

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1985

00.85.02

CNEA-NT 17/85

REPUBLICA ARGENTINA
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Dependiente de la Presidencia de la Nación
DIRECCION DE PLANIFICACION, COORDINACION Y CONTROL

UNA COMPARACION DE RUTINAS PARA INTEGRAR SISTEMAS DE ECUACIONES
DIFERENCIALES ORDINARIAS BASADAS EN METODOS DE UN SOLO PASO Y
METODOS DE PASO MULTIPLE DISPONIBLES EN LA COMISION NACIONAL DE
ENERGIA ATOMICA

Viviana VISCONTI

Buenos Aires

1985

UNA COMPARACION DE RUTINAS PARA INTEGRAR SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS BASADAS EN METODOS DE UN SOLO PASO Y METODOS DE PASO MULTIPLE DISPONIBLES EN LA COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA.

Viviana VISCONTI
Centro de Cálculo Científico
Comisión Nacional de Energía Atómica
1429 Buenos Aires, Argentina

RESUMEN

Se presenta un análisis comparativo relativo a la eficiencia en tiempo de resolución por computación de rutinas de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias aplicadas a sistemas no rígidos y sistemas rígidos, resolubles los primeros ya sea por métodos de Runge-Kutta o de un solo paso o por métodos de paso múltiple de tipo predictor-corrector, y los segundos por métodos de paso múltiple ad-hoc.

Se presentan para ambos casos (sistemas rígidos y sistemas no rígidos), las ecuaciones planteadas, los resultados obtenidos con la utilización de las distintas rutinas para su resolución y los códigos FORTRAN usados. Finalmente, se exponen las conclusiones alcanzadas.

ABSTRACT

A comparative analysis of ODE codes relative to efficiency in computing time is presented. The codes are applied to non-stiff and stiff systems. The former are solved with one-step Runge-Kutta and predictor-corrector methods while in the later predictor-corrector methods are used.

For non-stiff and stiff problems the equations and numerical results obtained for the different codes used are presented together with FORTRAN listings. Finally some general conclusions are drawn.

INTRODUCCION

Problemas que involucran sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias aparecen al modelar muchos fenómenos físicos sea directamente o indirectamente. Por ejemplo, modelos químicos cinéticos llevan directamente a sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias que son rígidos o stiff. Se llaman así aquellos sistemas que involucran constantes de tiempo que difieren notablemente. Sistemas rígidos también aparecen indirectamente en problemas químicos cinéticos de difusión (o problemas

químicos cinéticos de transporte) cuando los sistemas de ecuaciones en derivadas parciales son reemplazados por sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias por el método de las líneas. Otras fuentes de sistemas rígidos incluyen cinética de enzimas, circuitos electrónicos, transmisión de impulsos en fibras nerviosas, sistemas mecánicos, distribución de electrones, flujo de fluido en medios porosos, conducción de calor, problemas biomatemáticos, etc.

Los problemas planteados y resueltos en la presente comparación entre rutinas se refieren a problemas no rígidos y problemas rígidos. Los problemas no rígidos pueden ser resueltos mediante métodos de un solo paso o también por métodos de paso múltiple dependiendo del problema a resolver, mientras que los problemas rígidos deben ser resueltos mediante métodos de paso múltiple y con rutinas especialmente dedicadas al tratamiento de dichos problemas.

Un método de paso múltiple se lleva a cabo en dos etapas, la primera de predicción y la segunda, iterativa, de corrección. En la etapa de predicción se calcula una solución aproximada. En la etapa de corrección se realiza un proceso iterativo cuyo valor inicial es el que proviene de la etapa previa. Una predicción correcta naturalmente acelera la convergencia del proceso iterativo. Dado que cada paso del corrector requiere una evaluación adicional de las derivadas, lo que no es muy conveniente sobre todo si el número de ecuaciones es muy grande, es condición indispensable la convergencia rápida del método iterativo utilizado.

Los métodos utilizados en la práctica procuran evitar las sucesivas evaluaciones de las derivadas en cada paso y además son muy estables, condición esencial para la robustez del método.

Las rutinas disponibles en el Centro de Cálculo Científico de la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) y usadas en la presente comparación se detallan en el siguiente cuadro:

- BIBLIOTECAS -		
<u>SSPCNEA</u> [1] (ACM) [4]	<u>HARWELL</u> [2]	<u>SSPFORT</u> [3] (IBM)
Métodos de Runge-Kutta o de un paso:		
RKMERS	DA02A/AD (DA01A/AD)	RKGS (DRKGS)
Métodos de paso múltiple o predictores-correctores:		
DDIFSU (DIFSUB)	DC02AD (DC01AD)	DHPCG (HPCG)

Todas las rutinas están escritas en lenguaje FORTRAN.

Las rutinas usadas en la comparación para sistemas no rígidos están en simple precisión mientras que las usadas para sistemas rígidos están en doble precisión.

El plan de este trabajo es considerar dos grupos: rutinas para sistemas no rígidos y rutinas para sistemas rígidos. Para cada grupo se indican las rutinas utilizadas con una somera descripción de los métodos involucrados, se plantean luego los ejemplos numéricos resueltos y se muestran los resultados obtenidos; a continuación se presentan los listados FORTRAN que ilustran el uso de las rutinas para la resolución de los problemas planteados. Finalmente se exponen las conclusiones alcanzadas a partir de los resultados obtenidos.

SISTEMAS NO RIGIDOS

Descripción de las rutinas utilizadas

La rutina RKMERS es un integrador de un solo paso entre $t=t$ y $t=t+h$ para sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden por el método de Runge-Kutta con la modificación de Merson, con un error de truncamiento de quinto orden y con control automático de la longitud del paso.

La rutina RKGS no es un integrador de un solo paso sino que requiere el intervalo total de integración y sólo retorna el control al programa invocante luego de haber realizado toda la integración. Se trata de un método de Runge-Kutta con la modificación de Gill, con un error de truncamiento de quinto orden.

La rutina DA02A es básicamente una interfase para la rutina DA01A que es la que realiza la integración propiamente dicha del sistema. Vale decir que a DA02A se le da el intervalo total de integración y esta rutina llama sucesivamente a DA01A para realizar la integración paso por paso. DA02A sólo retorna el control al programa invocante una vez finalizada la integración del intervalo total dado. En forma análoga, también maneja las impresiones. DA01A es un integrador de un solo paso entre $t=t$ y $t=t+h$ por el método de Runge-Kutta con la modificación de Merson.

La rutina HPCG usa el método predictor-corrector de Hamming que es un método de cuarto orden. En la etapa de predicción utiliza un método de Runge-Kutta de cuarto orden. La rutina realiza el ajuste automático del paso durante todo el proceso de cálculo por medio de división en dos o bisección o duplicándolo (se permiten hasta diez bisecciones).

Para más detalles de los métodos y fórmulas empleados por las rutinas de las bibliotecas HARWELL [2] y SSPFORT [3] ver el Boletín Informativo del Centro de Cómputos [5].

Ejemplos numéricos

Se presentan tres ejemplos sencillos de problemas no rígidos de valores iniciales cuyas respectivas soluciones de tipo exponencial, trigonométricas y logarítmico son conocidas.

EJEMPLO 1

$$\begin{aligned}y_1' &= x^2 - y_2 \\y_2' &= x^2 - y_1, \quad 0 \leq x \leq 1,\end{aligned}$$

$$y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = 2, \quad x = 0$$

cuya solución exacta de tipo exponencial es:

$$\begin{aligned}y_1(x) &= x^2 - 2x + 2 - \frac{1}{2}(e^x + e^{-x}) \\y_2(x) &= x^2 - 2x + 2 + \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})\end{aligned}$$

La precisión requerida es de 10^{-5}

EJEMPLO 2

$$\begin{aligned}y_1' &= y_2 \\y_2' &= -y_1, \quad 0 \leq x \leq 7\end{aligned}$$

$$y_1(0) = 0, \quad y_2(0) = 1, \quad x = 0$$

cuya solución exacta de tipo trigonométrico es:

$$\begin{aligned}y_1(x) &= \sin x \\y_2(x) &= \cos x\end{aligned}$$

La precisión requerida es de 10^{-6}

EJEMPLO 3

$$\begin{aligned}y_1' &= 2 \\y_2' &= y_1/x, \quad 1 \leq x \leq 10\end{aligned}$$

$$y_1(1) = 0, \quad y_2(1) = 0, \quad x = 1$$

cuya solución exacta de tipo logarítmica es:

$$y_1(x) = 2x - 2$$

$$y_2(x) = 2x - 2\ln x - 2$$

La precisión requerida es de 10^{-6}

En las tablas 1 y 2 se presentan los resultados obtenidos para el ejemplo 1, en las tablas 3 y 4 los resultados obtenidos para el ejemplo 2 y en las tablas 5 y 6 los resultados obtenidos para el ejemplo 3. Para la resolución de los tres ejemplos se utilizaron las rutinas RKGS, RKMERS, DA02A y HPCG. En las figuras 1, 2, 3, y 4 se muestran los listados FORTRAN que ilustran el uso de estas rutinas. Estos programas fueron procesados en una computadora BASF 7/68 bajo VM/SP.

En base a los resultados obtenidos se puede concluir que la rutina RKMERS se muestra como la más eficiente en los tres ejemplos resueltos. Para el ejemplo 1 emplea aproximadamente el 25% del tiempo insumido por las otras tres rutinas. Para el ejemplo 2 emplea alrededor del 50% del tiempo de DA02A y HPCG y el 35% de RKGS. Para el ejemplo 3 emplea alrededor del 75% del tiempo insumido por RKGS y el 60% del tiempo empleado por DA02A. En el caso de HPCG en este último ejemplo, debe notarse que su tiempo es aproximadamente del orden del de RKMERS, pero se le ha requerido menor precisión (ver FIGURA 4). (Ver las sugerencias para la elección de un método en la parte final de este trabajo).

TABLA 1

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL EJEMPLO 1

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.100000E+01	0.200000E+01
0.100000	0.804996E+00	0.191016E+01
0.200000	0.619934E+00	0.184133E+01
0.300000	0.444663E+00	0.179452E+01
0.400000	0.278930E+00	0.177075E+01
0.500000	0.122377E+00	0.177109E+01
0.600000	-0.254609E-01	0.179664E+01
0.700000	-0.165163E+00	0.184857E+01
0.800000	-0.297427E+00	0.192809E+01
1.000000	-0.543069E+00	0.217518E+01

TIEMPO EMPLEADO POR RKGS 0.012820 SEG.

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.100000E+01	0.200000E+01
0.100000	0.804996E+00	0.191017E+01
0.200000	0.619933E+00	0.184133E+01
0.300000	0.444662E+00	0.179452E+01
0.400000	0.278928E+00	0.177075E+01
0.500000	0.122375E+00	0.177109E+01
0.600000	-0.254634E-01	0.179665E+01
0.700000	-0.165166E+00	0.184858E+01
0.800000	-0.297431E+00	0.192810E+01
0.900000	-0.423082E+00	0.203651E+01
1.000000	-0.543075E+00	0.217519E+01

TIEMPO EMPLEADO POR RKMERS: 0.003659 SEG.

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.100000E+01	0.200000E+01
0.100000	0.804996E+00	0.191017E+01
0.200000	0.619933E+00	0.184134E+01
0.300000	0.444662E+00	0.179452E+01
0.400000	0.278928E+00	0.177075E+01
0.500000	0.122375E+00	0.177109E+01
0.600000	-0.254641E-01	0.179665E+01
0.700000	-0.165167E+00	0.184858E+01
0.800000	-0.297433E+00	0.192810E+01
0.900000	-0.423084E+00	0.203651E+01
1.000000	-0.543077E+00	0.217519E+01

TIEMPO EMPLEADO POR DA02A: 0.013034 SEG.

TABLA 2

RESULTADOS OBTENIDOS CON LA RUTINA HPCG PARA EL EJEMPLO 1

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.100000E+01	0.200000E+01
0.050000	0.901250E+00	0.195252E+01
0.100000	0.804996E+00	0.191017E+01
0.150000	0.711229E+00	0.187306E+01
0.200000	0.619933E+00	0.184133E+01
0.250000	0.531087E+00	0.181511E+01
0.300000	0.444661E+00	0.179452E+01
0.400000	0.278926E+00	0.177075E+01
0.500000	0.122373E+00	0.177109E+01
0.600000	-0.254652E-01	0.179665E+01
0.700000	-0.165168E+00	0.184858E+01
0.800000	-0.297433E+00	0.192810E+01
0.900000	-0.423083E+00	0.203650E+01
1.000000	-0.543076E+00	0.217519E+01

TIEMPO EMPLEADO POR HPCG : 0.013467 SEG.

TABLA 3

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL EJEMPLO 2

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.0	0.100000E+01
0.500000	0.479410E+00	0.877587E+00
1.000000	0.841458E+00	0.540314E+00
1.500000	0.997489E+00	0.707545E-01
2.000000	0.909300E+00	-0.416127E+00
2.500000	0.598484E+00	-0.801126E+00
3.000000	0.141139E+00	-0.989982E+00
3.500000	-0.350760E+00	-0.936457E+00
4.000000	-0.756781E+00	-0.653655E+00
4.500000	-0.977516E+00	-0.210816E+00
5.000000	-0.958921E+00	0.283636E+00
5.500000	-0.705550E+00	0.708644E+00
6.000000	-0.279437E+00	0.960151E+00
6.500000	0.215091E+00	0.976581E+00
7.000000	0.656957E+00	0.753911E+00
TIEMPO EMPLEADO POR RKGS 0.037945 SEG.		

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.0	0.100000E+01
0.500000	0.479423E+00	0.877584E+00
1.000000	0.841468E+00	0.540307E+00
1.500000	0.997494E+00	0.707449E-01
2.000000	0.909302E+00	-0.416137E+00
2.500000	0.598483E+00	-0.801135E+00
3.000000	0.141137E+00	-0.989989E+00
3.500000	-0.350767E+00	-0.936462E+00
4.000000	-0.756788E+00	-0.653658E+00
4.500000	-0.977524E+00	-0.210818E+00
5.000000	-0.958930E+00	0.283639E+00
5.500000	-0.705558E+00	0.708650E+00
6.000000	-0.279444E+00	0.960160E+00
6.500000	0.215090E+00	0.976592E+00
7.000000	0.656960E+00	0.753923E+00
TIEMPO EMPLEADO POR RKMERS: 0.014363 SEG.		

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.0	0.100000E+01
0.500000	0.479420E+00	0.877586E+00
1.000000	0.841464E+00	0.540313E+00
1.500000	0.997493E+00	0.707580E-01
2.000000	0.909309E+00	-0.416122E+00
2.500000	0.598499E+00	-0.801123E+00
3.000000	0.141162E+00	-0.989986E+00
3.500000	-0.350737E+00	-0.936473E+00
4.000000	-0.756766E+00	-0.653685E+00
4.500000	-0.977516E+00	-0.210857E+00
5.000000	-0.958943E+00	0.283595E+00
5.500000	-0.705593E+00	0.708616E+00
6.000000	-0.279495E+00	0.960146E+00
6.500000	0.215032E+00	0.976606E+00
7.000000	0.656914E+00	0.753964E+00
TIEMPO EMPLEADO POR DA02A: 0.025373 SEG.		

TABLA 4

RESULTADOS OBTENIDOS CON LA RUTINA HPCG PARA EL EJEMPLO 2

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.0	0.100000E+01
1.000000	0.841470E+00	0.540301E+00
2.000000	0.909294E+00	-0.416146E+00
3.000000	0.141118E+00	-0.989987E+00
4.000000	-0.756797E+00	-0.653638E+00
5.000000	-0.958914E+00	0.283659E+00
6.000000	-0.279413E+00	0.960158E+00
6.125000	-0.157525E+00	0.987502E+00
6.250000	-0.331793E-01	0.999436E+00
6.375000	0.916839E-01	0.995774E+00
6.500000	0.215116E+00	0.976574E+00
6.625000	0.335192E+00	0.942135E+00
6.750000	0.450037E+00	0.892994E+00
6.875000	0.557859E+00	0.829918E+00
7.000000	0.656976E+00	0.753892E+00

TIEMPO EMPLEADO POR HPCG : 0.025620 SEG.

TABLA 5

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL EJEMPLO 3

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
1.000000	0.0	0.0
2.000000	0.200000E+01	0.613690E+00
3.000000	0.399999E+01	0.180275E+01
4.000000	0.599999E+01	0.322738E+01
5.000000	0.799999E+01	0.478109E+01
6.000000	0.999999E+01	0.641644E+01
7.000000	0.120000E+02	0.810813E+01
8.000000	0.140000E+02	0.984106E+01
9.000000	0.160000E+02	0.116055E+02
10.000000	0.180000E+02	0.133948E+02

TIEMPO EMPLEADO POR RKGS 0.018959 SEG.

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
1.000000	0.0	0.0
2.000000	0.199999E+01	0.613703E+00
3.000000	0.399999E+01	0.180276E+01
4.000000	0.599999E+01	0.322739E+01
5.000000	0.799998E+01	0.478110E+01
6.000000	0.999998E+01	0.641645E+01
7.000000	0.120000E+02	0.810814E+01
8.000000	0.140000E+02	0.984107E+01
9.000000	0.160000E+02	0.116055E+02
10.000000	0.180000E+02	0.133948E+02

TIEMPO EMPLEADO POR RKMERS: 0.013389 SEG.

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
1.000000	0.0	0.0
2.000000	0.200000E+01	0.613705E+00
3.000000	0.400000E+01	0.180277E+01
4.000000	0.600000E+01	0.322741E+01
5.000000	0.800000E+01	0.478112E+01
6.000000	0.100000E+02	0.641648E+01
7.000000	0.120000E+02	0.810817E+01
8.000000	0.140000E+02	0.984111E+01
9.000000	0.160000E+02	0.116055E+02
10.000000	0.180000E+02	0.133948E+02

TIEMPO EMPLEADO POR DA02A: 0.022799 SEG.

TABLA 6

RESULTADOS OBTENIDOS CON LA RUTINA HPCG PARA EL EJEMPLO 3

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
1.000000	0.0	0.0
2.000000	0.200000E+01	0.611110E+00
3.000000	0.399999E+01	0.179788E+01
4.000000	0.599999E+01	0.322261E+01
5.000000	0.799998E+01	0.477631E+01
6.000000	0.999997E+01	0.641167E+01
7.000000	0.120000E+02	0.810336E+01
8.000000	0.140000E+02	0.983628E+01
9.000000	0.160000E+02	0.116007E+02
10.000000	0.180000E+02	0.133900E+02

TIEMPO EMPLEADO POR HPCG : 0.014387 SEG.

FIGURA 1

```

C-----PROGRAMA EJEMPLO DEL USO DE LA RUTINA RKGS-----
      REAL*4 Y(2),DERY(2),PRMT(5),AUX(8,2)
      EXTERNAL DERIV,OUTP
C EN LAS SIGUIENTES TRES DATA SE DAN LOS PARAMETROS PARA
C CADA UNO DE LOS EJEMPLOS PROBADOS.
C SOLO UNA LINEA SE LA MUESTRA SIN CONSIDERARSELA COMO COMENTARIO
C Y CORRESPONDE A LA CORRIDA EFECTIVA DEL EJEMPLO 3.
C EJEMPLO 1 :
C   DATA N,Y,DERY,PRMT/2,1.,2.,2*0.5,0.,1.,0.1,10E-5,0./
C EJEMPLO 2 :
C   DATA N,Y,DERY,PRMT/2,0.,1.,2*0.5,0.,7.,0.25,10E-6,0./
C EJEMPLO 3 :
      DATA N,Y,DERY,PRMT/2,0.,0.,2*0.5,1.,10.,1.,10E-6,0./
      WRITE(6,99)
99  FORMAT(11X,'-----X-----Y1-----Y2-----')
      CALL TIM(ITIEM)
      T=ITIEM*1.E-6
      CALL RKGS(PRMT,Y,DERY,N,IHLF,DERIV,OUTP,AUX)
      CALL TIM(ITIEM)
      T=ITIEM*1.E-6-T
      WRITE(6,66)T
66  FORMAT(7X,'TIEMPO EMPLEADO POR RKGS',F11.6,' SEG.')
```

```

      STOP
      END
      SUBROUTINE DERIV(X,Y,F)
      REAL*4 X,Y(1),F(1)
C CALCULO DE LAS DERIVADAS.
C EJEMPLO 1 :
C   F(1)=X**2-Y(2)
C   F(2)=X**2-Y(1)
C EJEMPLO 2 :
C   F(1)=Y(2)
C   F(2)=-Y(1)
C EJEMPLO 3 :
      F(1)=2.
      F(2)=Y(1)/X
      RETURN
      END
      SUBROUTINE OUTP(X,Y,DERY,IHLF,NDIM,PRMT)
      DIMENSION Y(1),DERY(1),PRMT(1)
C IMPRESION DE LOS RESULTADOS.
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 1:
C   DATA HIMPRESION/0.1/,RLIM1/0./,RLIM2/1./
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 2:
C   DATA HIMPRESION/1./,RLIM1/0./,RLIM2/7./
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 3:
      DATA HIMPRESION/1./,RLIM1/1./,RLIM2/10./
      IF(X.EQ.RLIM1)GO TO 90
      XIMPRESION=XANT+HIMPRESION
      IF(XIMPRESION.GE.RLIM2)GO TO 90
      IF(X.LT.XIMPRESION)RETURN
90  WRITE(6,100)X,Y(1),Y(2)
100 FORMAT(11X,F12.6,2(2X,E14.6))
      XANT=X
      RETURN
      END

```

FIGURA 2

```
C
C-----PROGRAMA EJEMPLO DEL USO DE LA RUTINA RKMERS-----
C
      DIMENSION Y(2),YSOL(2),TT(20)
      LOGICAL*1 FIRST/.TRUE./
C EN LAS SIGUIENTES TRES DATA SE DAN LOS PARAMETROS PARA
C CADA UNO DE LOS EJEMPLOS PROBADOS.
C SOLO UNA LINEA SE LA MUESTRA SIN CONSIDERARSELA COMO COMENTARIO
C Y CORRESPONDE A LA CORRIDA EFECTIVA DEL EJEMPLO 3.
C EJEMPLO 1 :
C   DATA N,T,TEND,H,EPS,Y/2,0.,1.,0.1,10E-5,1.,2./
C EJEMPLO 2 :
C   DATA N,T,TEND,H,EPS,Y/2,0.,7.,0.5,10E-6,0.,1./
C EJEMPLO 3 :
      DATA N,T,TEND,H,EPS,Y/2,1.,10.,1.,10E-6,0.,0./
      EXTERNAL DERIV
      WRITE(6,99)
99  FORMAT(11X,'-----X-----Y1-----Y2-----')
      WRITE(6,100)T,Y(1),Y(2)
      I=0
10  I=I+1
      CALL TIM(ITIEM)
      TT(I)=ITIEM*1.E-6
      CALL RKMERS(N,T,Y,EPS,H,DERIV,FIRST,YSOL)
      CALL TIM(ITIEM)
      TT(I)=ITIEM*1.E-6-TT(I)
      WRITE(6,100)T,YSOL(1),YSOL(2)
100  FORMAT(11X,F12.6,2(2X,E14.6))
      IF(T.LT.TEND)GO TO 10
      TIEM=0.
      DO 11 J=1,I
11  TIEM=TIEM+TT(J)
      WRITE(6,6)TIEM
6    FORMAT(7X,'TIEMPO EMPLEADO POR RKMERS:',F10.6,' SEG.')
      STOP
      END
      SUBROUTINE DERIV(T,Y,F,N)
      DIMENSION Y(1),F(1)
C CALCULO DE LAS DERIVADAS.
C EJEMPLO 1 :
C   F(1)=T**2-Y(2)
C   F(2)=T**2-Y(1)
C EJEMPLO 2 :
C   F(1)=Y(2)
C   F(2)=-Y(1)
C EJEMPLO 3 :
      F(1)=2.
      F(2)=Y(1)/T
      RETURN
      END
```

FIGURA 3

```
C
C-----PROGRAMA EJEMPLO DEL USO DE LA RUTINA DA02A-----
C
      DIMENSION Y(2),WORK(12)
C EN LOS SIGUIENTES PARES DE DATA SE DAN LOS PARAMETROS PARA
C CADA UNO DE LOS EJEMPLOS PROBADOS.
C SOLO DOS LINEAS SE MUESTRAN SIN CONSIDERARSELAS COMO COMENTARIO
C Y CORRESPONDEN A LA CORRIDA EFECTIVA DEL EJEMPLO 3.
C EJEMPLO 1 :
C   DATA N,X,H,NSTEP,PSTEP,EPS/2,0.,0.1,10,0.1,10E-5/
C   DATA Y/1.,2./
C EJEMPLO 2 :
C   DATA N,X,H,NSTEP,PSTEP,EPS/2,0.,0.5,14,0.5,10E-6/
C   DATA Y/0.,1./
C EJEMPLO 3 :
      DATA N,X,H,NSTEP,PSTEP,EPS/2,1.,1.,9,1.,10E-6/
      DATA Y/0.,0./
      EXTERNAL DYBDX
      WRITE(6,99)
99   FORMAT(11X,'-----X-----Y1-----Y2-----')
      CALL TIM(ITIEM)
      T=ITIEM*1.E-6
      CALL DA02A(Y,N,X,PSTEP,NSTEP,H,WORK,EPS,&10)
      CALL TIM(ITIEM)
      T=ITIEM*1.E-6-T
      WRITE(6,6)T
6    FORMAT(7X,'TIEMPO EMPLEADO POR DA02A:',F10.6,' SEG.')
      STOP
10   WRITE(6,100)
100  FORMAT(1X,'SALIDA POR ERROR')
      STOP
      END
      SUBROUTINE DYBDX(Y,F,N,X)
      DIMENSION Y(1),F(1)
C CALCULO DE LAS DERIVADAS.
C EJEMPLO 1 :
C   F(1)=X**2-Y(2)
C   F(2)=X**2-Y(1)
C EJEMPLO 2 :
C   F(1)=Y(2)
C   F(2)=-Y(1)
C EJEMPLO 3 :
      F(1)=2.
      F(2)=Y(1)/X
      RETURN
      END
```

FIGURA 3 (continuación)

```

SUBROUTINE OUTP(X,Y)
  DIMENSION Y(1)
C IMPRESION DE LOS RESULTADOS.
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 1:
C   DATA HIMPRES/0.1/,RLIM1/0./,RLIM2/1./
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 2:
C   DATA HIMPRES/1./,RLIM1/0./,RLIM2/7./
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 3:
C   DATA HIMPRES/1./,RLIM1/1./,RLIM2/10./
  IF(X.EQ.RLIM1)GO TO 90
  XIMPRES=XANT+HIMPRES
  IF(XIMPRES.GE.RLIM2)GO TO 90
  IF(X.LT.XIMPRES)RETURN
90  WRITE(6,100)X,Y(1),Y(2)
100  FORMAT(11X,F12.6,2(2X,E14.6))
  XANT=X
  RETURN
END

```

FIGURA 4

```

C
C-----PROGRAMA EJEMPLO DEL USO DE LA RUTINA HPCG-----
C
  EXTERNAL DYBDX,OUTPUT
C EN LAS SIGUIENTES LINEAS SE DAN LOS PARAMETROS PARA
C CADA UNO DE LOS EJEMPLOS PROBADOS.
C SOLO ALGUNAS LINEAS SE MUESTRAN SIN CONSIDERARSELAS COMO COMENTARIO
C Y CORRESPONDEN A LA CORRIDA EFECTIVA DEL EJEMPLO 3.
  DIMENSION Y(2),DERY(2),PRMT(5),AUX(16,2)
  DATA N/2/
C EJEMPLO 1 :
C   DATA Y,DERY,PRMT/1.,2.,2*0.5,0.,1.,0.1,10E-5,0./
C EJEMPLO 2 :
C   DATA Y,DERY,PRMT/0.,1.,2*0.5,0.,7.,0.25,10E-6,0./
C EJEMPLO 3 :
C   DATA Y,DERY,PRMT/0.,0.,2*0.5,1.,10.,1.,10E-4,0./
  WRITE(6,99)
99  FORMAT(11X,'-----X-----Y1-----Y2-----')
  CALL TIM(ITIEM)
  T0=ITIEM*1.E-6
  CALL HPCG(PRMT,Y,DERY,N,IHLF,DYBDX,OUTPUT,AUX)
  CALL TIM(ITIEM)
  T=ITIEM*1.E-6-T0
  WRITE(6,10)T
10  FORMAT(1X,'TIEMPO EMPLEADO POR HPCG :',F12.6,' SEG.')
  STOP
  END
  SUBROUTINE DYBDX(X,Y,F)
  DIMENSION Y(1),F(1)
C CALCULO DE LAS DERIVADAS.

```

Figura 4 (continuación)

```
C  EJEMPLO 1 :
C    F(1)=X**2-Y(2)
C    F(2)=X**2-Y(1)
C  EJEMPLO 2 :
C    F(1)=Y(2)
C    F(2)=-Y(1)
C  EJEMPLO 3 :
C    F(1)=2.
C    F(2)=Y(1)/X
C    RETURN
C    END
C    SUBROUTINE OUTPUT(X,Y,DERY,IHLF,NDIM,PRMT)
C    DIMENSION Y(1),DERY(1),PRMT(1)
C  IMPRESION DE LOS RESULTADOS.
C  PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 1:
C    DATA HIMPRES/0.1/,RLIM1/0./,RLIM2/1./
C  PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 2:
C    DATA HIMPRES/1./,RLIM1/0./,RLIM2/7./
C  PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 3:
C    DATA HIMPRES/1./,RLIM1/1./,RLIM2/10./
C    IF(X.EQ.RLIM1)GO TO 90
C    XIMPRES=XANT+HIMPRES
C    IF(XIMPRES.GE.RLIM2)GO TO 90
C    IF(X.LT.XIMPRES)RETURN
90  WRITE(6,100)X,Y(1),Y(2)
100  FORMAT(11X,F12.6,2(2X,E14.6))
C    XANT=X
C    RETURN
C    END
```

SISTEMAS RIGIDOS

Descripción de las rutinas utilizadas

La rutina DDIFSU tiene dos posibilidades: ser utilizada como método predictor-corrector que puede ser de Adams hasta un orden 8 (donde el orden es el de la derivada de mayor orden en el sistema a resolver), o ser utilizada para el tratamiento de ecuaciones rígidas con hasta orden 7. En ambos casos, la rutina elige el orden automáticamente a medida que se desarrolla la integración y controla también automáticamente la longitud del paso. Es un integrador de un solo paso y éste debe darse inicialmente dentro de un rango con valor mínimo y máximo y luego será devuelto ajustado o no por la rutina, para continuar la integración en el siguiente paso.

La rutina DC02AD es básicamente un controlador para la rutina DC01AD que es la que realiza la integración propiamente dicha del sistema. Vale decir, que la rutina DC02AD permite usar la rutina DC01AD con una entrada de datos más sencilla. No es un integrador de un solo paso, de modo que sólo retorna el control al programa invocante luego de haber realizado la integración del intervalo total. Es un método predictor-corrector debido a C.W. GEAR [6] (que también es autor de la rutina DDIFSU), que elige automáticamente la longitud del paso y el orden de la fórmula de integración y está especialmente dedicado al tratamiento de problemas rígidos. (Para más detalles del método ver la publicación ya citada del Centro de Cómputos).

Ejemplos numéricos

Se presentan dos ejemplos con solución analítica conocida.

EJEMPLO 1

$$y_1' = -2000 y_1 + 1000 y_2 + 1$$

$$y_2' = y_1 - y_2 \quad , \quad 0 \leq x \leq 5 \quad ,$$

$$y_1(0) = 0 \quad , \quad y_2(0) = 0 \quad , \quad x = 0$$

La solución analítica es:

$$y_1(x) = -4,97 * 10^{-4} e^{-2000,5x} - 5,034 * 10^{-4} e^{-0,5x} + 0,001$$

$$y_2(x) = 2,5 * 10^{-7} e^{-2000,5x} - 1,007 * 10^{-3} e^{-0,5x} + 0,001$$

La precisión requerida es de 10^{-5}

EJEMPLO 2

Se tiene el sistema $y' = Uz - UBUy = Uz - UBw$, $0 \leq x \leq 50$
donde:

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} \quad z = \begin{pmatrix} w_1^2 \\ w_2^2 \\ w_3^2 \\ w_4^2 \end{pmatrix} \quad w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = Uy$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ - & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ & 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_4 \end{pmatrix}$$

con $y_1(0) = -1$, $y_2(0) = -1$, $y_3(0) = -1$, $y_4(0) = -1$, $x = 0$

La solución analítica es:

$$y(x) = U \begin{pmatrix} \beta_1 / (1 - (1 + \beta_1) e^{\beta_1 x}) \\ \beta_2 / (1 - (1 + \beta_2) e^{\beta_2 x}) \\ \beta_3 / (1 - (1 + \beta_3) e^{\beta_3 x}) \\ \beta_4 / (1 - (1 + \beta_4) e^{\beta_4 x}) \end{pmatrix}$$

La precisión requerida es de 10^{-4}

Para la resolución se tomó $\beta_1 = 1000$, $\beta_2 = 800$, $\beta_3 = -10$,
 $\beta_4 = -0,001$

En las tablas 7 y 8 se presentan los resultados obtenidos para los dos ejemplos planteados. Para la resolución se utilizaron las rutinas DC01AD y DDIFSU (ambas rutinas están escritas en doble precisión). En las figuras 5 y 6 se muestran los listados FORTRAN que ilustran el uso de estas rutinas. Estos programas ilustrativos fueron corridos en una computadora BASF 7/68 bajo VM/SP.

En base a los resultados obtenidos se puede concluir que para el primer ejemplo DDIFSU emplea aproximadamente el 25% del tiempo insumido por DC01AD mientras que para el segundo ejemplo la diferencia a favor de DDIFSU es pequeña. (Ver las sugerencias para la elección de un método en la parte final de este trabajo).

TABLA 7

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL EJEMPLO 1

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.0	0.0
0.294118	0.568123D-03	0.136519D-03
0.588235	0.627196D-03	0.254561D-03
0.882353	0.678152D-03	0.356466D-03
1.176471	0.722153D-03	0.444445D-03
1.470588	0.760121D-03	0.520361D-03
1.742172	0.790551D-03	0.581206D-03
2.058824	0.821248D-03	0.642588D-03
2.352941	0.845749D-03	0.691574D-03
2.647059	0.866862D-03	0.733795D-03
2.941176	0.885212D-03	0.770481D-03
3.235294	0.900904D-03	0.801857D-03
3.529412	0.914590D-03	0.829222D-03
3.823529	0.926261D-03	0.852559D-03
4.117647	0.936420D-03	0.872873D-03
4.411765	0.945114D-03	0.890254D-03
4.705882	0.952651D-03	0.905326D-03
5.000000	0.959128D-03	0.918277D-03

TIEMPO EMPLEADO POR DCU1AD : 0.156780 SEG.

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----
0.0	0.0	0.0
0.336182	0.575500D-03	0.151184D-03
0.636182	0.633276D-03	0.266734D-03
0.936182	0.683198D-03	0.366555D-03
1.236182	0.726325D-03	0.452787D-03
1.536182	0.763581D-03	0.527280D-03
1.836182	0.795765D-03	0.591632D-03
2.136182	0.823568D-03	0.647224D-03
2.436182	0.847586D-03	0.695248D-03
2.736182	0.868334D-03	0.736734D-03
3.036182	0.886258D-03	0.772573D-03
3.336182	0.901742D-03	0.803533D-03
3.636182	0.915118D-03	0.830278D-03
3.936182	0.926673D-03	0.853383D-03
4.236182	0.936655D-03	0.873342D-03
4.536182	0.945278D-03	0.890584D-03
4.836182	0.952728D-03	0.905479D-03
5.036182	0.957122D-03	0.914265D-03

TIEMPO EMPLEADO POR DDIFSU CON MF= 1 0.047009 SEG.

TABLA 8

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL EJEMPLO 2

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----	-----Y3-----	-----Y4-----
5.035974	-0.508260D+01	-0.508260D+01	0.491741D+01	-0.491741D+01
10.309412	-0.504396D+01	-0.504396D+01	0.495604D+01	-0.495604D+01
15.387537	-0.503028D+01	-0.503028D+01	0.496973D+01	-0.496973D+01
20.588235	-0.502296D+01	-0.502296D+01	0.497704D+01	-0.497704D+01
26.325037	-0.501809D+01	-0.501809D+01	0.498191D+01	-0.498191D+01
31.372549	-0.501523D+01	-0.501523D+01	0.498477D+01	-0.498477D+01
36.481287	-0.501313D+01	-0.501313D+01	0.498687D+01	-0.498687D+01
42.156863	-0.501142D+01	-0.501142D+01	0.498858D+01	-0.498858D+01
47.418787	-0.501018D+01	-0.501018D+01	0.498982D+01	-0.498982D+01
48.039216	-0.501005D+01	-0.501005D+01	0.498996D+01	-0.498996D+01
48.981287	-0.500985D+01	-0.500985D+01	0.499015D+01	-0.499015D+01
49.019608	-0.500985D+01	-0.500985D+01	0.499015D+01	-0.499015D+01
50.000000	-0.500965D+01	-0.500965D+01	0.499035D+01	-0.499035D+01

TIEMPO EMPLEADO POR DC01AD : 1.774735 SEG.

-----X-----	-----Y1-----	-----Y2-----	-----Y3-----	-----Y4-----
0.0	-0.100000D+01	-0.100000D+01	-0.100000D+01	-0.100000D+01
5.083038	-0.508352D+01	-0.508352D+01	0.491648D+01	-0.491648D+01
10.183038	-0.504514D+01	-0.504514D+01	0.495486D+01	-0.495486D+01
15.283038	-0.503084D+01	-0.503084D+01	0.496916D+01	-0.496916D+01
20.383038	-0.502338D+01	-0.502338D+01	0.497662D+01	-0.497662D+01
25.483038	-0.501880D+01	-0.501880D+01	0.498120D+01	-0.498120D+01
30.583038	-0.501571D+01	-0.501571D+01	0.498429D+01	-0.498429D+01
35.683038	-0.501348D+01	-0.501348D+01	0.498652D+01	-0.498652D+01
40.783038	-0.501180D+01	-0.501180D+01	0.498820D+01	-0.498820D+01
45.883038	-0.501048D+01	-0.501048D+01	0.498952D+01	-0.498952D+01
50.083038	-0.500960D+01	-0.500960D+01	0.499040D+01	-0.499040D+01

TIEMPO EMPLEADO POR DDIFSU CON MF= 1 1.598145 SEG.

FIGURA 5

```

C
C-----PROGRAMA EJEMPLO DEL USO DE LA RUTINA DC02AD-----
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      EXTERNAL DYBDX,OUTPUT
C EN LOS SIGUIENTES PARES DE DATA SE DAN LOS PARAMETROS PARA
C CADA UNO DE LOS EJEMPLOS PROBADOS.
C SOLO DOS LINEAS SE MUESTRAN SIN CONSIDERARSELAS COMO COMENTARIO
C Y CORRESPONDEN A LA CORRIDA EFECTIVA DEL EJEMPLO 2.
C EJEMPLO 1 :
C   DIMENSION Y(2)
C   DATA N,X,XEND,NPR,EPS1,EPS2,IP/2,0.D0,5.D0,51,1.D-4,1.D-4,6/
C   DATA Y/0.D0,0.D0/
C EJEMPLO 2 :
      DIMENSION Y(4)
      DATA N,X,XEND,NPR,EPS1,EPS2,IP/4,0.D0,5.D1,51,1.D-4,1.D-4,6/
      DATA Y/4*-1.D0/
      WRITE(6,99)
C99  FORMAT(11X,'-----X-----Y1-----Y2-----')
  99  FORMAT(1X,'-----X-----Y1-----Y2-----Y3---
C   *----Y4-----')
      CALL TIM(ITIEM)
      T=ITIEM*1.E-6
      CALL DC02AD(N,X,XEND,Y,DYBDX,EPS1,EPS2,NPR,IP,&10)
      CALL TIM(ITIEM)
      T=ITIEM*1.E-6 - T
      WRITE(6,11)T
  11  FORMAT(//1X,'TIEMPO EMPLEADO POR DC01AD :',F12.6,' SEG.')
      STOP
  10  WRITE(6,1)N
   1  FORMAT(1X,'SALIDA POR ERROR CON N=',I2)
      STOP
      END
      SUBROUTINE DYBDX(X,Y,F,N)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION Y(1),F(1)
C CALCULO DE LAS DERIVADAS.
C EJEMPLO 1 :
C   F(1)=-2.D3*Y(1)+1.D3*Y(2)+1.D0
C   F(2)=Y(1)-Y(2)
C EJEMPLO 2 :
      W1=-0.5*Y(1)+0.5*Y(2)+0.5*Y(3)+0.5*Y(4)
      W2=0.5*Y(1)-0.5*Y(2)+0.5*Y(3)+0.5*Y(4)
      W3=0.5*Y(1)+0.5*Y(2)-0.5*Y(3)+0.5*Y(4)
      W4=0.5*Y(1)+0.5*Y(2)+0.5*Y(3)-0.5*Y(4)
      Z1=0.25*Y(1)*Y(1)-0.5*Y(1)*Y(2)-0.5*Y(1)*Y(3)-
*0.5*Y(1)*Y(4)+0.25*Y(2)*Y(2)+0.5*Y(2)*Y(3)+
*0.5*Y(2)*Y(4)+0.25*Y(3)*Y(3)+0.5*Y(3)*Y(4)+
*0.25*Y(4)*Y(4)
      Z2=0.25*Y(1)*Y(1)-0.5*Y(1)*Y(2)+0.5*Y(1)*Y(3)+
*0.5*Y(1)*Y(4)+0.25*Y(2)*Y(2)-0.5*Y(2)*Y(3)-
*0.5*Y(2)*Y(4)+0.25*Y(3)*Y(3)+0.5*Y(3)*Y(4)+
*0.25*Y(4)*Y(4)

```

FIGURA 5 (continuación)

```

      Z3=0.25*Y(1)*Y(1)+0.5*Y(1)*Y(2)-0.5*Y(1)*Y(3)+
      *0.5*Y(1)*Y(4)+0.25*Y(2)*Y(2)-0.5*Y(2)*Y(3)+
      *0.5*Y(2)*Y(4)+0.25*Y(3)*Y(3)-0.5*Y(3)*Y(4)+
      *0.25*Y(4)*Y(4)
      Z4=0.25*Y(1)*Y(1)+0.5*Y(1)*Y(2)+0.5*Y(1)*Y(3)-
      *0.5*Y(1)*Y(4)+0.25*Y(2)*Y(2)+0.5*Y(2)*Y(3)-
      *0.5*Y(2)*Y(4)+0.25*Y(3)*Y(3)-0.5*Y(3)*Y(4)+
      *0.25*Y(4)*Y(4)
      F(1)=-0.5*Z1+0.5*Z2+0.5*Z3+0.5*Z4+500.*W1-400.*W2+5.*W3-.0005*W4
      F(2)=0.5*Z1-0.5*Z2+0.5*Z3+0.5*Z4-500.*W1+400.*W2+5.*W3-0.0005*W4
      F(3)=0.5*Z1+0.5*Z2-0.5*Z3+0.5*Z4-500.*W1-400.*W2-5.*W3-0.0005*W4
      F(4)=0.5*Z1+0.5*Z2+0.5*Z3-0.5*Z4-500.*W1-400.*W2+5.*W3+0.0005*W4
      RETURN
      END
      SUBROUTINE OUTPUT(X,Y,F,N,K)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION Y(1),F(1)
      COMMON/DC01HD/ RANGE,XPNXT,IPR,IOUT,NSTEP,NDERIV,NCMAT
      *,IHINT,IND,IHC,IHC0,IHNEW(12),MSW,KDB,IDBL,JSTART,JOUT,IWRNG
      *,KNT,NDBG,NDBMAX,ISPARE(2)
C IMPRESION DE LOS RESULTADOS.
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 1:
C   DATA HIMPRES/0.25D0/,RLIM1/0.D0/,RLIM2/5.D0/
C PASO Y LIMITE DE IMPRESION EJEMPLO 2:
C   DATA HIMPRES/5.D0/,RLIM1/0.D0/,RLIM2/50.D0/
      IF(X.EQ.RLIM1)GO TO 90
      XIMPRES=XANT+HIMPRES
      IF(XIMPRES.GE.RLIM2)GO TO 90
      IF(X.LT.XIMPRES)RETURN
C90  WRITE(6,100)X,Y(1),Y(2)
      90  WRITE(6,100)X,Y(1),Y(2),Y(3),Y(4)
C100  FORMAT(11X,F12.6,2(2X,E14.6))
      100  FORMAT(1X,F10.6,4(2X,E14.6))
      XANT=X
      RETURN

```

FIGURA 6

```

C
C-----PROGRAMA EJEMPLO DEL USO DE LA RUTINA DDIFSU-----
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      REAL*4 PW, TIEM
      DIMENSION Y(8,4), SAVE(48), YMAX(4), ERROR(4), PW(4,4), TIEM(5000)
C EN LOS SIGUIENTES PARES DE DATA SE DAN LOS PARAMETROS PARA
C CADA UNO DE LOS EJEMPLOS PROBADOS Y LAS CONDICIONES INICIALES.
C SOLO ALGUNAS LINEAS SE MUESTRAN SIN CONSIDERARSELAS COMO COMENTARIO
C Y CORRESPONDEN A LA CORRIDA EFECTIVA DEL EJEMPLO 2.
C EJEMPLO 1 :
C   DATA N,MF,HMIN,H,HMAX,EPS,MAXDER/2,1,1.D-04,1.D-3,0.1D0,1.D-04,1/
C   DATA T,TEND,YMAX/0.D0,5.D0,1.D0,1.D0/,HIMPRE/0.25D0/
C   Y(1,1)=0.D0
C   Y(1,2)=0.D0
C EJEMPLO 2 :
C   DATA N,MF,HMIN,H,HMAX,EPS,MAXDER/4,1,1.D-05,1.D-3,0.1D0,10.D-04,1/
C   DATA T,TEND,YMAX/0.D0,50.D0,4*1.D0/,HIMPRE/5.D0/
C   Y(1,1)=-1.D0
C   Y(1,2)=-1.D0
C   Y(1,3)=-1.D0
C   Y(1,4)=-1.D0
C   IPASO=1
C   JSTART=0
C   WRITE(6,99)
C99  FORMAT(11X,'-----X-----Y1-----Y2-----')
C   99  FORMAT(1X,'-----X-----Y1-----Y2-----Y3---
C   *-----Y4-----')
C   WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2)
C   WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2),Y(1,3),Y(1,4)
C100  FORMAT(11X,F12.6,2(2X,E14.6))
C   100  FORMAT(1X,F10.6,4(2X,E14.6))
C   LINEA=8
C   9    TIMPRE=T+HIMPRE
C   10   CALL TIM(ITIEM)
C       TIEM(IPASO)=ITIEM*1.E-6
C       CALL DDIFSU(N,T,Y,SAVE,H,HMIN,HMAX,EPS,MF,YMAX,ERROR,KFLAG,
C *JSTART,MAXDER,PW)
C       CALL TIM(ITIEM)
C       TIEM(IPASO)=ITIEM*1.E-6-TIEM(IPASO)
C       IPASO=IPASO+1
C   WRITE(6,66)IPASO,KFLAG
C66   FORMAT(1X,'IPASO KFLAG :',2I4)
C       IF(KFLAG.NE.1)STOP
C       IF(T.LT.TIMPRE)GO TO 81
C       LINEA=LINEA+1
C       IF(LINEA.LE.80)GO TO 80
C       LINEA=8
C   WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2)
C   WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2),Y(1,3),Y(1,4)
C   GO TO 81
C80   WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2)
C   80   WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2),Y(1,3),Y(1,4)
C   81   JSTART=1

```

FIGURA 6 (continuación)

```
IF(T.LE.TEND.AND.T.LT.TIMPRE)GO TO 10
IF(T.LT.TEND)GO TO 9
C WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2)
WRITE(6,100)T,Y(1,1),Y(1,2),Y(1,3),Y(1,4)
I1=IPASO-1
TIEMPO=0.
DO 800 I=1,I1
800 TIEMPO=TIEM(I)+TIEMPO
WRITE(6,888)MF,TIEMPO
888 FORMAT(/1X,'TIEMPO EMPLEADO POR DDIFSU CON MF=',I2,F12.6,' SEG.')
```

STOP

END

SUBROUTINE DIFFUN(T,Y,DY)

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

DIMENSION Y(8,4),DY(4)

C CALCULO DE LAS DERIVADAS.

C EJEMPLO 1 :

C DY(1)=-2.E3*Y(1,1)+1.E3*Y(1,2)+1.

C DY(2)=Y(1,1)-Y(1,2)

C EJEMPLO 2 :

W1=-0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)

W2=0.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)

W3=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)

W4=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)

Z1=0.25*Y(1,1)*Y(1,1)-0.5*Y(1,1)*Y(1,2)-0.5*Y(1,1)*Y(1,3)-

*0.5*Y(1,1)*Y(1,4)+0.25*Y(1,2)*Y(1,2)+0.5*Y(1,2)*Y(1,3)+

*0.5*Y(1,2)*Y(1,4)+0.25*Y(1,3)*Y(1,3)+0.5*Y(1,3)*Y(1,4)+

*0.25*Y(1,4)*Y(1,4)

Z2=0.25*Y(1,1)*Y(1,1)-0.5*Y(1,1)*Y(1,2)+0.5*Y(1,1)*Y(1,3)+

*0.5*Y(1,1)*Y(1,4)+0.25*Y(1,2)*Y(1,2)-0.5*Y(1,2)*Y(1,3)-

*0.5*Y(1,2)*Y(1,4)+0.25*Y(1,3)*Y(1,3)+0.5*Y(1,3)*Y(1,4)+

*0.25*Y(1,4)*Y(1,4)

Z3=0.25*Y(1,1)*Y(1,1)+0.5*Y(1,1)*Y(1,2)-0.5*Y(1,1)*Y(1,3)+

*0.5*Y(1,1)*Y(1,4)+0.25*Y(1,2)*Y(1,2)-0.5*Y(1,2)*Y(1,3)+

*0.5*Y(1,2)*Y(1,4)+0.25*Y(1,3)*Y(1,3)-0.5*Y(1,3)*Y(1,4)+

*0.25*Y(1,4)*Y(1,4)

Z4=0.25*Y(1,1)*Y(1,1)+0.5*Y(1,1)*Y(1,2)+0.5*Y(1,1)*Y(1,3)-

*0.5*Y(1,1)*Y(1,4)+0.25*Y(1,2)*Y(1,2)+0.5*Y(1,2)*Y(1,3)-

*0.5*Y(1,2)*Y(1,4)+0.25*Y(1,3)*Y(1,3)-0.5*Y(1,3)*Y(1,4)+

*0.25*Y(1,4)*Y(1,4)

DY(1)=-0.5*Z1+0.5*Z2+0.5*Z3+0.5*Z4+500.*W1-400.*W2+5.*W3-.0005*W4

DY(2)=0.5*Z1-0.5*Z2+0.5*Z3+0.5*Z4-500.*W1+400.*W2+5.*W3-0.0005*W4

DY(3)=0.5*Z1+0.5*Z2-0.5*Z3+0.5*Z4-500.*W1-400.*W2-5.*W3-0.0005*W4

DY(4)=0.5*Z1+0.5*Z2+0.5*Z3-0.5*Z4-500.*W1-400.*W2+5.*W3+0.0005*W4

RETURN

END

SUBROUTINE PEDERV(T,Y,PW,N)

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

REAL*4 PW

DIMENSION Y(8,4),PW(16)

C CALCULO DE LAS DERIVADAS PARCIALES.

FIGURA 6 (continuación)

```
C  EJEMPLO 1 :
C      PW(1)=-2000.
C      PW(2)=1.
C      PW(3)=1000.
C      PW(4)=-1.
C  EJEMPLO 2 :
      DZ11=0.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)
      DZ21=0.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ31=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ41=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)
      DZ12=-.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ22=-.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)
      DZ32=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ42=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)
      DZ13=-.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ23=0.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ33=-.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)
      DZ43=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)-0.5*Y(1,4)
      DZ14=-.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ24=0.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)+0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ34=0.5*Y(1,1)+0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      DZ44=-.5*Y(1,1)-0.5*Y(1,2)-0.5*Y(1,3)+0.5*Y(1,4)
      PW(1)=-0.5*DZ11+0.5*DZ21+0.5*DZ31+0.5*DZ41-447.50025
      PW(2)= 0.5*DZ11-0.5*DZ21+0.5*DZ31+0.5*DZ41+452.49975
      PW(3)= 0.5*DZ11+0.5*DZ21-0.5*DZ31+0.5*DZ41+ 47.49975
      PW(4)= 0.5*DZ11+0.5*DZ21+0.5*DZ31-0.5*DZ41+ 52.50025
      PW(5)=-0.5*DZ12+0.5*DZ22+0.5*DZ32+0.5*DZ42+452.49975
      PW(6)= 0.5*DZ12-0.5*DZ22+0.5*DZ32+0.5*DZ42-447.50025
      PW(7)= 0.5*DZ12+0.5*DZ22-0.5*DZ32+0.5*DZ42- 52.50025
      PW(8)= 0.5*DZ12+0.5*DZ22+0.5*DZ32-0.5*DZ42- 47.49975
      PW(9)=-0.5*DZ13+0.5*DZ23+0.5*DZ33+0.5*DZ43+ 47.49975
      PW(10)=0.5*DZ13-0.5*DZ23+0.5*DZ33+0.5*DZ43- 52.50025
      PW(11)=0.5*DZ13+0.5*DZ23-0.5*DZ33+0.5*DZ43-447.50025
      PW(12)=0.5*DZ13+0.5*DZ23+0.5*DZ33-0.5*DZ43-452.49975
      PW(13)=-.5*DZ14+0.5*DZ24+0.5*DZ34+0.5*DZ44+ 52.50025
      PW(14)=0.5*DZ14-0.5*DZ24+0.5*DZ34+0.5*DZ44- 47.49975
      PW(15)=0.5*DZ14+0.5*DZ24-0.5*DZ34+0.5*DZ44-452.49975
      PW(16)=0.5*DZ14+0.5*DZ24+0.5*DZ34-0.5*DZ44-447.50025
      RETURN
      END
```

ELECCION DEL METODO - SUGERENCIAS

Siguiendo a RALSTON y WILF [7] presentamos una breve lista de sugerencias para la elección del método apropiado.

- Tratándose de un sistema no rígido con pocas ecuaciones y cuya integración se realiza en pocos pasos, se puede elegir entre RKMERS, RKGS o DA02A. (De acuerdo a este trabajo, en ese orden).
- Si el sistema es no rígido pero es largo y complicado, con evaluaciones de la función tediosas, entonces conviene elegir un método predictor-corrector como el de Hamming: HPCG (versión en simple precisión), DHPCG (versión en doble precisión).
- Debe recordarse que para sistemas no rígidos son integradores de un solo paso (lo cual puede ser conveniente a los fines del programa invocante), las rutinas RKMERS y DA01A.
- Para sistemas rígidos o stiff, la elección debe hacerse entre DIFSUB (versión en simple precisión), DDIFSU (versión en doble precisión) o DC01AD. (De acuerdo a este trabajo, en ese orden). Se recuerda que DIFSUB (DDIFSU) es un integrador de un solo paso.

REFERENCIAS

- [1] Biblioteca de rutinas científicas SSPCNEA: rutinas de propósitos generales elaboradas en CNEA (muchas de ellas son traducción de rutinas pertenecientes a A.C.M.) - Centro de Cálculo Científico, CNEA.
- [2] Biblioteca de rutinas científicas HARWELL: (HARWELL SUBROUTINE LIBRARY): rutinas de propósitos generales cuyo catálogo ha sido compilado por M.J. Hopper, Computer Science and Systems Division, Atomic Energy Research Establishment, Harwell, Oxfordshire, England (1980).
- [3] Biblioteca de rutinas científicas SSPFORT: (SCIENTIFIC SUBROUTINE PACKAGE FROTRAN): rutinas de propósitos generales cuya documentación se halla en IBM Programmers's Manual - Program Number 360A-CM-03X GH20-0205-4.
- [4] COLLECTED ALGORITHMS FROM ACM, ACM Transactions on mathematical Software, 1978, Vol. I, II, III, Association for Computing Machinery, New York, U.S.A..
- [5] Boletín Informativo del Centro de Cómputos - Año V - N° 16 - Abril 1981.
- [6] GEAR, C.W.: Numerical initial value problems in ordinary differential equations - ENLOWOOD CLIFS, N.J., PRENTICE-HALL INC. (1971).
- [7] RALSTON-WILF: Mathematical Methods for Digital Computers - VOL. I y II - John Wiley.