradas (Keller y Pereyra [1979]). Para corregir esta situación Lentini y Pereyra están desarrollando una nueva generación de la serie, llamada PASVA4. PASVA4 podrá resolver mas eficientemente que PASVA3 problemas con saltos discontinuos en f ó en $y(t)$, en posiciones conocidas o desconocidas, problemas con parámetros y ecuaciones algebraicas, problemas de autovalores no lineales, cálculo de diagramas de bifurcación, continuación y homotopía, etc.

Finalmente deseamos indicar que desarrollos teóricos recientes (Lentini [1978], Lentini y Keller [1979]) han permitido ampliar aún más la aplicabilidad de estas técnicas, al dar mecanismos seguros y confiables para replantear problemas con singularidades y en intervalos infinitos en la forma (2.1a) - (2.1c). Otras aplicaciones de PASVA se encuentran en ref [48-51].

3. COLSYS: UN PROGRAMA BASADO EN COLOCACION CON SPLINES PARA RESOLVER PROBLEMAS DE FRONTERA.

Una primera versión de COLSYS fué publicada en Ascher, Christiansen y Russell [1977], mientras que la forma "oficial" definitiva aparecerá en Ascher, Christiansen y Russell [1979]. Este programa resuelve sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de orden superior, de la forma

$$(3.1) \quad y_i^{(m_i)}(t) = f_i(t, y_1, \dots, y_1, \dots, y_d, \dots, y_d) \\ = f_i(t, z(y)), \quad t \in [a, b], \\ i = 1, \dots, d$$

con condiciones separadas multipuntuales de la forma

$$(3.2) \quad g_j(t_j, Z(y(t_j))) = 0, \quad 1 \leq j \leq m^* = \sum_{n=1}^d m_n,$$

usando un método de colocación de orden fijo.

Aunque muy reciente, la aparición de este programa culmina un trabajo de investigación considerable, ya que el análisis teórico de métodos de elementos finitos ha llegado a un estado bastante avanzado; ver por ejemplo para la teoría de colocación con splines Russell y Shampine [1972], de Boor y Swartz [1973], Russell [1974], y Cerrutti [1974].

Argumentos de complejidad muestran que de entre los métodos de elementos finitos, el de colocación es el más eficiente para ecuaciones diferenciales ordinarias. Para poder competir con los métodos en diferencias finitas actualmente implementados, la forma de orden superior (3.1) es deseable (Russell [1976, 1977]).

Además de considerar esta forma general, COLSYS es el primer programa de elementos finitos que tiene ciertas características de índole práctica, tales como la selección adaptativa de la red, estimación del error y una estrategia sofisticada para la resolución de las ecuaciones no lineales.

Estas estrategias están basadas en un análisis teórico cuidadoso (C. de Boor [1973], Pereyra y Sewell [1975], Christiansen y Russell [1978], Deuflhard [1974]).

Los autores han prestado especial atención a estos detalles con el objeto de que COLSYS sea capaz de resolver problemas difíciles.

Como PASVA3, la robustez de COLSYS ha hecho que éste tenga éxito en un número de problemas prácticos, de entre los que podemos mencionar: combustión química Smooke [1979], asignación de recursos Ascher y Wan [1979], mecánica de fluidos Miura [1979], perturbaciones singulares y muchas otras áreas Ascher, Christiansen y Russell [1978], Ascher [1979].

Hay características básicas de COLSYS que están todavía siendo investigadas y que pueden ocasionar cambios en el futuro. Por ejemplo, el uso de bases de spline diferentes de las B-splines que se utilizan corrientemente (de Boor [1977], Ascher y Russell [1977]), un método de Gauss más eficiente usando eliminación alternada por filas y columnas (Varah [1976]) y la capacidad de resolver problemas más generales (por ejemplo, con condiciones de frontera no separadas).

Sin embargo, las versiones actuales de COLSYS y PASVA3 son ambas suficientemente estables y han sido ampliamente diseminadas, como para que una comparación de sus méritos relativos sea muy bienvenida por la comunidad. Esperamos reportar los resultados de esta comparación en un futuro cercano.

REFERENCIAS

1. Ascher, U. "Solving BVP's with a Spline Collocation Code", a publicarse en J. Comp. Physics.
2. Ascher, U., J. Christiansen y R.D. Russell "A collocation solver for mixed order systems of boundary value problems", Comp. Sc. Rep., Univ. British Col. (1977). Math. Comp. 33: 659-679 (1978).
3. _____ "COLSYS - A collocation code for boundary value problems". Proc. Working Conf. Codes BVP in ODE'S, - 1978. Lecture Notes Comp. Sc., 76: 164-185 (1979) Springer - Verlag, Berlin.
4. _____ "Collocation Software for boundary value problems", 1979. Aparecerá en Trans. Math. Software.
5. Ascher, U. y R.D. Russell "Evaluation of B_Splines for solving systems of BVP's", Comp. Sc. Tech. Rep., Univ. British Col. (1977).
6. Ascher, U. y F.Y.M. Wan "Numerical Solutions for maximun sustainable consumption growth with a multi-grade exhaustible resource", IMAS Tech. Rep. 79-25, Univ. British Col. (1979).
7. Bulirsch, R., J. Stoer y P. Deuflhard "Numerical Solution of Nonlinear 2 PBVP I", a publicarse en Numer. Math. Handbook Series Approximation.
8. Cerrutti, J., "Collocation for systems of ordinary differential equations", Comp. Sci. Tech. Rep. 230. Univ. Wisconsin. Madison (1974).
9. Christiansen, J. y R.D. Russell "Error analysis for spline collocation - methods with application to knot selection", Math. Comp. 32: 415-419 (1978).
10. Concus, P. y V. Pereyra "A Software package for calculating axisymmetric - menisci". Laurence Berkeley Lab. Rep. 8700 (1978).
11. De Boor, C. "Good approximation by splines with variable knots II", Springer Lect-Notes Math. 363 (1973).
12. De Boor, C. "Package for collocation with B-splines", SIAM J. Numer. Anal. 14: 441-472, (1977).
13. De Boor, C. y B. Swartz, "Collocation at Gaussian points", SIAM J. Numer. Anal. 10: 582-606 (1973).
14. Deuflhard, P. "A modified Newton method for the solution of ill - conditioned systems of nonlinear equations with application to multiple shooting" Num. Math. 22: 289-315 (1974).
15. England, R., N. Nichols y J. Reid, "Subroutine DDO3AD", Harwell Lab. -- Scient. Subr. Library (1973).
16. Gladwell, I. "The development of the B.V. codes in the ODE Chapter of the NAG Library", Numer. Anal. Rep. N° 30, Univ. of Manchester (1978).
17. Keller, H.B. "Accurate finite difference methods for nonlinear two-point - boundary value problems", SIAM J. Numer. Anal. 11: 305-320 (1974).

18. Keller, H.B. y V. Pereyra "Difference methods and deferred corrections for ordinary boundary value problems", SIAM J. Numer. Anal. 16: 241-259 (1979).
19. Lentini, M. "Correcciones diferidas para problemas de contorno en sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden", Pub. 73-04, Depto. de Comp., Fac. de Ciencias, UCV Venezuela (1973).
20. _____ "Numerical solution of the beam equation with non uniform foundation coefficient", J. App. Mech. Trans ASME 79-WA/APM-7 (1979).
21. _____ "Boundary-value problems over semi-infinite intervals". Ph D. Thesis, California Institute of Technology, Pasadena (1978).
22. Lentini, M. y H.B. Keller, "The von-Kármán swirling flows", a publicarse en SIAM J. App. Math.
23. _____ "Boundary-value problems over Semi-infinite intervals", a publicarse en SIAM J. Numer. Anal.
24. Lentini, M. y V. Pereyra, "A variable order finite difference method for nonlinear multipoint boundary value problems", Math. Comp. 28: 981-1003 (1974a).
25. _____ "Boundary problem solvers for first order systems based on deferred corrections", Proc. NSF Symp. on Numer. Sol. of Bound. Problems, Univ. Maryland, Baltimore Co. (1974).
26. _____ "An adaptive finite difference solver for nonlinear two-point boundary problems with mild boundary layers", SIAM J. Numer. Anal. 14: 91-111 (1977).
27. Miura, R.M., "Accurate computation of travelling wave solutions: I The Fitzhugh - Nagumo equations - Stable solitary waves", Techn. Rep. Univ. British Col. (1979).
28. Pereyra, V. "Iterated deferred corrections for nonlinear operator equations", Numer. Math. 10: 316-323 (1967).
29. _____ "Iterated deferred corrections for nonlinear boundary value problems", Numer - Math. 11: 111-125 (1968).
30. _____ "High order finite difference solution of differential equations", STAN-CS-73-348, Stanford Univ., California (1973a).
31. _____ "Variable order variable step finite difference methods for nonlinear boundary value problems", Proc. Conf. Numer. Sol. Diff. Equts., Dundee, Scotland. Springer-Verlag, Berlin (1973b).
32. _____ "A one-step 4k order method for nonlinear two-point boundary value problems", 733th Meeting. AMS, Urbana, Ill. (1976).
33. _____ "Algorithms for solving two-point boundary value problems", Proc. Symp. High Speed Comp. Alg. Organization Urbana, Ill. (Ed. D.J. Kuck et al), Academic Press, New York (1977).
34. _____ "PASVA3: An adaptive Finite difference FORTRAN program for first order, nonlinear, ordinary boundary problems", Proc. Working Conf. Codes BVP in ODE's, 1978. Lecture Notes in Comp. Sc., 76: 67-88 (1979) Springer - Verlag, Berlin.

35. _____ "Solución numérica de ecuaciones diferenciales con valores de frontera", Acta Cient. Venezolana 30: 7-22 (1979).
36. _____ "Two-point ray tracing in heterogeneous media and the inversion of travel time data", Trabajo invitado, IV Symp. Intern. Comp. - Methods App. Sc. Engineering, Paris (1979).
37. Pereyra, V., W.H.K. Lee y H.B. Keller "Solving two-point seismic ray tracing problems in a heterogeneous medium", A publicarse en Bull. Amer. - Seism. Soc.
38. Pereyra, V., H.B. Keller y W.H.K. Lee "Computational methods for inverse problems in geophysics: Inversion of travel time observations". A publicarse en Physics of the Earth and Planetary Interiors (1979).
39. Pereyra, V. y G. Sewell "Mesh Selection for discrete solution of BVP in ODE's", Numer. Math. 23: 261-268 (1975).
40. Russell, R.D., "Collocation for systems of boundary value problems", Numer. Math. 23: 119-133 (1974).
41. _____ "Efficiencies of B-splines for solving differential equations", Proc. 5 th. Conf. Num. Math. Manitoba: 599-617 (1975).
42. _____ "A comparison of collocation and finite differences for 2 PBVP's", SIAM J. Numer. Anal. 14: 19-39 (1977).
43. Russell, R.D., y L.F. Shampine, "A collocation method for boundary value problems", SIAM J. Numer. Anal. 19: 1-28 (1972).
44. Scott, M. y B. Watts, "SUPPORT - A computer code for 2 PBVP via orthonormalization", SAND 75-0198, Sandia Labs. Albuquerque, N.M. (1975).
45. Smooke, M. Comunicación personal sobre uso de COLSYS en un problema de mejora de la combustión en un motor de explosión para reducir la contaminación. Sandia Livermore Labs. (1979).
46. Varah, J. "Alternate row and column elimination for solving certain linear systems", SIAM J. Numer. Anal. 13: 71-75 (1976).
47. Wilts, C., Comunicación personal sobre uso de PASVA3 en el diseño de memorias de burbujas y la teoría física de grabado en películas delgadas. Caltech (1979).
48. Jackson, G. "Assessment of alternative Ocean sludge disposal practices", Open file Rep. 77-9, Env. quality Lab., Caltech (1977).
49. Roos, J.P., Akzo Res. Labs. Arnhem, Holanda. Comunicación personal sobre varios problemas técnicos resueltos con SYSSOL y PASVAR (1976).
50. Van Kats J.M. y H.A. Van der Vorst "Test of the FORTRAN IV subroutine - TWOPNT (SYSSOL) for solving nonlinear two-point boundary value problems", TR-5, Academ. Comp. Centrum Utrecht, Holanda (1977).
51. Rinzel, J. y R.N. Miller "Numerical calculation of stable and instable periodic solutions to the Hodgkin-Huxley equations", A publicarse en - Math. Biosc. (1979).