

Generalization and Optimization of Linearly Implicit QSS Methods

Abstract. This work proposes a methodology to develop new numerical integration algorithms for ordinary differential equations based on state quantization, generalizing the notions of Linearly Implicit Quantized State Systems (LIQSS) methods. Using this idea, two novel subfamilies of algorithms are designed that improve the performance of original LIQSS methods while preserving their properties regarding stability, global error bound and efficient event handling capabilities. The features of the new algorithms are studied in two application examples where the advantages over classic numerical integration algorithms is also analyzed.

Keywords: Quantized State Systems, Numerical Integration Algorithms, Computational Efficiency

Generalización y Optimización de Métodos QSS Linealmente Implícitos

Resumen Este trabajo propone una metodología para desarrollar nuevos algoritmos de integración numérica para ecuaciones diferenciales ordinarias basados en cuantificación de estados, generalizando las nociones de los métodos QSS linealmente implícitos (LIQSS). Se proponen dos nuevas subfamilias de algoritmos que mejoran el rendimiento de los métodos LIQSS originales, preservando sus propiedades de estabilidad, cota global de error y capacidad para gestionar eventos de forma eficiente. Las características de los nuevos algoritmos se estudian mediante dos ejemplos de aplicación, en los cuales también se analizan sus ventajas respecto de los algoritmos clásicos de integración numérica.

Keywords: Sistemas de Estados Cuantificados, Algoritmos de Integración Numérica, Eficiencia Computacional

1 Introducción

Los métodos QSS constituyen una alternativa a los esquemas clásicos de integración de EDOs basada en cuantificación de estados. Este enfoque resulta particularmente eficiente en sistemas con actividad heterogénea y discontinuidades.

Dentro de esta familia, los métodos QSS incluyen variantes de distinto orden, así como los métodos linealmente implícitos (LIQSS), que permiten abordar de manera eficiente ciertos tipos de sistemas rígidos.

En este trabajo proponemos una metodología general para el diseño de métodos LIQSS basada en la construcción de un polinomio $p_i(t)$, diferencia entre el estado y su versión cuantificada. A partir de esta idea, redefinimos los métodos existentes e introducimos una nueva familia basada en polinomios de Chebyshev (CheQSS), que bajo ciertas condiciones permite maximizar el tamaño de paso para una tolerancia dada, haciendo que el número de pasos se aproxime a cota inferior establecida en Bergonzi, Castro y Kofman, 2025.

Los métodos se evalúan en dos casos de estudio, mostrando mejoras respecto a métodos QSS tradicionales y solvers clásicos.

2 Preliminares

2.1 Métodos de QSS

Consideremos un sistema de EDOs de la forma

$$\dot{\mathbf{x}}_a(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_a(t), t) \quad (1)$$

donde $\mathbf{x}_a(t) \in \mathbb{R}^N$ es el vector de estados. El método Quantized State System de primer orden (QSS1) (Kofman y Junco, 2001) lo aproxima mediante:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}^q(\mathbf{q}(t), t) \quad (2)$$

donde $\mathbf{q}(t)$ es el vector de estados cuantificados y $\mathbf{f}^q(\mathbf{q}, t)$ es una aproximación constante por tramos de $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$.

Cada estado $x_i(t)$ se aproxima mediante $q_i(t)$, que se actualiza sólo cuando $|x_i(t) - q_i(t)|$ supera el *quantum* ΔQ_i . Esto da lugar a simulaciones asincrónicas orientadas a eventos. Dado que $\mathbf{q}(t)$ es constante por tramos, las trayectorias de $\mathbf{x}(t)$ resultan polinomiales por tramos. En la Figura 1(a) se muestran las trayectorias típicas del estado y estado cuantificado en QSS1.

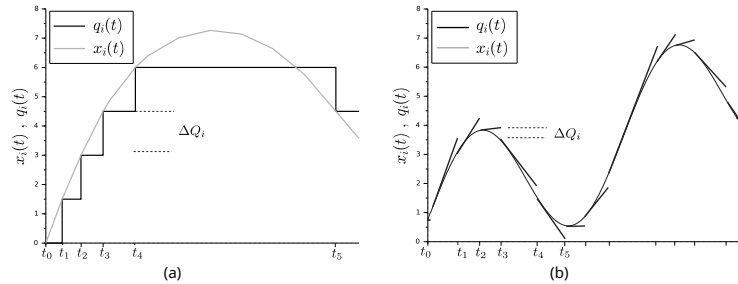


Figura 1: Típicos trayectos del estado y estado cuantificado: (a) QSS1, (b) QSS2

En QSS1, el número de pasos crece linealmente con la precisión. Para mejorar esta relación, se introdujeron los métodos QSS2, donde los estados cuantificados son lineales, generando trayectorias cúbicas para los estados, como lo muestra la Figura 1(b) y QSS3, con trayectorias cuadráticas y cúbicas por tramos, para los estados cuantificados y los estados respectivamente (Kofman, 2002, 2004).

Los métodos QSS son eficientes en sistemas grandes y dispersos, ya que en cada paso sólo se actualiza el estado que haya cambiado significativamente y las derivadas que dependan de él, lo cual es ventajoso en sistemas con actividad heterogénea (Bergonzi, Castro y Kofman, 2025). Además, manejan discontinuidades sin reinicializar la simulación, lo que facilita la detección de eventos.

Desde el punto de vista teórico, la cuantificación introduce una perturbación acotada por el quantum, lo que permite garantizar convergencia cuando $\Delta Q \rightarrow 0$ y obtener cotas de error global proporcionales a ΔQ en sistemas lineales (Cellier y Kofman, 2006).

2.2 Métodos de LIQSS

En sistemas rígidos, los métodos QSS pueden presentar oscilaciones espurias similares a las de los métodos explícitos clásicos de paso variable, lo que conduce a un número excesivo de pasos.

Para abordar este problema, en Migoni et al., 2013 se desarrollaron los métodos QSS Linealmente Implícitos (LIQSS). La idea central se inspira en técnicas implícitas, evaluando las derivadas en instantes futuros, aprovechando que en QSS se conocen los valores futuros posibles de los estados cuantificados ($q_i(t) \pm \Delta Q_i$). Si la derivada futura se predice positiva, se toma $q_i(t) = x_i(t) + \Delta Q_i$, y si es negativa, $q_i(t) = x_i(t) - \Delta Q_i$.

En algunos casos, ambas elecciones conducen a derivadas de signo opuesto, lo que implica la existencia de un valor intermedio q_i^* tal que $\dot{x}_i(t) = 0$. En esta situación de equilibrio, se toma $q_i(t) = q_i^*$, evitando nuevos pasos.

La predicción del signo de la derivada y el cálculo de q_i^* se realizan mediante una aproximación lineal:

$$\dot{x}_i(t) = \mathbf{f}^q_i(\mathbf{q}(t), t) = a_i(t_j^i)q_i(t) + u_i(t) \quad (3)$$

donde

$$a_i(t_j^i) = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{q}(t_j^i)}, \quad u_i(t) = \mathbf{f}_i^q(\mathbf{q}(t), t) - a_i(t_j^i)q_i(t). \quad (4)$$

Se han desarrollado también las versiones de segundo y tercer orden (LIQSS2 y LIQSS3). Las mismas extienden estas ideas utilizando trayectorias lineales y cuadráticas por tramos para los estados cuantificados.

2.3 Stand-Alone QSS solver

El Stand-Alone QSS Solver (Fernández y Kofman, 2014) es una de las implementaciones más completas de la familia QSS. Permite especificar modelos en

μ -Modelica y traducirlos automáticamente a código C, incluyendo las EDOs, detección de eventos y manejo de discontinuidades.

En esta misma herramienta también están implementados otros solvers clásicos (DOPRI, DASSL, CVODE, IDA).

3 Generalización de los métodos LIQSS

En esta sección presentamos un procedimiento para diseñar métodos LIQSS generales a partir de la definición de un polinomio $p_i(t)$ que representa la diferencia entre $q_i(t)$ y $x_i(t)$. En primer lugar, mostramos que mediante una elección adecuada de este polinomio es posible redefinir los algoritmos LIQSS existentes y extenderlos para realizar pasos de mayor tamaño. Luego, proponemos un polinomio $p_i(t)$ que maximiza el tamaño de paso, dando lugar a una nueva familia de algoritmos denominada métodos LIQSS de Chebyshev.

3.1 Formulación básica

Consideremos el sistema de la Ec. (1), su aproximación QSS dada por la Ec. (2) y la aproximación lineal de sus componentes definida en las Ecs. (3)–(4).

Supondremos, sin pérdida de generalidad, que $t_j^i = 0$. Además, para simplificar la notación, escribiremos $a_i(t_j^i) = a_i(0) = a_i$.

Definimos entonces el polinomio de diferencia $p_i(t)$ como:

$$p_i(t) = x_i(t) - q_i(t) \quad (5)$$

Dado un polinomio $p_i(t)$ de orden n , el objetivo es determinar $q_i(t)$ (de orden $n-1$) tal que la trayectoria $x_i(t)$ obtenida al integrar la Ec. (3) verifique la Ec. (5).

En primer lugar definimos los coeficientes auxiliares

$$r_1 \triangleq a_i x_i(0) + u_i(0) \quad (6a) \quad s_1 \triangleq a_i p_i(0) + \dot{p}_i(0) \quad (7a)$$

$$r_2 \triangleq a_i^2 x_i(0) + a_i u_i(0) + \dot{u}_i(0) \quad (6b) \quad s_2 \triangleq a_i^2 p_i(0) + a_i \dot{p}_i(0) + \ddot{p}_i(0) \quad (7b)$$

$$r_3 \triangleq a_i^3 x_i(0) + a_i^2 u_i(0) + a_i \dot{u}_i(0) + \ddot{u}_i(0) \quad (6c) \quad s_3 \triangleq a_i^3 p_i(0) + a_i^2 \dot{p}_i(0) + a_i \ddot{p}_i(0) + \ddot{\ddot{p}}_i(0) \quad (7c)$$

Notar que los coeficientes r_k y s_k solo dependen del estado inicial $x_i(0)$, el polinomio $p_i(t)$ y los parámetros de la aproximación lineal.

Luego, derivando la Ec. (5) y utilizando la aproximación lineal y los coeficientes auxiliares, se obtiene un sistema que permite calcular las derivadas de $q_i(t)$ en función de $p_i(t)$ y de los términos de la aproximación lineal (a_i y $u_i(t)$):

$$q_i(0) = x_i(0) - p_i(0) \quad (8a)$$

$$\dot{q}_i(0) = r_1 - s_1 \quad (8b)$$

$$\ddot{q}_i(0) = r_2 - s_2 \quad (8c)$$

$$\ddot{\ddot{q}}_i(0) = r_3 - s_3 \quad (8d)$$

Siguiendo los principios de los métodos QSS, $p_i(t)$ debe satisfacer que $|p_i(t)| \leq \Delta Q_i$ en el intervalo $[0, t_1^i]$ (donde t_1^i es el instante del próximo cambio en el estado cuantificado q_i). Esto conduce a dos situaciones posibles:

1- Equilibrio. Siempre que sea posible, se busca una solución constante $p_i(t) = c$ con $|c| \leq \Delta Q_i$, de modo que $q_i(t)$ y $x_i(t)$ evolucionen en forma paralela. En este caso, para un método de orden n , se obtiene: $c = \frac{r_n}{a_i^n}$ (si $a_i \neq 0$); y la condición de existencia de equilibrio es $\left| \frac{r_n}{a_i^n} \right| \leq \Delta Q_i$

Cuando $a_i = 0$, la condición se reduce a $r_n = 0$, y puede tomarse $q_i(t) = x_i(t)$.

En consecuencia, las trayectorias del estado cuantificado en condición de equilibrio se caracterizan como:

$$q_i(t) = \begin{cases} x_i(t) - \frac{r_n}{a_i^n} & \text{if } |r_n| \leq |a_i|^n \Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i(t) & \text{if } r_n = a_i = 0 \end{cases} \quad (9a)$$

$$\dot{q}_i(t) = a_i q_i(t) + u_i(t) \quad (9b)$$

$$\ddot{q}_i(t) = a_i \dot{q}_i(t) + \dot{u}_i(t) \quad (9c)$$

donde r_n está definido en la Ec.(6)

2- Caso general. En caso de que no exista una solución de equilibrio con $p_i(t) = c$ y $|c| \leq \Delta Q_i$, se definirán $q_i(t)$ y sus derivadas (según el orden del método) en función de la elección de $p_i(t)$.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, a continuación desarrollamos los algoritmos LIQSS y los métodos LIQSS de Chebyshev de orden 1 a 3.

3.2 Redefinición de los métodos de LIQSS

Tomando $p_i(t)$ según la Ec. (10), podemos redefinir los métodos de LIQSS de primer, segundo y tercer orden.

$$p_i(t) = b_n(t_m - t)^n \quad (10)$$

donde $t_m > 0$ es el instante en el cual $q_i(t) = x_i(t)$ y b_n es el coeficiente principal de $x_i(t)$ (el cual es desconocido, ya que depende de la elección de q_i).

A continuación detallamos las nuevas definiciones. Los desarrollos y deducciones para llegar a las mismas pueden encontrarse en Bergonzi, Fernández y Kofman, 2025.

Método LIQSS de primer orden En el método LIQSS1, tomando $p_i(t)$ según la Ec. (10) y $n = 1$ en la Ec. (7a) y teniendo en cuenta que $s_1 = r_1$, se obtiene $a_i p_i(0) - \frac{p_i(0)}{t_m} = r_1$, de donde

$$\left(\frac{r_1}{p_i(0)} - a_i \right) t_m + 1 = 0.$$

Dado que $|p_i(0)| = \Delta Q_i$ y $|r_1/a_i| \geq \Delta Q_i$, el signo de $p_i(0)$ debe ser opuesto al de r_1 para garantizar $t_m > 0$. Por lo que $p_i(0) = -\text{sign}(r_1)\Delta Q_i$.

Las ecuaciones para q_i , considerando también el caso de equilibrio de la Ec. (9), son:

$$q_i = \begin{cases} x_i - \frac{r_1}{a_i} & \text{si } |r_1| \leq |a_i|\Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i & \text{si } r_1 = a_i = 0 \\ x_i + \text{sign}(r_1)\Delta Q_i & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (11)$$

con $r_1 = a_i x_i + u_i$ y los coeficientes a_i y u_i según Ec. (4).

Método LIQSS de segundo orden Realizando el procedimiento análogo al realizado para LIQSS1, obtenemos:

$$q_i = \begin{cases} x_i - \frac{r_2}{a_i^2} & \text{si } |r_2| \leq |a_i|^2 \Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i & \text{if } r_2 = a_i = 0 \\ x_i - \text{sign}(r_2)\Delta Q_i & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (12a)$$

$$\dot{q}_i = \begin{cases} a_i q_i + u_i & \text{si } |r_2| \leq |a_i|^2 \Delta Q_i \\ a_i q_i + u_i + 2 \frac{\text{sign}(r_2)\Delta Q_i}{t_m} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (12b)$$

donde:

- t_m es la única solución positiva de $\left(\frac{r_2}{p_i(0)} - a_i^2\right)t_m^2 + 2a_i t_m - 2 = 0$
- $r_2 = a_i^2 x_i + a_i u_i + \dot{u}_i$ (con a_i y u_i según Ec. (4))

Método LIQSS de tercer orden Realizando el procedimiento análogo al realizado para LIQSS1, obtenemos:

$$q_i = \begin{cases} x_i - \frac{r_3}{a_i^3} & \text{si } |r_3| \leq |a_i|^3 \Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i & \text{si } r_3 = a_i = 0 \\ x_i + \text{sign}(r_3)\Delta Q_i & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (13a)$$

$$\dot{q}_i = \begin{cases} a_i q_i + u_i & \text{si } |r_3| \leq |a_i|^3 \Delta Q_i \\ a_i q_i + u_i + 3 \frac{\text{sign}(r_3)\Delta Q_i}{t_m} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (13b)$$

$$\ddot{q}_i = \begin{cases} a_i \dot{q}_i + \dot{u}_i & \text{si } |r_3| \leq |a_i|^3 \Delta Q_i \\ a_i \dot{q}_i + \dot{u}_i - 6 \frac{\text{sign}(r_3)\Delta Q_i}{t_m^2} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (13c)$$

donde:

- t_m es la única solución real positiva de $\left(\frac{r_3}{p_i(0)} - a_i^3\right)t_m^3 + 3a_i^2 t_m^2 - 6a_i t_m + 6 = 0$
- $r_3 = a_i^3 x_i + a_i^2 u_i + a_i \dot{u}_i + \ddot{u}_i$ (con a_i y u_i según Ec. (4))

Política de actualización del estado cuantificado Las ecuaciones anteriores definen $q_i(t)$ pero no el instante del próximo cambio en el estado cuantificado, para lo que se pueden considerar dos alternativas:

- En la formulación original de Migoni et al., 2013, los pasos de LIQSS se realizan inmediatamente después de que el estado cuantificado q_i alcanza al estado x_i .
- Una alternativa a esta solución consiste en realizar los pasos únicamente cuando la diferencia entre el estado y el estado cuantificado alcanza el quantum (independientemente de que $q_i(t)$ alcance a $x_i(t)$). De este modo, pueden realizarse pasos más grandes sin incrementar la cota de error, ya que la diferencia entre x_i y q_i estará igualmente acotada por ΔQ_i .

Denominaremos *LIQSS extendidos* (eLIQSS) a los algoritmos que utilizan esta segunda política de actualización.

3.3 Métodos LIQSS basados en los polinomios de Chebyshev

La idea central de los métodos Chebyshev LIQSS (CheQSS) es utilizar un polinomio de diferencia $p_i(t)$ que maximice el intervalo de tiempo durante el cual permanece acotado por $\pm \Delta Q_i$. Esta idea maximiza el tiempo durante el cual $q_i(t)$ se mantiene cercano a $x_i(t)$, lo que a su vez maximiza el intervalo entre pasos sucesivos y reduce (al menos en teoría) el número total de pasos.

Maximización del tamaño de paso La base de los métodos CheQSS está dada por el resultado obtenido en Bergonzi, Castro y Kofman, 2025, donde se establece una cota superior para el tiempo durante el cual una trayectoria de estado $x_i(t)$ y una trayectoria de estado cuantificado $q_i(t)$ pueden permanecer cercanas entre sí. Luego, el siguiente teorema construye un polinomio $q_i(t)$ de orden $n - 1$ (o menor) que verifica dicha cota.

Teorema 1 *Sea $x_i(t)$ un polinomio de grado n con coeficiente principal b_n . Consideremos el polinomio*

$$q_i(t) = x_i(t) - \text{sign}(b_n) \cdot \Delta Q_i \cdot T_n\left(\frac{2t - t_m(n)}{t_m(n)}\right) \quad (14)$$

donde $T_n(\cdot)$ denota el polinomio de Chebyshev de grado n . Entonces, $q_i(t)$ verifica las siguientes propiedades:

1. Tiene grado menor o igual que $n - 1$.
2. Satisface la condición $|q_i(t) - x_i(t)| \leq \Delta Q_i$ en el intervalo $[0, t_m(n)]$, con
$$t_m(n) = \frac{2^{\frac{2n-1}{n}} \Delta Q_i^{\frac{1}{n}}}{a_{x_i}^{(n)}(t_j)}.$$

Este último resultado, cuya demostración pueden encontrarse en Bergonzi, Fernández y Kofman, 2025, constituye la base para el diseño de los métodos

Chebyshev LIQSS. Utilizando la definición de la Ec. (5) y teniendo en cuenta la Ec. (14), un método CheQSS de orden n puede formularse seleccionando

$$p_i(t) = \text{sign}(b_n) \cdot \Delta Q_i \cdot T_n\left(\frac{2t - t_m(n)}{t_m(n)}\right) \quad (15)$$

Cabe destacar que $x_i(t)$ depende de $q_i(t)$. Por lo tanto, ni b_n ni $t_m(n)$ son conocidos a priori.

Método Chebyshev LIQSS de primer orden En el método Chebyshev LIQSS de primer orden, tomando $n = 1$ y recordando que $T_1(z) = z$, podemos obtener a partir de la Ec. (15) la expresión del polinomio $p_i(t)$ y su primera derivada de la siguiente manera

$$\begin{aligned} p_i(t) &= \text{sign}(b_1) \Delta Q_i \cdot \frac{2t - t_m(1)}{t_m(1)} \\ \dot{p}_i(t) &= \text{sign}(b_1) \Delta Q_i \cdot \frac{2}{t_m(1)} \end{aligned}$$

Luego, evaluando estas expresiones en $t = 0$, obtenemos:

$$p_i(0) = -\text{sign}(b_1) \Delta Q_i \quad (17a)$$

$$\dot{p}_i(0) = \text{sign}(b_1) \Delta Q_i \frac{2}{t_m(1)} = -p_i(0) \frac{2}{t_m(1)} \quad (17b)$$

y reemplazando en la expresión de s_1 de la Ec. (7) tenemos

$$s_1 = a_i p_i(0) + \dot{p}_i(0) = a_i p_i(0) - p_i(0) \frac{2}{t_m(1)}$$

Recordando que $s_1 = r_1$, resulta:

$$\left(\frac{r_1}{p_i(0)} + a_i \right) t_m(1) + 2 = 0 \quad (18)$$

De la Ec. (17) observamos que $|p_i(0)| = \Delta Q_i$ y que $|r_i/a_i| \geq \Delta Q_i$, por lo tanto el signo de $p_i(0)$ debe ser opuesto al de r_1 (de lo contrario $t_m(1)$ resultaría negativo). Así, obtenemos $p_i(0) = -\text{sign}(r_1) \Delta Q_i$ y las ecuaciones para q_i , considerando también el caso de equilibrio de la Ec. (9), son

$$q_i = \begin{cases} x_i - \frac{r_1}{a_i} & \text{si } |r_1| \leq |a_i| \Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i & \text{si } r_1 = a_1 = 0 \\ x_i + \text{sign}(r_1) \Delta Q_i & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (19)$$

con $r_1 = a_i x_i + u_i$. Notar que la Ec. (19) es idéntica a la Ec. (11), por lo que LIQSS1 y CheQSS1 son equivalentes.

Método Chebyshev LIQSS de segundo orden En el algoritmo de segundo orden, tomando $n = 2$ y recordando que $T_2(z) = 2z^2 - 1$, siguiendo un procedimiento análogo al anterior podemos obtener los valores de q_i y $\dot{q}_i$, considerando también el caso de equilibrio de la Ec. (9):

$$q_i = \begin{cases} x_i - \frac{r_2}{a_i^2} & \text{si } |r_2| \leq |a_i|^2 \Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i & \text{si } r_2 = a_i = 0 \\ x_i - \text{sign}(r_2) \Delta Q_i & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (20a)$$

$$\dot{q}_i = \begin{cases} a_i q_i + u_i & \text{si } |r_2| \leq |a_i|^2 \Delta Q_i \\ a_i q_i + u_i + 8 \frac{\text{sign}(r_2) \Delta Q_i}{t_m(2)} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (20b)$$

donde:

- $t_m(2)$ es la única solución positiva de $\left(\frac{r_2}{p_i(0)} - a_i^2\right) t_m(2)^2 + 8a_i t_m(2) - 16 = 0$
- $r_2 = a_i r_1 + \dot{u}_i$ (con a_i y u_i según Ec. (4))

Método Chebyshev LIQSS de tercer orden En el algoritmo de tercer orden, tomando $n = 3$, recordando que $T_3(z) = 4z^3 - 3z$ y siguiendo un procedimiento análogo al realizado en CheQSS de orden 1, podemos obtener los valores de q_i , $\dot{q}_i$ y $\ddot{q}_i$, considerando también el caso de equilibrio de la Ec. (9):

$$q_i = \begin{cases} x_i - \frac{r_3}{a_i^3} & \text{si } |r_3| \leq |a_i|^3 \Delta Q_i \wedge a_i \neq 0 \\ x_i & \text{si } r_3 = a_i = 0 \\ x_i + \text{sign}(r_3) \Delta Q_i & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (21a)$$

$$\dot{q}_i = \begin{cases} a_i q_i + u_i & \text{si } |r_3| \leq |a_i|^3 \Delta Q_i \\ a_i q_i + u_i - 18 \frac{\text{sign}(r_3) \Delta Q_i}{t_m(3)} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (21b)$$

$$\ddot{q}_i = \begin{cases} a_i \dot{q}_i + \dot{u}_i & \text{si } |r_3| \leq |a_i|^3 \Delta Q_i \\ a_i \dot{q}_i + \dot{u}_i + 96 \frac{\text{sign}(r_3) \Delta Q_i}{t_m(3)^2} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (21c)$$

donde:

- $t_m(3)$ es la única solución real positiva de $\left(\frac{r_3}{p_i(0)} - a_i^3\right) t_m(3)^3 + 18a_i t_m(3)^2 - 96t_m(3) + 192 = 0$
- $r_3 = a_i^3 x_i + a_i^2 u_i + a_i \dot{u}_i + \ddot{u}_i$ (con a_i y u_i según Ec. (4))

3.4 Comportamiento de LIQSS, eLIQSS y CheQSS

La Figura 2 muestra las trayectorias típicas de los nuevos algoritmos (eLIQSS y CheQSS) y la Figura 3 muestra además las trayectorias del polinomio $p(t) = q(t) - x(t)$ para cada método, donde pueden apreciarse las propiedades típicas de equioscilaación de los polinomios de Chebyshev.

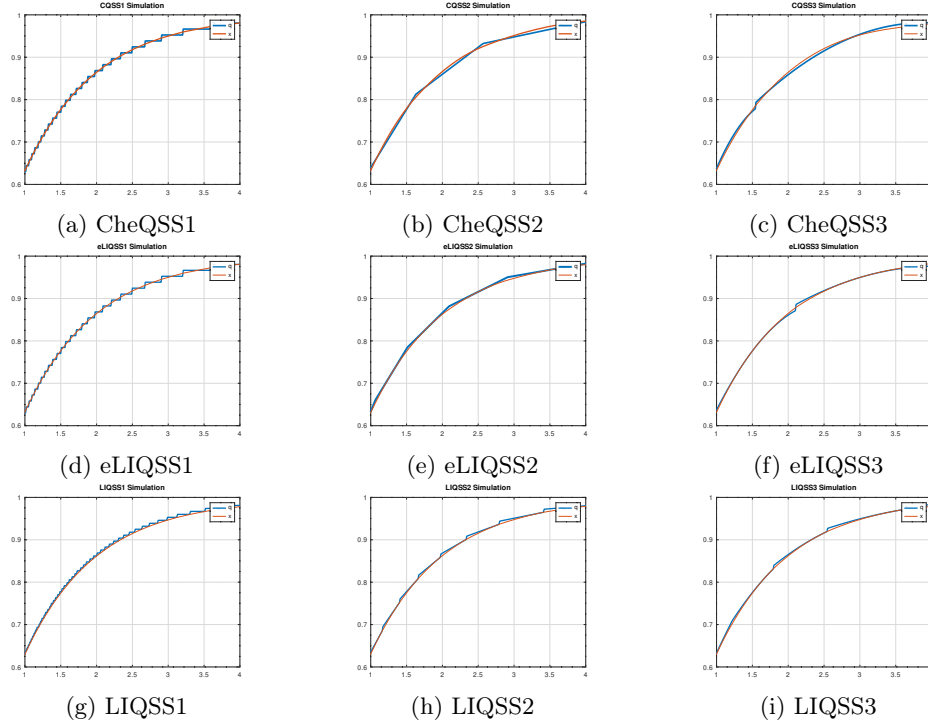


Figura 2: Trayectorias típicas del estado y del estado cuantificado para los nuevos métodos LIQSS .

Una observación importante es que las propiedades teóricas de los métodos QSS, como la estabilidad práctica, la convergencia y las cotas de error, se derivan de la condición $|q_i(t) - x_i(t)| \leq \Delta Q_i$, la cual implica que la cuantificación del estado es equivalente a introducir perturbaciones acotadas. Dado que todos los algoritmos eLIQSS y CheQSS verifican $|p_i(t)| = |q_i(t) - x_i(t)| \leq \Delta Q_i$ (ver Fig. 3), estos heredan las mismas propiedades de convergencia y cotas de error que los métodos QSS estándar.

Los algoritmos eLIQSS y CheQSS fueron implementados en la herramienta Stand-Alone QSS Solver (Fernández y Kofman, 2014). Todos los nuevos métodos están incluidos en la versión actual de la herramienta, disponible en <https://github.com/CIFASIS/qss-solver>.

4 Ejemplos de aplicación

En esta sección se comparan los métodos propuestos (eLIQSS y CheQSS) con QSS, LIQSS y métodos clásicos de integración temporal.

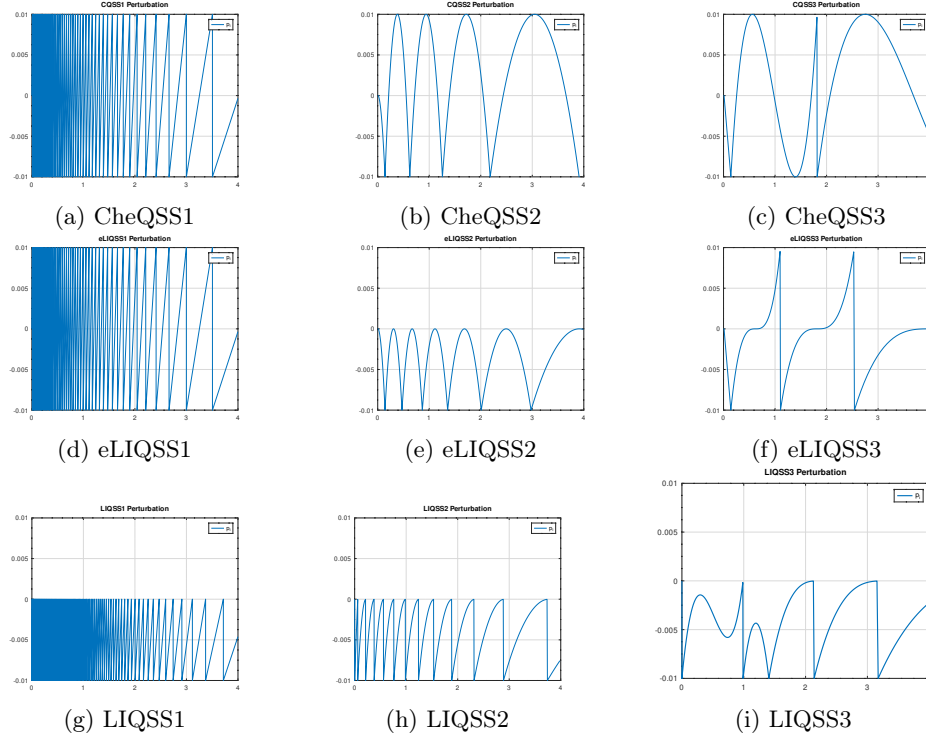


Figura 3: Diferencia entre las trayectorias del estado y del estado cuantificado para los nuevos métodos LIQSS.

Las simulaciones se realizaron con *Stand-Alone QSS Solver* (Fernández y Kofman, 2014) en un Intel i5-10400 (Ubuntu 22.04). Los modelos utilizados están disponibles en la distribución del software.

4.1 Modelo de Advección-Difusión-Reacción (ADR)

Se considera un modelo 1D ADR:

$$\dot{x}_i = -A \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta x} + D \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{\Delta x^2} + R(x_i^2 - x_i^3) \quad (22)$$

para $i = 2, 3, \dots, N-1$. Con A , D y R los parámetros de advección, difusión y reacción respectivamente; N es el número de secciones y Δx es la amplitud de cada sección. Para el primer ($i = 1$) y último ($i = N$) punto de la grilla se consideran ciertas condiciones de borde.

Simulamos durante 3 segundos con $N = 100$, $L = 10$, $\Delta x = 10/N$, y parámetros $A = 1$, $D = 0.1$, $R = 100$. Evaluamos distintos órdenes ($n = 1, 2, 3$) y tolerancias (ΔQ_{rel} , ΔQ_{abs}) y comparamos con CVODE-BDF (mejor método clásico para este caso). La Tabla 1 muestra pasos, tiempos y error absoluto medio (MAE) respecto a una solución de referencia.

Cuadro 1: Número de pasos, tiempo de CPU y errores de diferentes algoritmos de integración numérica en la simulación del modelo ADR.

n	Rel.	Abs.	N° Steps			CPU Time (ms)			MAE		
	Tol.	Tol.	CheQSS _n	eLIQSS _n	LIQSS _n	CheQSS _n	eLIQSS _n	LIQSS _n	CheQSS _n	eLIQSS _n	LIQSS _n
1	10^{-2}	10^{-4}	28701	28701	56464	4.4	4.6	8.8	1.8e-04	1.8e-04	2.2e-03
	10^{-3}	10^{-5}	280812	280812	559419	41.6	41.2	85.3	2.2e-05	2.2e-05	2.3e-04
	10^{-4}	10^{-6}	2801858	2801858	5589295	408.4	405.0	818.5	2.7e-06	2.7e-06	2.3e-05
2	10^{-2}	10^{-4}	3173	3644	4324	1.3	1.4	1.6	3.4e-04	5.2e-04	5.9e-04
	10^{-3}	10^{-5}	8211	9892	13009	3.0	3.4	4.6	6.8e-05	3.1e-05	5.7e-05
	10^{-4}	10^{-6}	23510	28617	41124	7.9	9.5	13.9	8.6e-06	4.4e-06	5.8e-06
3	10^{-2}	10^{-4}	3345	2548	5956	3.1	2.3	5.2	2.8e-04	3.7e-04	2.7e-04
	10^{-3}	10^{-5}	5995	4012	9183	5.6	3.5	7.9	3.4e-05	3.3e-05	3.7e-05
	10^{-4}	10^{-6}	12142	7131	16050	10.6	6.1	13.5	4.6e-06	2.1e-06	4.2e-06
CVODE											
5	10^{-2}	10^{-4}	314			8.1			1.0e-03		
	10^{-3}	10^{-5}	414			8.2			2.4e-04		
	10^{-4}	10^{-6}	649			10			2.0e-05		
	10^{-5}	10^{-7}	870			15.5			2.0e-06		

Observaciones principales:

- eLIQSS y CheQSS requieren menos pasos y menor tiempo que LIQSS en todos los casos. Para todos, el tiempo escala como $\mathcal{O}(N_{\text{steps}})$.
- CVODE solo supera a métodos de orden 1; para órdenes 2 y 3, los métodos QSS son más eficientes.
- Los errores son del orden de ΔQ_{abs} . LIQSS1 presenta mayor error debido a sesgo en el signo del error.
- CVODE presenta errores similares a LIQSS, mayores que eLIQSS y CheQSS.
- Comparando eLIQSS y CheQSS se pueden destacar los siguientes aspectos:
 - En orden 1, ambos métodos presentan exactamente el mismo comportamiento, tal como se anticipó previamente.
 - Para órdenes superiores, ambos métodos producen errores del mismo orden de magnitud en todos los casos analizados. Sin embargo, se observa que en segundo orden, CheQSS resulta más eficiente, y en tercer orden, eLIQSS tiene mejor desempeño en términos de costo computacional.
 - Estas diferencias pueden explicarse ya que la maximización del paso de CheQSS se cumple en sistemas lineales de primer orden. En sistemas no lineales, o cuando la trayectoria $x_i(t)$ experimenta cambios en su derivada debido a eventos asociados a otros estados cuantificados q_j , el intervalo entre pasos puede reducirse respecto del valor teórico máximo y eLIQSS puede tener mejor eficiencia computacional.

4.2 Red Neuronal Pulsante (SNN)

Se analiza una red neuronal tipo LIF (Leaky Integrate-and-Fire) con estados $V_i(t)$ e $I_i^s(t)$:

$$\frac{dI_i^s}{dt} = -\frac{I_i^s}{\tau_s} \quad \frac{dV_i}{dt} = -\frac{V_i - E_L}{\tau_m} + \frac{I_i^s}{C_m}$$

para $i = 1, \dots, N_e$, donde N_e representa el número total de neuronas en la red. Las definiciones y valores de los parámetros τ_s , E_L , τ_m , y C_m son los mismos que los utilizados en Bergonzi, Fernández y Kofman, 2025.

El modelo incluye eventos de disparo cada vez que el potencial de membrana $V_i(t)$ de la neurona i , alcanza el umbral de disparo θ , lo que genera que se resetee su valor según $V_i(t^+) = V_r$. También se incluyen eventos de actualizaciones de la corriente sináptica I_j^s , cada vez que una neurona j recibe una spike.

Simulamos una red de 1000 neuronas, con conectividad aleatoria durante 0,05s usando diferentes métodos (CheQSS, eLIQSS, QSS y DOPRI) y valores de tolerancias. Medimos el error relativo medio (MRE) en la cantidad total de spikes (debido a la característica caótica del modelo) comparando con una solución de referencia de alta precisión. Los resultados de las simulaciones y valores de MRE obtenidos están reportados en la Tabla 2.

Cuadro 2: Número de pasos, tiempo de CPU y errores de diferentes algoritmos de integración numérica en la simulación del modelo SNN.

n	Abs.	N° Steps			CPU Time (ms)			MRE spikes (ms)		
		CheQSS _n	eLIQSS _n	QSS _n	CheQSS _n	eLIQSS _n	QSS _n	CheQSS _n	eLIQSS _n	QSS _n
2	10^{-1}	222420	248389	487716	119.0	129.1	191.9	1.84E-03	1.40E-03	2.22E-03
	10^{-2}	576976	676553	1342798	244.6	279.5	453.0	4.73E-04	3.97E-04	3.03E-04
	10^{-3}	1713686	2026289	4080886	642.1	748.1	1296.8	3.77E-05	3.75E-05	3.77E-05
	10^{-4}	5265527	6284049	12603478	1877.9	2205.9	3851.6	0	0	0
	10^{-5}	16300337	19749735	39542559	5592.9	6748.6	10908.7	0	0	0
3	10^{-1}	156299	178947	471965	156.3	165.2	312.8	2.05E-03	1.31E-03	8.93E-04
	10^{-2}	234559	311722	695625	204.4	244.9	426.9	3.80E-04	5.11E-04	3.60E-04
	10^{-3}	411516	537240	1167814	317.4	383.7	657.2	1.13E-04	0	0
	10^{-4}	776038	1063599	2270492	542.9	699.7	1211.8	0	0	0
	10^{-5}	1558635	2220378	4625227	1040.5	1401.2	2400.7	0	0	0
DOPRI										
5	10^{-1}	59925			7823.2			3.79E-05		
	10^{-2}	60185			7752.9			1.88E-05		
	10^{-3}	60277			7627.9			0		
	10^{-4}	60314			7550.2			0		
	10^{-5}	60329			7487.7			0		

Observaciones principales:

- CheQSS y eLIQSS son más eficientes que QSS en pasos y tiempo. Particularmente, CheQSS es más eficiente que eLIQSS (10–40 % menos pasos).
- DOPRI usa menos pasos pero es más costoso por paso, resultando en mayor tiempo total.
- Los errores de los métodos de la familia QSS son similares y decrecen con la tolerancia.
- En DOPRI, el paso queda limitado por eventos, lo que da alta precisión pero mayor costo computacional.

5 Conclusiones y Trabajo Futuro

En este trabajo presentamos un procedimiento para desarrollar nuevos algoritmos LIQSS a partir del diseño del polinomio de diferencia $p_i(t) = x_i(t) - q_i(t)$. A partir de esta idea, reformulamos los métodos LIQSS de orden 1 a 3 y propusimos una versión extendida (eLIQSS) capaz de realizar pasos de integración más grandes. Con el objetivo de maximizar el tamaño de paso, presentamos además los métodos Chebyshev LIQSS (CheQSS) de orden 1 a 3.

Dado que los nuevos algoritmos verifican la condición $|p_i(t)| = |x_i(t) - q_i(t)| \leq \Delta Q_i$, heredan las propiedades teóricas de los métodos QSS en términos de convergencia y cotas de error global.

Los métodos propuestos fueron implementados en la herramienta Stand Alone QSS Solver y evaluados en dos casos de estudio: un modelo ADR discretizado en el espacio y una red neuronal pulsante. En ambos casos, eLIQSS y CheQSS mostraron un mejor desempeño que los métodos QSS originales y los solvers clásicos en tiempo discreto.

Como líneas futuras de investigación, se pueden diseñar nuevos algoritmos QSS que tengan un equilibrio entre maximización de paso y robustez, para mejorar su eficiencia en modelos que no sean lineales ni desacoplados.

Referencias

- Bergonzi, M., Castro, R., & Kofman, E. (2025). Activity Homogeneity: A Measure for Comparing Time Discretization and State Quantization in ODE Simulation. *SIMULATION*.
- Bergonzi, M., Fernández, J., & Kofman, E. (2025). On General Linearly Implicit Quantized State System Methods. *arXiv preprint arXiv:2512.17855*.
- Cellier, F. E., & Kofman, E. (2006). *Continuous system simulation*. Springer.
- Fernández, J., & Kofman, E. (2014). A stand-alone quantized state system solver for continuous system simulation. *Simulation*, 90(7), 782-799.
- Kofman, E. (2002). A second-order approximation for DEVS simulation of continuous systems. *Simulation*, 78(2), 76-89.
- Kofman, E. (2004). Discrete event simulation of hybrid systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(5), 1771-1797.
- Kofman, E., & Junco, S. (2001). Quantized-state systems: a DEVS Approach for continuous system simulation. *Transactions of the Society for Computer Simulation International*, 18(3), 123-132.
- Migoni, G., Bortolotto, M., Kofman, E., & Cellier, F. (2013). Linearly implicit quantization-based integration methods for stiff ordinary differential equations. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 35, 118-136.