
**RUNGE-KUTTA METODO INPLIZITU SIMPLETIKOEN
IMPLEMENTAZIO ERAGINKORRA,
EGUZKI-SISTEMAREN SIMULAZIORAKO
APLIKAZIOAREKIN.**

Mikel Antonana Otano

Konputazio Zientzia eta Adimen Artifiziala Saila
Informatika fakultatea



Doktorego tesia
Donostia 2017

Gaien Aurkibidea

I. Sarrera	3
1. Sarrera	5
II. Oinarriak	13
2. Zenbakizko integratzaile sinplektikoak	15
3. Problemak	41
4. Koma higikorreko aritmetika	55
III. Ekarpenak.	65
5. IRK: Puntu-finkoaren iterazioa.	67
6. IRK: Newtonen Iterazioa.	91
7. IRK metodo sinpletikoen bidezko eguzki-sistemaren integrazioa	123
IV. Eztabaidea eta ondorioak.	141
8. Eztabaidea	143
9. Ondorioak.	163
V. Eranskinak	169
A. Konputazio zientzia.	171

B. Ekuazioen garapenak.	191
C. Implementazioak.	201
D. Zerrendak	205
Bibliografia	215

Gaien Aurkibidea (detailed)

I. Sarrera	3
1. Sarrera	5
1.1. Ikerketaren testuingurua	5
1.2. Motibazioa	6
1.3. Helburua eta esparrua	7
1.4. Ekarpenak	9
1.5. Tesiaren egitura	12
II. Oinarriak	13
2. Zenbakizko integratzaile simplektikoak	15
2.1. Sarrera	15
2.2. Zenbakizko integrazio metodoak	15
2.3. Runge-Kutta metodo simplektikoak	24
2.4. Konposizio eta splitting metodoak	33
2.5. Laburpena	40
3. Problemak	41
3.1. Sarrera	41
3.2. Pendulu bikoitza	42
3.3. N-Gorputzen problema	45
3.4. Eguzki-sistema	47
3.5. Laburpena	51
4. Koma higikorreko aritmetika	55
4.1. Sarrera	55
4.2. IEEE-754 estandarra	55
4.3. Biribiltze errorea	58
4.4. Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak	61
4.5. Laburpena	64

III. Ekarpenak.	65
5. IRK: Puntu-finkoaren iterazioa.	67
5.1. Sarrera.	67
5.2. Hairer-en implementazioa.	68
5.3. Gure implementazioa.	70
5.4. Zenbakizko esperimentuak.	81
5.5. Laburpena.	89
6. IRK: Newtonen Iterazioa.	91
6.1. Sarrera.	91
6.2. IRK-Newton estandarra.	92
6.3. IRK-Newton eraginkorra.	97
6.4. IRK-Newton estandarra (formulazio berria).	105
6.5. IRK-Newton eraginkorra (formulazio berria).	110
6.6. IRK Newtonen iterazio mistoa.	114
6.7. Zenbakizko esperimentuak.	118
6.8. Laburpena.	121
7. IRK metodo sinplektikoen bidezko eguzki-sistemaren integrazioa	123
7.1. Sarrera.	123
7.2. Sistema perturbatuetarako integrazio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta implizitu konposatua (RKIK)	124
7.3. Sistema Kepleriarren perturbaziotarako aplikazioa	128
7.4. Zenbakizko esperimentuak	129
7.5. Laburpena	137
IV. Eztabaida eta ondorioak.	141
8. Eztabaida	143
8.1. Eguzki-sistemaren integrazio luzeak	143
8.2. Eredu deskonposaketa	147
8.3. IRK implementazioaren oinarriak	151
8.4. Doitasun altuko konputazioak	155
8.5. Aldagai aldaketa	156
8.6. Paralelizazioa	157
8.7. Implementazioaren erabilgarritasuna	159
9. Ondorioak.	163

V. Eranskinak	169
A. Konputazio zientzia.	171
A.1. Sarrera.	171
A.2. Eraginkortasuna	172
A.3. Hardwarea.	175
A.4. Programazio lengoaiak (Paralelizazioa).	180
A.5. Aljebra lineal dentsorako liburutegiak.	183
A.6. Konpiladorea.	187
A.7. Laburpena.	189
B. Ekuazioen garapenak.	191
B.1. Kepler-en fluxua.	191
B.2. Koordenatu sistemak.	195
B.3. Newton eraginkorraren garapena.	199
C. Implementazioak.	201
C.1. Egitura orokorra.	201
C.2. IRK puntu-finkoa.	203
C.3. IRK Newton.	203
C.4. IRK Eguzki-sistema.	204
C.5. Konposizio-Splitting metodoak.	204
D. Zerrendak	205
Bibliografia	215

Itxaropena ez da dena ondo aterako
den konbentzimendua; nolanahi
ateratzen dela ere, egiten dugunak
zentzua duen ziurtasuna baizik.

Vaclav Havel

**I. Atala
Sarrera**

1. Kapitulua

Sarrera

1.1. Ikerketaren testuingurua

Urte luzez, zientziaren arlo ezberdinek N-gorputzeko problema ikertu dute. Astronomoek eguzki-sistemaren planeten mugimendua ulertu nahian egindako lanak edo kimikariek erreakzio kimikoekin esperimentatzeko molekulen dinamikaren azterketak aipa daitezke. Gainera, N-gorputzen problemaren azterketak garrantzi berezia izan du matematikako eremu ezberdinaren garapenean, dinamika ez-lineal eta kaos teorian esaterako.

Garai batean, N-gorputzen problemak teoria analitikoen bidez aztertzen ziren baina konputagailuen sorrerarekin, zenbakizko integrazioak tresna nagusi bilakatu ziren. Azken hamarkadetan, bai konputazio teknologien aurrerapenari esker bai algoritmo berrien sorrerari esker, zenbakizko azterketek garapen handia izan du. Zenbakizko simulazioen laguntzaz, eguzki-sistemaren dinamikaren funtsezko galdera batzuk ezagutu ditugu eta berriki, Karplus-en taldeak 2013. urteko kimika Nobel saria [92] jaso du, kimika konputazionalean egindako lanarengatik.

Guk lan honetan, N-gorputzen problema grabitazionala aztertuko dugu. Oro har eta gaia kokatzeko asmoarekin, N-gorputzen ohiko zenbakizko integrazioak hiru taldetan sailka ditzakegu:

1. Epe motzeko eta doitasun handiko integrazioak. Eguzki-sistemaren efemide zehatzak [41] edo espazioko satelite artifizialen kokapenen [13] kalkuluetarako erabili ohi dira.
2. Epe luzeko baina doitasun txikiko integrazioak. Denbora epe luzean, planeta-sistemen mugimendua ezagutzeko egindako ikerketak dira. Azterketa hauetan, helburua gorputzen mugimenduaren argazki orokorra (zehaztasun handirik gabe) ezagutzea da. Normalean, problema mota hauetan gorputzen arteko kolisioak edota kolisiotik gertuko egoerak ez dira izaten.

3. Gorputz kopurua edozein izanik, hauen arteko kolisioak gerta daitezkeen problemak. Integrazio hauetan, konplexutasun handiari aurre egin behar zaio. Gorputz kopurua miliotakoa [63] izan daiteke eta kolisiotik gertuko egoeren ondorioz, kalkuluetan egindako zenbakizko errore txikiiek soluzioan eragin handia izan dezakete.

Gure helburua, eguzki-sistemaren epe luzeko eta doitasun handiko integrazioetarako egokia izango den implementazio eraginkorra garatzea da. Aurreko hamarkadetan, eguzki-sistemaren planeten epe luzeko zenbakizko integrazioa erronka garrantzitsua izan da. Adibidez, Sussman-ek eta Wisdom-ek [108, 1993] eguzki-sistemaren 100 milioiko integrazioarekin, planeten mugimendua kaotikoa zela baiezttatu zuten. Aldi berean, paleoklimatologi-zientzialariak orain milioika urte gertatutako klima zikloak (epel, hotz eta glaziazio aroak) azaltzeko, Lurraren orbitan izandako aldaken eraginez gertatu zirela azaltzen duen teoria (Milankovitch 1941) [12] baiezttatzeko, planeten orbiten efemeride zehatzetan oinarritu dira.

Epe luzeko integrazio hauetarako zenbakizko hainbat metodo erabiltzen dira, bereziki beren izaera Hamiltondarra mantentzen duten metodoak (metodo sinplektikoak).

Konputazio-teknologiaren aurrerapenak handiak izan arren, eguzki-sistemaren simulazio hauek konputazionalki oso garestiak dira eta exekuzio denbora luzeak behar dituzte; adibidez, Laskar-ek [80, 2010] bere azken integrazioa burutzeko 18 hilabete behar izan zituen. Azken urteotako konputagailu berrien arkitekturaren bilakaerak, algoritmo azkarren diseinua aldatu du: simulazioak azkartzeko algoritmoak, paralelizazioan oinarritu behar dira. Integrazio luze hauen erronka handienetako bat, biribiltze errorearen garapena zaintza da. Biribiltze errore sistematikoaren hedapenak, errore globalean eragindako joerak ekidin behar dira [79].

1.2. Motibazioa

Integrazio metodo sinplektikoaren artean erabilienak, izaera esplizituko algoritmoak dira. Oro har problema zurruna ez bada, metodo esplizituak metodo inplizituak baino eraginkorragoak dira. Metodo inplizituetan ekuazio sistema ez-lineala askatu behar da (eragiketa garestia) eta honek, metodo esplizituekiko, CPU denboran gainkarga suposatzen du. Hala ere, ebatzi beharreko problema zurruna bada, metodo esplizituak urrats oso txikiak eman behar izaten ditu integrazio fidagarriak lortu ahal izateko. Horrek ere, integrazioa garestitzen du. Metodo inplizituetan ez da halakorik gertatzen, urrats luzeagoak eman ditzakete nahiz eta problema zurruna izan.

Azken aldian, ordea, ezbaian jarri da problemaren zurruntasunaren arabera-ko metodoen aukeraketarako joera hori. Lan honetan, zenbakizko integraziorako

Gaussen metodo implizitu simplektikoaren azterketa egingo dugu. Hainbat autorek (Hairer [54, 55] eta Sanz Serna[67]), doitasun altuko integrazioetarako metodo honen potentziala nabarmendu dute. Azken urteetan, espazioko satelite artifizialen arloan ere, Gaussen integrazio metodoarekiko interesa azaldu dute [17, 13].

Gaussen integrazio metodo implizituen abantaila nagusienetako malgutasuna da. Ekuazio implizituen ebazpenean, teknika ezberdinak konbina daitezke eta, ondorioz, integratu nahi dugun problemari egokitzen eta eraginkortasuna hobetzeko aukera asko eskaintzen dizkigu.

Simplektikoak diren metodo esplizituak oso eraginkorrik direla ezin da ukatu, baina metodo hauen erabilera ez da beti posible: sistema Hamiltondar banagarriean bakarrik erabil daitezke. Sistema Hamiltondar orokorrak edota lehen ordenako ekuazio diferentzialeko sistemak integratzeko metodo simplektikoek, implizituak izan behar dute. Bestalde, Gauss metodoak paralelizagarriak dira, hau da, s -ataletako funtzioen konputazioak paraleloan exekuta daitezke. Azkenik, ez dugu ahaztu behar ordena altuko Gauss metodoak existitzen direla eta hauek beharrrezkoak ditugula doitasun handiko integrazioetarako.

V.A. Brumberg-ek [20, 2012] lanean, eguzki-sistemaren epe luzeko simulazioak era honetan deskribatzen ditu.

Numerical integration of the equations of motion of celestial bodies over a long interval of time is also not a trivial problem. Analytical and numerical techniques of celestial mechanics have been permanently improved over the history of celestial mechanics. In its turn, it was a stimulatory for many branches of mathematics (the theory of special functions, linear algebra, differential equations, theory of approximation, etc.).

1.3. Helburua eta esparrua

Gure helburua, eguzki-sistemaren epe luzeko integraziorako Gaussen metodo implizituaren implementazio eraginkorra proposatzea edota, bide horretan aurrera-pausoak ematea da. Helburu hau lortzeko honako aspektu hauek bereziki zainduko ditugu: eguzki-sistemaren problemaren ezaugarriak, biribiltze erroreen garapena eta egungo konputagailuen gaitasunari egokitutako algoritmo azkarren dinamika.

N-gorputzeko problema gravitacionalari dagokionez, eguzki-sistemaren eredu simplea integratuko dugu. Eguzki-sistemaren gorputzak masa puntuak kontsideratuko ditugu eta gure ekuazio diferentzialek, gorputz hauen arteko erakarpen dinamika.

grabitacionalak bakarrik kontutan hartuko dituzte. Beraz, eguzki-sistemaren eredu konplexuagoetako erlatibilitatea efektua, gorputzen formaren eragina, eta beste zenbait indar ez-grabitacional ez ditugu kontutan hartu.

Zeintzuk dira eguzki-sistemaren problemaren ezaugarri bereziak? Batetik, planeten mugimendu orbitala perturbazio txikiak dituen mugimendu Kepleriarrada. Mugimendu Kepleriarrara zehazki kalkula daiteke eta eguzki-sistemaren planeten orbiten konputazioaren oinarria da. Bestetik, badugu gorputz nagusi bat (eguzkia) eta honen inguruan mugimenduan dauden planetak; bi multzotan bana ditzakegu: barne-planetak, masa txikikoak eta eguzkitik gertu daudenak eta kanpo-planetak, masa handikoak eta eguzkitik urrun daudenak. Kanpo-planeten eboluzioan, barne-planetek eragin oso txikia daukate, eragina masaren eta distanziaren alderantzikozkoen proporcionala baita. Eguzki-sistema egonkorra kontsideratzen da, hau da, hurrengo hainbat bilioi urtetan planeten arteko talkarik ez da espero gertatzea. Orbiten denbora eskalak anitzak dira; Lurraren inguruko Ilargiaren orbitaren periodoa 27.32 egunetakoak, eguzkiaren inguruko Lurraren urtebetekoa eta Neptunoren 163 urtekoa. Eguzki-sistemaren egitura aberats honi, abantaila gehien ateratzen dion planteamendua bilatuko dugu.

Konputagailuen koma-higikorreko aritmetika ondo ulertzea garrantzitsua da. Zenbaki errealen adierazpen finitura erabiltzen denez, bai zenbakiak memorian gordetzerakoan, bai hauen arteko kalkulu aritmetikoak egiterakoan, biribiltze errorea sortzen da. Integrazio luzeetan, biribiltze errorea hedatu egiten da eta une batetik aurrera, soluzioen zuzentasuna ezereztatzen da. Zentzu honetan, doitasuna hobetzeko biribiltze errorea gutxitzen duten teknika bereziak aplikatzea ezinbestekoa izaten da. Integrazio luzeetan, maiz doitasun handian lan egiteko aukera aipatzen da, baina doitasun altuko aritmetikaren (128-bit) implementazioa software bidezkoa denez, oso motela da eta ez da erabilgarria. Exekuzio denbora onargarriak lortzeko irtenbideak landu behar dira, esate baterako, doitasun ezberdinak nahasten dituzten implementazioak.

Gauss metodoen *s*-ataletako funtzioen konputazioak, paraleloan exekuta daitezke. atal askotako metodoak aplikatu nahi ditugu, era honetan paralelizazio gaitasun honek, abantaila handiagoa suposatuko baitu.

Konputazioko teknologiaren garapenean, algoritmo azkarren diseinua baldintzatzen duten bi ezaugarri azpimarratu behar dira. Batetik, egungo konputagailuak paraleloak dira eta algoritmo azkarra garatzeko, kodearen paralelizazio gaitasunari heldu behar zaio. Bestetik, konputazioaren alde garestiena, memoria eta prozesadorearen arteko datu mugimendua denez, prozesadorearen konputazio handiena komunikazio txikienarekin lortu behar da.

Sarrera honetan paralelizazioari buruzko ohar batzuk ematea komeni da. Algoritmo baten kode unitateak paraleloan exekutatzeak badu gainkarga bat eta beraz, algoritmoaren exekuzioa paralelizazioaz azkartzea lortzeko, unitate bakoitzaren tamainak esanguratsua izan behar du. Gure eguzki-sistemaren eredu simplea

da eta logikoa da pentsatzea eredu konplexuagoetan, paralelizazioak abantaila handiagoa erakutsiko duela. Bestalde, gorputzen kopurua handia den probleman, hauen arteko interakzio kopuru handia ($\mathcal{O}(N^2)$) kalkulatu behar da eta indar hauen hurbilpena modu eraginkorrean kalkulatzeko metodo ezagunak daude: *tree code*[11] eta *fast multipole method*[24] izeneko metodoak. Baino aplikatuko du gun eguzki-sistemaren eredua simplea denez, teknika hauek gure eremutik kanpo utzi ditugu.

1.4. Ekarpenak

Tesiaren lana, hiru urratsetan banatu dugu. Lehengo urratsean, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako Gauss metodoaren implementazio estandarra aztertu dugu. Implementazio berriak, biribiltze errorearen garapen optimoa izatea lehenetsi dugu eta zentzu honetan, implementazio estandarraren hobekuntzak proposatu ditugu. Azterketa honen ondorioz, Gauss metodoaren implementazioen oinarriak finkatu ditugu: IRK metodoen formulazio eta geratze irizpidea berriak.

Bigarren urratsean, Newtonen iterazioan oinarritutako Gauss metodoaren implementazioa jorratu dugu. Problema zurruna denean, puntu-finkoaren iterazioa ez da eraginkorra eta Newtonen iterazioa aplikatu behar da. Newtonen iterazioa konputazionalki garestia da eta ekuazio-sistema modu eraginkorrean askatzeko teknika berri bat garatu dugu. Era berean, Newton simplifikatuaren iterazioaren aldaera bat proposatu dugu.

Hirugarren urratsean, eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioak aztertuko ditugu. Eguzki-sistemaren problemaren integrazorako, aurreko bi implementazioen artean, puntu-finkoarena eraginkorragoa dela baiezta dugu. Hori dela-eta, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioa erabiliko dugu eta eguzki-sistemaren problemarako pentsatutako aldagai aldaketaren bidez, integracio era-ginkorra lortu dugu.

Jarraian, atal bakoitzean egindako ekarpen nagusienak laburtuko ditugu:

1. IRK puntu-finkoaren iterazioa

Gauss metodoaren puntu-finkoaren implementazioaren azterketa sakon bat egin dugu eta horretarako, Hairer-en implementazioa [55] hartu dugu gure lanaren abiapuntutzat. Implementazio hau hobetzeko aukerak ikusi ditugu eta implementazioa hobetzeko ekarpenak hauek izan dira:

(a) Metodoaren birformulazioa

Gauss metodoa aplikatzen dugunean, metodoa definitzen duten biribildutako koefiziente errealkak ($\tilde{a}_{ij}, \tilde{b}_i \in \mathbb{F}$) erabiltzen dira. Formulazio estandarra erabiliz, koefiziente hauek ez dute metodoa simplektikoa

izateko baldintza zehazki betetzen eta beraz, izaera simplektikoaren propietate onak galtzen dira. Metodoaren birformulazio baliokide bat proposatu dugu, horrela simplektikotasun baldintza zehazki betetzen duten koefizienteak modu errazean finkatu daitezke. Hori dela-eta, Gauss metodoak integral koadratikoak kontserbatuko ditu.

(b) Geratze irizpide berria

Orokorrean, Hairer-en implementazioaren puntu-finkoaren iterazioaren geratze irizpidea zuzena dela ikusi dugu baina kasu batzuetan goizagi geratzen dela baiezta dugu. Geratze irizpidea bi zentzutan garatu/zorrotzu dugu. Hairer-en implementazioan suposatzen da iterazio guztiengandik konbergentzia hobekuntza egon behar dela eta hobekuntzaren tamaina norma batean oinarritzen da. Normarekiko independentea den geratze irizpidea aplikatzea zuzenagoa da, eta horregatik, atale-tako edozein osagaiaren differentzia txikitzen den bitartean iterazioak egiten jarraitzea finkatu dugu. Bigarrenik, iterazioetan osagai guztiengandik konbergentzia hobekuntza ez du zertan beherakorra izan, eta okertzen diren tarteko iterazioak gerta daitezke. Arazo hau gainditzeko, iterazioren batean osagai guztiengandik konbergentzia handitzea gertatzen denean, seguritateko iterazio gehigarriak emango ditugu, iteraziotik irten aurretik.

(c) Atalen espresioaren aldaketa

Integrazioan batura konpentsatu estandarra aplikatzen dugunean, $\tilde{y}_n, e_n \in \mathbb{F}^d$ zenbakizko soluzioa lortzen dugu non $\tilde{y}_n + e_n \approx y(t_n)$ den. Hori dela-eta, IRK metodoaren atalak askatzeko ekuazio-sisteman,

$$Y_{n,i} = \tilde{y}_n + \left(e_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_{n,j}) \right),$$

\tilde{y}_n -ren ordez, $\tilde{y}_n + e_n$ erabiltzea proposatu dugu. Aldaketa honekin, zenbakizko soluzioaren doitasuna zerbait hobetu dela espero da.

(d) Biribiltze errorearen estimazioa

$\tilde{y}_n + e_n \approx y(t_n)$, $n = 1, 2, \dots$ zenbakizko soluzioaren biribiltze errorearen estimazioa, doitasun txikiagoko $\hat{y}_n + \hat{e}_n \approx y(t_n)$, $n = 1, 2, \dots$ bigarren zenbakizko soluzioaren estimazioa gisa kalkulatuko dugu. Erabiltzaileari zenbakizko soluzioaren estimazioa ezagutzea, exekuzio bakarrean eta *CPU* gainkarga txikiarekin, bi integrazioak sekuentzialki kalkulatzeko aukera eskainiko zaio.

2. IRK Newtonen iterazioa

(a) Ekarpen nagusia

S-ataletako IRK metodoa, Newton sinplifikatuaren iterazioaren bidez d -dimentsioko ekuazio diferentzial sistemari aplikatzeko, urrats bakoitzean $sd \times sd$ tamainako era honetako ekuazio-sistemak (iterazio batkoitzeko bat) askatu behar dira,

$$(I_d \otimes I_s - h A \otimes J) \in \mathbb{R}^{sd \times sd}.$$

Kapitulu honetan, jatorrizko sd -dimentsioko ekuazio sistema, $(s + 1)d$ dimentsioko ekuazio-sistema baliokide moduan berridatzi dugu. Ekuazio-sistema baliokidea, $d \times d$ tamainako $[s/2] + 1$ matrize errealen *LU* deskonposaketa bidez askatuko dugu. Modu honetan, konputazioa eraginkorragoa da.

(b) Newtonen iterazio mistoa

Newton sinplifikatuaren iterazioaren aldaera bat proposatu dugu. Implementazio honekin, energia errorearen eboluzioan ez da drift-arik agertzen.

3. IRK eguzki-sistema

(a) Aldagai aldaketa

Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioa erabiliko dugu eta eguzki-sistemaren ekuazio diferentzialei Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa aplikatuko diegu: era honetan, alde Kepleriarra ekuazioetatik desagerrarazten dugu. Aldagai aldaketaren bidez aplikatzen dugun integrazio metodoa, simplektikoa eta simetrikoa da: neurri batean, splitting metodoen baliokidea. Aldagai berrieko ekuazio diferenzialak, magnitude txikiko balioak hartzen dituzte eta honek, abantaila hauek ekarriko ditu: integrazioetan urrats handiagoak erabiltzeko aukera eta puntu-finkoaren iterazioek konbergentzia azkarra izatea.

(b) Doitasun nahasia

Doitasun nahasia erabiliko dugu: konputazioaren zati batzuk doitasun altuagoan kalkulatz soluzioaren doitasuna hobetzea lortuko dugu.

(c) Kepler-en fluxua

Aldagai aldaketa, Kepler-en fluxuan oinarritzen da eta beraz, Kepler-en fluxuaren implementazio eraginkorra garatu dugu. Danby [29] eta J.Wisdom-en [112] implementazioen ezaugarrietan oinarritutako garapenean, hobekuntza bat egin dugu.

1.5. Tesiaren egitura

Tesiaren lehenengo kapituluetan, zenbakizko integrazio simplektikoak eta koma higikorreko aritmetikaren oinarriak azaldu ditugu. Bigarren kapituluaren lehen zatian, *zenbakizko integratzaile simplektikoen* inguruko oinarrizko kontzeptuak azaldu ditugu. Kapitulu honen bigarren zatian, Gauss metodo estandarra deskribatu eta bere propietate nagusienak eman ditugu. Kapitulu honen azken zatian, eguzki-sistemaren integratorako metodo simplektiko eta esplizitu nagusienak laburtu ditugu. Hirugarren kapituluan, lan honetan zenbakizko esperimentuetan erabili ditugun hasierako baliodun problemen zehaztasunak eman ditugu. Laugarren kapituluan, koma-higikorreko aritmetikan murgildu gara eta biribiltze errorearen inguruko gaiak argitu nahi izan ditugu.

Tesiaren (5 – 7) kapituluetan, gure implementazio berriak garatu ditugu eta zenbakizko esperimentuen bidez hauen eraginkortasuna erakutsi dugu. Lehenik, 6. kapituluan, puntu-finkoaren iterazioaren oinarritutako Gauss metodoaren implementazioa aztertu dugu. Ondoren, 7. kapituluan, Newtonen iterazioan oinarritutako Gauss metoda jorratu dugu. 8. kapituluan, epe luzeko eguzki-sistemaren integratorako, implementazio berri bat proposatu dugu.

Tesiaren (8 – 9) kapituluetan, eztabaidea eta tesiaren ondorioak idatzi ditugu. Eztabaidaren kapituluan, ikerketaren kontzeptu nagusienak aztertu ditugu. Ondorioen kapituluan, gure helburuak zein neurritan bete ditugun eta etorkizunerako lanen laburpena egin dugu.

Tesiaren bukaerako hiru eranskinetan, lanaren informazio osagarria bildu dugu. A. eranskinean, egungo konputazio zientziaren hardware eta software kontzeptu nagusienak ezagutarazi nahi izan ditugu. B. eranskinean, tesian zehar erabilitako hainbat garapen matematikoren zehaztapenak eman ditugu. C. eranskinean, implementazioen kodeak azaldu eta erabiltzaileari erabilgarri izan dakiokeen informazioa laburtu dugu. Azkenik D. eranskinean, erabilitako notazioaren inguruko argibideak eman ditugu.

II. Atala

Oinarriak

2. Kapitulua

Zenbakizko integratzaile simplektikoak

2.1. Sarrera

Lan honen xede nagusia, N-gorputzeko sistema grabitazionalaren problemen zenbakizko integratorako algoritmoak garatzea edo daudenak hobetzea da. Era horretako problemen artean, eguzki-sistemaren epe luzeko integratorako implementazioak aztertuko ditugu [71, 20]. Gaur egun, era horretako integratorako hainbat zenbakizko metodo erabiltzen dira, bereziki bere izaera Hamiltondarra mantentzen duten metodo simplektikoak [35, 100, 37]. Metodo horien artean, gehien erabiltzen direnak izaera esplizituko algoritmoak diren arren, metodo implizituak, modu egokian implementatuz gero, hauek baino eraginkorragoak izan daitezke. Zenbakizko integratorako Gauss metodo implizituaren implementazio eraginkorra aztertuko dugu.

Atal honen lehen zatian, zenbakizko integratorio-metodoen inguruko oinarrizko definizioak eta kontzeptuak azalduko ditugu. Jarraian, sistema Hamiltondarrak zer diren eta halakoak integratzeko erabiltzen diren metodo simplektikoak azalduko ditugu. Ondoren, zenbakizko integratzaile simplektiko nagusienak aztertuko ditugu: alde batetik, Runge-Kutta metodo simplektikoak (implizituak); eta bestetik, konposizio eta splitting metodo simplektikoak (esplizituak).

2.2. Zenbakizko integratorio metodoak

Oinarrizko kontzeptuak

Ekuazio diferentzial arruntak, egoera-aldeketaak dituzten problemen azterketarako eredu matematikoak dira [53]. Zientziaren eta ingeniaritzaren arlo askotan azal-

tzen zaizkigu: planeten mugimenduen ereduetan (astronomia), erreakzio kimikoen formulazioetan, molekulen dinamiken simulazioetan, zirkuitu elektronikoen diseinuan, populazio-hazkunde eta interakzioetan (biologian), ekonomia azterketetan ...

Ekuazio diferentzial arrunta, $y(t)$ soluzio ezezagunaren eta bere $\dot{y}(t)$ deribatuaren arteko erlazioa da. t aldagaiak, maiz denbora adierazten du eta $y(t) \in \mathbb{R}^d$ soluzio bektorea da. Deribatua, modu esplizituan denboraren eta egoeraren arabera adieraz daitekeenean, era honetako ekuazioak ditugu,

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)). \quad (2.1)$$

\dot{y} notazioa erabiliko dugu dy/dt adierazteko.

Ekuazio diferentzial arruntetarako hasierako baliodun problemetan, $y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}^d$ hasierako balio bat finkatuz, eta $f(t, y)$ funtzioa, $f : \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{R}^d$, t_0 ingurunean diferentziagarria bada, orduan hasierako baliodun problemaren soluzioa existitzen da eta bakarra da [54],

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0. \quad (2.2)$$

(2.2) ekuazio-sistema bektoriala, modu eskalarrean idatziko dugu orokorrean erabiliko dugun notazioa argitzeko:

$$\begin{aligned} \dot{y}^1(t) &= f^1(t, (y^1(t), y^2(t), \dots, y^d(t))), \\ \dot{y}^2(t) &= f^2(t, (y^1(t), y^2(t), \dots, y^d(t))), \\ &\dots, \\ \dot{y}^d(t) &= f^d(t, (y^1(t), y^2(t), \dots, y^d(t))), \\ y(t_0) &= (y_0^1, y_0^2, \dots, y_0^d). \end{aligned}$$

Oso problema gutxitarako aurki daiteke ekuazio diferentzial arrunten soluzio analitikoa (funtzio ezagunen araberako soluzio zehatza) eta beraz, ia problema gehienak zenbakizko integrazio metodoen bidez ebatzen dira. Zenbakizko integracioetan, soluzioaren hurbilpena,

$$y_n \approx y(t_n), \quad t_n = t_{n-1} + h_n, \quad n = 1, 2, \dots$$

une diskretu konkretuetarako, zehaztutako tarte batean ($t_0 \leq t \leq t_f$) lortuko da. Zenbakizko soluzioa, sekuentzialki urratsez-urrats kalkulatzen da eta lortutako balio multzoak $(t_0, y_0), (t_1, y_1), \dots, (t_f, y_f)$ zenbakizko soluzioa definitzen du.

Ekuazio diferentziala beti *sistema autonomo* moduan, hau da, denborarekiko independenteki, idatz daiteke. Hori horrela izanik, notazioa simplifikatzeko era honetako hasierako baliodun problemak konsideratuko ditugu,

$$\dot{y}(t) = f(y(t)), \quad y(t_0) = y_0. \quad (2.3)$$

Definizioak

Jarraian zenbakizko integrazioen metodoen oinarrizko kontzeptuak eta notazioa finkatuko ditugu [28, 54].

1. Fluxua

Fase-espazioko edozein y_0 baliori, $y(t_0) = y_0$ hasierako balioa duen $y(t)$ soluzioa esleitzen dion funtziari fluxua deitzen zaio. Izendatzeko φ_h notazioa erabiliko dugu,

$$\varphi_h(y_0) = y(t_0 + h) \text{ baldin } y(t_0) = y_0.$$

2. Zenbakizko diskretizazioa

y_n balioa emanda, $y_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ soluzioaren hurbilpena kalkulatzeko formulari *zenbakizko fluxua* deritzogu. Honako notazioa erabiliko dugu,

$$y_{n+1} = \phi_h(y_n). \quad (2.4)$$

3. Metodoaren ordena

- (a) Errore lokala deritzo, $y(t_0) = y_0$ soluzio zehatzetik abiatuta, integracio metodoaren urrats bat eman ondoren lortutako zenbakizko soluzioak benetako soluzioarekiko duen aldeari.

$$\delta(y, h) = \varphi_h(y) - \phi_h(y).$$

- (b) Errore globala esaten zaio, zenbakizko soluzioaren t_0 hasierako unetik t_k unera hainbat urrats emanez integratu ondoren $y(t_k)$ soluzioarekiko duen aldeari,

$$E(t_k) = y_k - y(t_k).$$

- (c) Metodoaren ordena. h urrats luzera finkoko ϕ metodoa p ordenakoa dela esaten da, $E(t)$ errore globala $\mathcal{O}(h^p)$ ordenakoa bada $h \rightarrow 0$,

$$\|y_k - y(t_k)\| = \mathcal{O}(h^p), \quad h \rightarrow 0.$$

Metodoaren ordena $\mathcal{O}(h^p)$ bada, errore lokala $\mathcal{O}(h^{p+1})$ da.

4. Metodo simetrikoak

Urrats bakarreko ϕ_h metodoa simetrikoa da, honako baldintza betetzen baidu,

$$\phi_h \circ \phi_{-h} = id, \quad \text{edo} \quad \phi_h = \phi_{-h}^{-1}.$$

Euler-en metodo esplizitua

Euler-ek 1768. urtean proposatutako zenbakizko metodoa da. Hasierako balio bat emanda (t_n, y_n) eta $h_n > 0$ urrats txikirako, $t_{n+1} = t_n + h_n$ uneko hurbilpena $y_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ era honetan kalkulatuko dugu,

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n).$$

Oinarrizko metodo esplizitua da eta urratsa emateko dagoen konputazio komplexutasun bakarra f funtzioaren ebaluazio da. Lehen ordenako metodoa da,

$$\|y_n - y(t_n)\| \leq Ch, \quad C \in \mathbb{R}$$

eta beraz, doitasuna bikoizteko, lan konputazionala bikoiztu behar dugu. Ikusi-ko dugunez, ordena altuagoko metodoekin doitasun handiagoa lortuko dugu, lan konputazional gutxiagorekin.

Euler-en metodo implizitua

Euler-ek proposatutako beste metodo honek, y_{n+1} hurbilketa, implizituki definitzen den funtsezko ezaugarria du. f funtzioaren argumentua, aurreko hurbilpenaren ordez hurbilpen berria hartuz definitzen da,

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

Urratsa emateko, ekuazio-sistema ez-linealaren soluzioa askatu behar da. Horre-tarako, iterazio metodo bat aplikatu behar da.

Iterazio metodoak

Ekuazio-sistema ez-linealen soluzioa askatzeko bi iterazio metodo azalduko ditu-gu.

1. Puntu-finkoaren iterazioa

$x = f(x)$ ekuazioa, non $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eta $x^{[0]} \in \mathbb{R}^n$ soluzioaren hasierako hurbilpen bat emanda, puntu-finkoaren iterazioa era honetan definitzen da,

$$x^{[k+1]} = f(x^{[k]}) \quad k = 1, 2, \dots$$

Iterazioak x^* soluzioarengana konbergitu dezake.

Eta Euler metodo implizituaren ekuazio ez-lineala askatzeko, $y_{n+1}^{[0]}$ balioa finkatuta, puntu-finkoaren iterazioa era honetan aplikatuko dugu,

$$y_{n+1}^{[k+1]} = y_n + h_n f(t_{n+1}, y_{n+1}^{[k]}), \quad k = 1, 2, \dots$$

2. Newtonen iterazioa

Demagun $f(x) = 0$ ekuazioa askatu behar dugula, hau da, $f(x)$ -ren erro baten bila gabiltzala, non $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eta $x^{[0]} \in \mathbb{R}^n$ soluzioaren hasierako hurbilpen bat den, Newtonen iterazioa era honetan definitzen da,

$$\begin{aligned} k &= 1, 2, \dots \\ \Delta x^{[k]} J(x^{[k]}) &= -f(x^{[k]}), \\ x^{[k+1]} &= x^{[k]} + \Delta x^{[k]} \end{aligned}$$

non $J(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x)$ den.

Urratsaren konputazioaren konplexutasuna metodo esplizituan baino nabarmen handiagoa da: metodo honetan, iterazio bakoitzean Jacobiarra balioztatu, ekuazio-sistema lineala askatu eta f funtzioren ebaluazioa kalkulatu behar dira.

Iterazio metodoaren konbergentzia abiadura. $\{x^{[0]}, x^{[1]}, \dots, x^{[k]}\}$, x^* soluziorantz konbergitzen duen bektore seriea bada, errorea $e^{[n]} = x^{[*]} - x^{[n]}$, $n = 1, 2, \dots$ izendatuko dugu. Konbergentzia p ordenakoa dela esaten dugu honakoa betetzen dada,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\|e^{[n+1]}\|}{\|e^{[n]}\|^p} = C \neq 0.$$

Puntu-finkoaren iterazioak konbergentzia lineala ($p = 1$) du, Newtonen iterazioak, berriz, koadratikoa ($p = 2$). Konbergentzia koadratikoa izatea oso interesgarria da, iterazio bakoitzean soluzioaren digitu hamartar zuzenen kopurua bikoizten dugulako. Konbergentzia linealean, ordea, iterazio bakoitzean digitu hamartar kopuru finkoa hobetzen dugu.

Problema zurruna

Urrats baten konputazio-kostua handiagoa izan arren, problema batzuetan metodo implizituak esplizituak aplikatzea baino egokiago izan daiteke, eta hori erakusteko Germund Dahlquist-en (1963) adibidea azalduko dugu,

$$\dot{y} = \lambda y, \quad (2.5)$$

non λ balio absolutuan handia eta negatiboa den. Problema honen soluzio analitikoa ezaguna da, $y(t) = e^{(t-t_0)\lambda}$, eta $t \rightarrow \infty$ doanean, soluzioa zerorantz gerturatzen da. Metodo implizituaren bidezko zenbakizko soluzioa zerorantz gerturatzenten da $h > 0$ guztiarako,

$$y_n^{impl} = (1 - h\lambda)^{-n} y_0,$$

eta aldiz, metodo esplizituaren bidezkoa,

$$y_n^{expl} = (1 + h\lambda)^n y_0,$$

zerorantz gerturatuko da soilik h oso balio txikitarako, non $|1 + h\lambda| < 1$ izan behar duen. Beraz, problema honetan λ balio absolutuan handia eta negatiboa definitu dugunez (adibidez $\lambda = -10^{10}$), Euler esplizituan h urrats tamaina oso txikia erabili behar dugu.

Euler implizitua, Euler esplizitua baino eraginkorragoa den ekuazio diferentzialei, problema *zurrunak* (*stiff*) esaten zaie [54]. Problema *zurrunen* artean problema garrantzitsuak ditugu, esaterako eskala anitzeko sistemak.

Sistema-Hamiltondarak

Hamiltondar sistemak [103], ekuazio diferentzial mota garrantzitsu bat dira. $H(q, p)$ funtzioko leunari dagokion *Hamiltondar sistema* osatzen duten $2d$ ekuazio diferentzialak, era honetan definitzen dira,

$$\begin{aligned}\frac{dp^i}{dt} &= -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q^i}, \\ \frac{dq^i}{dt} &= +\frac{\partial H(q, p)}{\partial p^i}, \quad i = 1, \dots, d,\end{aligned}$$

non $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ den eta $q = [q^1, \dots, q^d]^T$, $p = [p^1, \dots, p^d]^T$ domeinuaren aldagaiak diren. Egoera aldagaien bektoreen d dimentsioari, sistemaren *askatasun maila* esaten zaio. $H(q, p)$ funtzioko *Hamiltondarra* deritzo, eta sistemaren energia adierazten du. Energia, integrazioan zehar konstante mantentzen da,

$$H(q(t), p(t)) = K, \quad K \in \mathbb{R}.$$

Beste notazio laburtu hau ere erabili ohi da,

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y),$$

non $y = (q, p)$, $\nabla H = (\partial H / \partial q^1, \dots, \partial H / \partial q^d; \partial H / \partial p^1, \dots, \partial H / \partial p^d)$ eta

$$J = \begin{pmatrix} 0_{d \times d} & I_{d \times d} \\ -I_{d \times d} & 0_{d \times d} \end{pmatrix}, \quad I_{d \times d} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Hamiltondar banagarriak. Sistema dinamikoen Hamiltondarak, maiz egitura berezia du,

$$H(q, p) = T(p) + U(q).$$

Horian artean, *bigarren ordenako* ekuazio diferentzialak aipatu behar ditugu. Hauek Hamiltondar banagarrien kasu partikular bat dira. Bere Hamiltondarra

$$H((q, p) = \frac{1}{2}p^T p + U(q),$$

da eta dagokien ekuazio diferentzialak hauek dira,

$$\dot{p} = -\frac{\partial U(q)}{\partial q}, \quad \dot{q} = p. \quad (2.6)$$

Adibidea. *Kepler problema* [54]. Planoan elkar erakartzen diren bi gorputzen mugimendua adierazten duen problema da (adibidez eguzkia eta planeta bat). Gorutz baten kokapena koordenatu sistemaren jatorria kontsideratuko dugu eta beste gorputzaren kokapenaren koordenatuak $q = (q_1, q_2)$ izendatuko ditugu. $p = (p_1, p_2)$ momentuak dira.

Funtzio Hamiltondarra hauxe da,

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

Dagozkion ekuazio diferentzialak,

$$\begin{aligned} \dot{p}_1 &= -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, & \dot{p}_2 &= -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \\ \dot{q}_i &= p_i, \quad i = 1, 2. \end{aligned}$$

Planetaren mugimendua orbita eliptiko bat da. Honako hasierako balioei dagokien soluzioa zehatza,

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

e ezentrizidadea ($0 \leq e < 1$) eta $P = 2\pi$ periodoa duen elipsea da.

Hamiltondar perturbatuak. Hamiltondar perturbatuak, honako egitura duten sistemak ditugu,

$$H = H_A + \epsilon H_B \text{ non } |H_B| \ll |H_A|.$$

Adibidea. Eguzki-sistemaren probleman [100, 111], Hamiltondarra modu honetan bana daiteke $H = H_k + H_I$, non alde nagusia H_K planeta bakoitzaren eguzkiaren inguruko mugimendu Keplerrarrari dagokion eta H_I , aldiz, planeten arteko interakzioek eragiten duten perturbazio txikiari.

Metodo simplektikoak

Hamiltondar sistemaren problemetarako Euler esplizitua eta Euler implizitua ez dira zenbakizko metodo egokiak, ez baitute Hamiltondarra mantentzen. Problema hauen propietate geometrikoak mantentzen dituzten integratzaile bereziak beharrezkoak dira [67, 104]. Integratzaile hauek, metodo simplektikoak dira eta abantaila handiena, epe luzeko integrazioetan azaltzen dute.

Metodo simplektikoen lehen aipamenak, 1950 hamarkadan kokatu behar dira eta 1980 hamarkadan, Feng Kang-ek metodo hauen azterketa sakona burutu zuen. Hastapenetako lan monografiko hau [67] eta ondorengo, azalpen ulergarriak jasotzen dituzten [54] eta [83] lanak azpimarra daitezke.

Adibidea. Metodo simplektikoen abantaila azaltzeko, penduluaren problema aukeratu dugu [50]. Penduluaren problema (masa $m = 1$, $l = 1$ luzerako makila eta $g = 1$ grabitazioa) $d = 1$ askatasuneko sistema Hamiltondarra da:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2} - \cos(q), \quad (2.7)$$

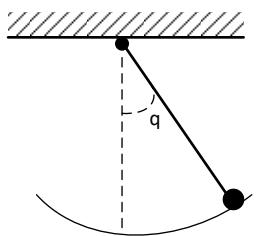
eta ekuazio diferenzialak honakoak dira,

$$\dot{p} = -\sin(q), \quad \dot{q} = p. \quad (2.8)$$

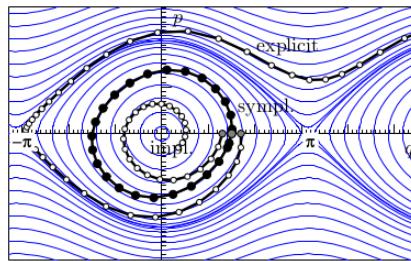
2.1. irudian ikus daitekeenez, Euler esplizitu eta implizituaren portaera kualitatiboki okerra da. Euler simplektikoak ordea, sistemaren energia kontserbatzen du, bere definizioa den [54]:

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - h \frac{\partial H}{\partial q}(p_{n+1}, q_n), \\ q_{n+1} &= q_n + h \frac{\partial H}{\partial p}(p_{n+1}, q_n). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Metodo simplektikoak bi taldetan banatuko ditugu: metodo simplektiko implizituak eta esplizituak. Lehenengo taldean, Runge-Kutta metodo implizituak (Gauss kolokazio metodoak) ditugu. Metodo hauek zenbakizko metodo estandarrak dira eta ekuazio diferenzial orokorreai aplika dakizkie. Bigarren taldean, konposizioan eta splitting-ean oinarritutako metodoak ditugu. Azken talde honetako metodoak, bakarrik Hamiltondar sistemei aplika dakizkie eta gainera, Hamiltondarrik banagarria izan behar du. Konposizio eta splitting metodoak oso eraginkorrak dira.



(a) Pendulua.



(b) Integrazioa.

2.1. Irudia: Pendulu problemaren hiru zenbakizko metodoen zenbakizko soluzioak irudikatu ditugu. Hiruretan urrats luzera berdina $h = 0.3$ baina bakoitza hasierako balio ezberdinarekin. Euler esplizitua $(p(0), q(0)) = (0, 1.7)$; Euler sinplektikoa $(p(0), q(0)) = (0, 1.5)$; Euler implizitua $(p(0), q(0)) = (0, 1.3)$

Metodo sinplektikoen propietateak

Integratzaile sinplektiko baten bidez sistema Hamiltondar baten soluzioa lortzen dugunean, ez dugu lortzen jatorrizko sistemaren soluzio zehatza, baina lortutako soluzio hori bera jatorrizko sistemaren perturbazio baten soluzio zehatza da [104]. Alegia, lortutako soluzioa beste sistema Hamiltondar baten soluzio zehatza da.

Metodo sinplektikoen propietate nagusienak azpimarratuko ditugu [54, 67].

1. Metodo sinplektikoek, energia oso ondo kontserbatzen dute.

Sistema Hamiltondarren $H(q, p)$ funtzio leunari sistemaren energia deitzen zaio. Soluzio zehatzak energia konstantea mantentzen du,

$$H(p(t), q(t)) = K, \quad K \in \mathbb{R}.$$

Zenbakizko soluzioak ordea, ez du $H(p_n, q_n)$ konstante mantentzen. Integrazio metodoa sinplektikoa bada, aritmetika zehatzarekin energia errorea bornatua mantentzen da eta drift-ik edo handitzen doan desbideratzerik gabe. Koma-higikorreko aritmetikarekin, biribiltze errorearen eraginez energia errorea denboraren erro karratuaren arabera haziko da,

$$\frac{H(p_n, q_n) - H(p_0, q_0)}{H(p_0, q_0)} = K \sqrt{t_n}.$$

non $K \in \mathbb{R}$ den.

2. Errorearen hedapen lineala.

Gehienetan, egoera aldagaien errorea $\mathcal{O}(h^p)$ da eta hazkunde lineala. Oro har, integratzailen arruntek errore hazkunde koadratikoa dute eta ondorioz, integrazio luzeetan portaera txarra azaltzen dute. Horregatik, metodo sinplektikoak egokiak dira integrazio luzetarako.

3. Metodo sinplektiko garrantzitsuenak simetrikoak dira.
4. Izaera sinplektikoa mantendu beharrik ez dagoenean erabiltzen diren metodoek, eraginkortasuna hobetzeko, urrats luzera egokitu egiten dute, baina metodo sinplektikoak urrats luzera finkoarekin erabiltzen dira [67].

2.3. Runge-Kutta metodo sinplektikoak

1988. urtean, Sanz-Serna [67] *Gauss metodoa* sinplektikoa zela ohartu zen. Runge-Kutta metodo inplizitua da eta s-atalekin lor daitekeen ordena altuena du, alegia $p = 2s$ ordenakoa da.

Runge-Kutta metodoak

Runge-Kutta metodoak [54], urrats bakarreko ekuazio diferentzial arrunten zenbakizko integrazio metodoak dira. b_i , a_{ij} eta $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$ ($1 \leq i, j \leq s$) koefiziente errealek s-ataleko Runge-Kutta metodoa definitzen dute eta *Butcher* izeneko taula moduan laburtu ohi dira,

$$\begin{array}{c|ccccc} c & A \\ \hline b^T & & & & & \end{array}, \quad \begin{array}{c|ccccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} & \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} & \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s & \end{array} \quad (2.10)$$

(2.2) hasierako baliodun problemaren $y_n \approx y(t_n)$ soluzioaren hurbilpena era honetan kalkulatzen da,

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, Y_{n,i}) , \quad (2.11)$$

non $Y_{n,i}$ atalak era honetan definitzen diren,

$$Y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, Y_{n,j}) \quad i = 1, \dots, s. \quad (2.12)$$

Runge-Kutta metodoak honako integrala hurbiltzen du:

$$y(t_0 + h) = y(t_0) + h \int_0^1 \dot{y}(t_0 + \theta h) d\theta,$$

hurrengo koadratura formularen bidez:

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_0 + c_i h, Y_i).$$

non $\dot{y}(t) = f(t, y(t))$ den, b_i pisuak eta c_i nodoak diren.

Era berean, $Y_i \approx y(t_0 + c_i h)$ atal bakoitza ere, 0 eta c_i arteko integralaren hurbilketa da. Eta hauek ere, honako koadratura formularekin hurbiltzen dira:

$$Y_{n,i} = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_0 + c_j h, Y_j).$$

Metodo esplizituak (ERK) eta implizituak (IRK)

Runge-Kutta metodoak bi talde nagusitan bereiz ditzakegu: esplizituak (*ERK*) non $\forall i \geq j, a_{ij} = 0$ eta implizituak (*IRK*) non $\exists i \geq j, a_{ij} \neq 0$.

1. *ERK* metodoaren adibidea.

$s = 4$ ataletako ERK metodo klasikoa era honetan definitzen da,

$$\begin{array}{c|ccc} & 0 & & \\ \hline & 1/2 & 1/2 & \\ & 1/2 & 0 & 1/2 \\ \hline & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 \end{array}$$

$Y_{n,i}$ atalak, esplizituki kalkula daitezke,

$$Y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(t_n + c_j h, Y_{n,j}) \quad i = 1, \dots, s.$$

2. *IRK* metodoaren adibidea.

Honakoa da, $s = 1$ ataleko *puntu-erdiko metodo implizituaren* (*Implicit Mid-point method*) definizioa,

$$\begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}$$

$Y_{n,1}$ atala implizituki definituta dago, eta honako ekuazio ez-lineala ebatzi behar da,

$$Y_{n,1} = y_n + \frac{h}{2} f(t_n + \frac{h}{2}, Y_{n,1}).$$

Lau-ataletako *ERK* metodo klasikoa, $p = 4$ ordenakoa dugu. Ordena altuko *ERK* metodoak aurkitzea konplexua da, koefizienteek bete behar dituzten ordena baldintzen kopurua esponentzialki hazten baita. Esate baterako, ordena altuko *ERK* metodo hauek aurkitu dira: $s = 11$ ataletako $p = 8$ ordenako metodoa, $s = 17$ ataletako $p = 10$ ordenako metodoa eta $s = 25$ ataletako $p = 12$ ordenako metodoa.

Ordena altuko *IRK* metodoak, *ERK* metodoak baino modu errazagoan eraiki daitezke. *Butcher-en simplifikazio baldintzen* [23] arabera definitzen dira.

Simplektikotasuna

Sanz-Sernak [67] frogatu zuen, Runge-Kutta metodoa simplektikoa izan dadin honako baldintza betetzea nahikoa dela, baina aldi berean beharrezkoa dela:

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (2.13)$$

Baldintza honen arabera, Runge-Kutta metodo esplizituak, simplektikoa ezin daitezkeela izan ondorioztatu daiteke. Bestalde, 1988. urtean, Sanz-Serna [67] ohartu zen *Gauss metodoa* simplektikoa zela.

Gauss metodoa

Gauss metodoak, bi ezaugarri nagusi dauzka: Runge-Kutta metodo simplektikoa da eta bestetik, s -atalekin eduki daitekeen ordena altuena dauka: $p = 2s$.

Kolokazio metodoak, zenbakizko integrazio metodo garrantzitsuak dira. Gauss metodoa, kolokazio metodoa da eta jarraian, ikuspegi honetatik definituko dugu.

Kolokazio metodoak

c_1, c_2, \dots, c_s ($0 \leq c_i \leq 1$) nodoetan oinarritutako kolokazio metodoak, s -mailako $u(t)$ polinomioa definitzen du. Polinomioak honakoa betetzen du,

$$\begin{aligned} u(t_0) &= y_0, \\ \dot{u}(t_0 + c_i h) &= f(t_0 + c_i h, u(t_0 + c_i h)), \quad i = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

eta soluzioa

$$y_1 = u(t_0 + h) \approx y(t_0 + h).$$

Kolokazio metodoen zenbakizko soluzioak, diskretizazio puntuetan ez ezik, interpolazio polinomio batek modu jarraian emandako soluzioa adierazten du.

Kolokazio metodoaren definizioa eta modu honetan kalkulatutako s-ataleko Runge-Kutta metodoa baliokideak dira [54],

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau, \quad b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau \quad (2.14)$$

non $l_i(\tau)$, Lagrangiar polinomioa dugun,

$$l_i(\tau) = \prod_{l \neq i} \frac{(\tau - c_l)}{(c_i - c_l)}. \quad (2.15)$$

Aukeratutako c_i ($1 \leq i \leq s$) koefizienteen arabera, kolokazio metodo ezberdinak eraikitzen dira. Koefizienteak era honetan finkatzen badira,

$$c_i = \frac{1}{2}(1 + \bar{c}_i)$$

non \bar{c}_i , s -mailako Legendre polinomioaren zeroak diren, orduan Gauss kolokazio metodoa lortzen dugu. Nodo hauetan oinarritutako Runge-Kutta metodoak, $p = 2s$ ordena du.

Gauss metodoaren koefizienteak

$s = 1$, $s = 2$ eta $s = 3$ ataletako, Gauss kolokazio metodoaren [54] Butcher koefiziente taulak [54] zehatzuko ditugu,

$$\begin{array}{c|cc} & \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \hline & 1 & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ & & \hline & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}, \quad \begin{array}{c|cc} & \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & 1 & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ & & \hline & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array},$$

$$\begin{array}{c|cc} & \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24} & \\ \hline \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} & \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} & \end{array}.$$

Gauss metodoaren propietateak

Gauss metodoen ezaugarri nagusien artean honakoak daude:

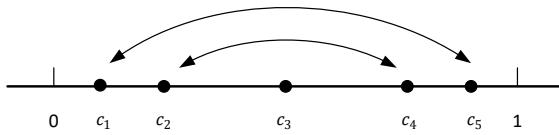
1. Metodo simplektikoa da. Beraz, (2.13) ekuazioak betetzen ditu.
2. Metodo simetrikoa da.

Runge-Kutta metodoa simetrikoa izateko baldintzak hauek dira,

$$\begin{aligned} b_i &= b_{\sigma(i)}, \quad c_{\sigma(i)} = 1 - c_i, \\ b_j &= a_{\sigma(i), \sigma(j)} + a_{i,j}, \quad i = 1, 2, \dots, \lfloor s/2 \rfloor \end{aligned}$$

non $\sigma(i) = s + 1 - i$.

Kolokazio metodo simetrikoetan, c_i balioak integrazio urratsaren erdigu-nearekiko simetrikoak dira (ikus 2.2. irudia).



2.2. Irudia: Kolokazio metodoen simetria

3. Ordena altuko metodoa. Edozein ordenako Gauss metodoa eraiki daiteke. Doitasun handiko konputazioetarako ordena altuko metodoak beharrezkoak dira: doitasun bikoitzeko aritmetikan (biribiltze unitatea $u \approx 10^{-16}$) $p \geq 8$ ordenako metodoak gomendagarriak dira eta doitasun laukoitzeko aritmetikan (biribiltze unitatea $u \approx 10^{-35}$) ordena altuagoko metodoak beharrezkoak dira.
4. Metodo orokorra da. Gauss metodoa edozein ekuazio diferentzial ebazteko erabil daiteke. Sistema Hamiltondarren kasuan, ez du zertan banagarria izan Hamiltondarra.
5. Paralelizagarria da. Ekuazio diferentzial garestiak ditugunean, s -ataletako funtzioen konputazioak ($f(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$) paraleloan kalkula daitezke.
6. Kolokazio metodoa da. Zenbakizko soluzioak diskretizazio puntuetaezik, urrats bakoitzaren integrazio tarte osoaren polinomio interpolatzaile batek modu jarraian emandako soluzioa adierazten du.

7. Birparametrizazioa. Metodo simplektiko implizituetan, birparametrizazio teknika zuzenean aplika daiteke. Eguzki-sistemaren integrazioetarako tresna baliagarria dela frogatu da [45].

IRK implementazioa

IRK algoritmoa

IRK metodoaren implementazio orokorra, 1 algoritmoan ikus daiteke. Implementazio eraginkorra egin ahal izateko, algoritmo horretako bete behar garrantzitsuenak ondo kudeatzea komeni da.

```

 $y_0 = y(t_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $k = 0;$ 
    Hasieratu  $Y_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
    while (konbergentzia lortu) do
         $k = k + 1;$ 
         $F_{n,i}^{[k]} = f(t_n + c_i h, Y_{n,i}^{[k-1]})$ ;
        Askatu ( $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} F_{n,j}^{[k]}$ );
        konbergentzia  $\leftarrow$  GeratzeErizpidea( $Y^{[k]}$ ,  $Y^{[k-1]}$ );
    end
     $\delta_n = h \sum_{i=1}^s b_i F_{n,i}$ ;
     $y_{n+1} = y_n + \delta_n$ ;
end
```

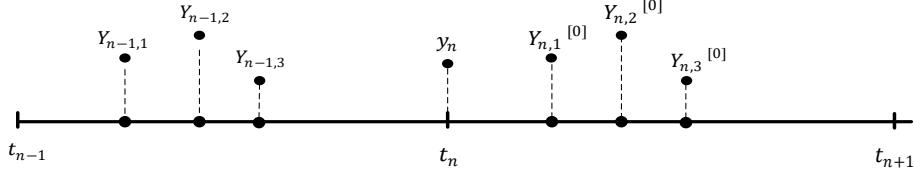
Algoritmoa 1: IRK Algoritmo orokorra

Atalen hasieraketa

Atalen hasieraketa egokia definitu behar da. Aukera simpleena $Y_{n,i}^{[0]} = y_n$ hasiera-tzea da, baina aurreko urratseko atalen informazioa erabiliz hurbilketa hobea lor daiteke [54]. Aurreko urratseko atalak interpolatzen dituen polinomioaren bidezko hasieraketa era honetan adieraz dezakegu,

$$Y_{n,i}^{[0]} = g(Y_{n-1,i}), \quad i = 1, \dots, s.$$

Aurreko urratseko $Y_{n-1,i}$ atalak eta $(t_{n-1} + h, y_n)$ zenbakizko soluzioa ezagututa, polinomio interpolatzialearen bidez, urrats berriaren atalen hasieraketa $Y_{n,i}^{[0]}$ kalkula daiteke (2.3. Irudia).



2.3. Irudia: Atalen hasieraketa: interpolazioa

1. ($n - 1$). urratsaren informazioa.

$$\begin{cases} Y_{n-1,i} = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_{n-1,j}), \\ y_n = y_{n-1} + h \sum_{j=1}^s b_j f(Y_{n-1,j}), \end{cases} \Rightarrow Y_{n-1,i} = y_n + h \sum_{j=1}^s (a_{ij} - b_j) f(Y_{n-1,j}).$$

2. Polinomio interpolatzaila.

$$P(t) = l_1(t)Y_{n-1,1} + \cdots + l_s(t)Y_{n-1,s} + l_{s+1}(t)y_n$$

non $l_i(t)$ Lagrangiar polinomioa dugun,

$$l_i(t) = \prod_{l \neq i, l=1}^{s+1} \frac{(t - (t_{n-1} + hc_l))}{(c_i - c_l)}, \quad c_{s+1} = 1.$$

3. Atalen hasieraketa.

$$Y_{n,i} \approx Y_{n,i}^{[0]} = P(t_n + hc_i) = y_n + h \sum_{j=1}^s \lambda_{ij} f(Y_{n-1,j}).$$

Modu honetan s-ataletako IRK metodo bakoitzari dagokion, λ_{ij} interpolazio-rako koefizienteak lor daitezke. Polinomio interpolatzailaren bidezko hasieraketa, emandako urratsa oso handia ez bada eta problema zurruna ez bada, ona izango da. Era berean aipatu nahi genuke, atal askotako metodoetan (adibidez $s = 16$) interpolaziozko koefizienteen kalkuluan ezabapen arazoak doitasun handian lan egitera behartzen gaituela interpolaziozko hasieraketa ona izateko.

Laburta-ren lanean [77], hasieraketa aurreratuei buruzko informazioa aurki daiteke.

Iterazio metodoa

IRK metodoen erronka handiena, ekuazio-sistema ez-linealaren zenbakizko soluzioaren implementazio eraginkorra da [54, 104]. Problema ez-zurrenetarako, atallen hasieraketa ($Y_i^{[0]}$) egoki bat duen puntu-finkoaren iterazioa erabil daiteke. Problema zurrenetarako, puntu-finkoaren iterazioan konbergentzia egon dadin, urrats tamaina txikiegia erabiltzea behartuko luke eta ondorioz, Newtonen iterazio sinplifikatua erabili ohi da.

1. Puntu-finkoaren iterazioa

```

for (k=1,2,...) do
     $F_i^{[k]} = f(t_n + c_i h, Y_i^{[k-1]});$ 
     $Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} F_j^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s;$ 
end

```

Algoritmoa 2: Puntu-finkoaren iterazioa

Konbergentzia $\|Y^k - Y\| = \mathcal{O}(h)\|Y^{k-1} - Y\|$.

2. Newtonen iterazioa

Newtonen iterazio bakoitza konputazionalki garestia da. Batetik, $\frac{\partial f}{\partial y}(t_n + c_i h, Y_i^{[k-1]})$, $i = 1, \dots, s$ Jacobiarak ebaluatu behar dira. Bestetik, s-ataletako IRK metodoa eta d-dimentsioko ekuazio diferenzialen sistema baditugu, $sd \times sd$ dimentsioko sistema lineala ebatzi behar da.

```

for (k=1,2,...) do
     $r_i^{[k]} = -Y_i^{[k-1]} + y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_i h, Y_j^{[k-1]});$ 
    Askatu  $\Delta Y_i^{[k]}$ ;
     $\Delta Y_i^{[k]} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} \frac{\partial f}{\partial y}(t_n + c_j h, Y_j^{[k-1]}) \Delta Y_j^{[k]} = r_i^{[k]};$ 
     $Y_i^{[k]} = Y_i^{[k-1]} + \Delta Y_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s;$ 
end

```

Algoritmoa 3: Newton metodoaren iterazioa

Konbergentzia $\|Y^k - Y\| = \mathcal{O}(h^2)\|Y^{k-1} - Y\|$.

Hamiltondar banagarriak (Metodo partizionatuak)

Era honetako ekuazio diferenzialak, garrantzitsuak dira,

$$\dot{p} = f(q), \quad \dot{q} = g(p).$$

Esaterako, Hamiltondar banagarriak $H(q, p) = T(p) + U(q)$ eta bigarren ordenako ekuazio diferenzialak $\ddot{q} = f(q)$ era honetako ekuazio diferenzialen kasu partikularrak dira.

Zenbakizko soluzioa $(p_{n+1}, q_{n+1}) \approx (p(t_{n+1}), q(t_{n+1}))$ era honetan kalkula daiteke [67],

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, Q_{n,i}), \\ q_{n+1} &= q_n + h \sum_{i=1}^s b_i g(t_n + c_i h, P_{n,i}), \end{aligned} \quad (2.16)$$

non $P_{n,i}, Q_{n,i}$ $i = 1, \dots, s$ atalak, honako ekuazio-sistemaren bidez definitutakoak diren,

$$\begin{aligned} P_{n,i} &= p_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j}), \\ Q_{n,i} &= q_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} g(t_n + c_j h, P_{n,j}). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Problema hauetan, funtsean puntu-finkoaren iteraziona (2 algoritmoa) aplikatzean, Hamiltondarraren egiturari esker, iterazioaren konbergentzia hobetu egiten da,

```
for ( $k=1,2,\dots$ ) do
     $P_{n,i}^{[k]} = p_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j}^{[k-1]});$ 
     $Q_{n,i}^{[k]} = q_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} g(t_n + c_j h, P_{n,j}^{[k]}), \quad i = 1, \dots, s;$ 
end
```

Algoritmoa 4: Puntu-finkoaren iteraziona (Metodo partizionatuak)

Bigarren ordenako EDA

Bigarren ordenako ekuazio diferenzialen $\ddot{q} = f(q)$ azterketa egiteko, lehen ordenako ekuazio diferenzial moduan idatziko dugu,

$$\dot{p} = f(q), \quad \dot{q} = p.$$

Zenbakizko soluzioa $(p_{n+1}, q_{n+1}) \approx (p(t_{n+1}), q(t_{n+1}))$ era honetan kalkula daiteke [67],

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, Q_{n,i}), \\ q_{n+1} &= q_n + h p_n + h^2 \sum_{i=1}^s \beta_i f(t_n + c_i h, Q_{n,i}), \end{aligned} \quad (2.18)$$

non $Q_{n,i}$, $i = 1, \dots, s$ atalak, honako ekuazio-sistemen bidez definitutakoak diren,

$$Q_{n,i} = q_n + h\gamma_i p_n + h^2 \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j}). \quad (2.19)$$

Bigarren ordenako ekuazio diferenzialen kasuan, puntu-finkoaren iterazioa modu eraginkorrean aplika daiteke,

```
for ( $k=1,2,\dots$ ) do
     $Q_{n,i}^{[k]} = q_n + h\gamma_i p_n + h^2 \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j}^{[k-1]});$ 
end
```

Algoritmoa 5: Puntu-finkoaren iterazioa (bigarren ordenako EDA)

Batura Konpensatua

Zenbakizko integrazioaren urrats bakoitzean,

$$y_{n+1} = y_n + \delta_n,$$

batura kalkulatu behar dugu. Normalean $|\delta_n| \ll |y_n|$ izango da eta integrazio luzeetan, batura honek soluzioaren doitasun galera eragingo du. Hau ekiditeko *batura konpensatua* izeneko teknika [91, 59, 54] erabili ohi da. Teknika hau 4.atalean deskribatu dugu eta zehaztapenak 11 algoritmoan eman ditugu.

2.4. Konposizio eta splitting metodoak

Konposizio eta splitting ideietan oinarrituz, aplikazio eremu ezberdinatarako hainbat integratziale simplektiko [104] garatu dira. Metodo hauek ez dira orokorrak, problema zehatzetan aplikagarriak baizik, eta metodo oso eraginkorrapak dira.

Konposizio metodoak

Konposizio metodoak, oinarrizko metodo bat edo gehiago konposatuz eraikitako zenbakizko integrazio metodoak dira [54]. Oinarrizko metodoekin segidan exekutatutako azpi-urrats kopuru batek, konposizio metodoaren integrazioaren urrats bat osatzen du. Helburua, orden baxuko metodo batetik abiatuta, ordena altuko metodoa eraikitzea da; konposizio metodoak, konposatutako oinarrizko metodoaren propietateak (simetrikoa, simplektikoa,...) jasotzen ditu.

Konposizio orokorrak

ϕ_h oinarritzko metodoa eta $\gamma_1, \dots, \gamma_s$ zenbaki errealak emanik, urrats luzera hauen $\gamma_1 h, \gamma_2 h, \dots, \gamma_s h$ konposaketari dagokion konposizio metodoa era honetan definituko dugu,

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_s h} \circ \cdots \circ \phi_{\gamma_1 h}. \quad (2.20)$$

Algoritmoa

Jarraian, s-ataletako konposizio metodoen implementazioaren algoritmo orokorra laburtu dugu.

```

for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $Y_{0,n} = y_n;$ 
    for  $i = 1, 2, \dots, s$  do
         $Y_{i,n} = \phi_{\gamma_i h}(Y_{i-1,n});$ 
    end
     $y_{n+1} = Y_{s,n};$ 
end
```

Algoritmoa 6: Konposizio metodoen implementazioa

Konposizio metodoen implementazioaren ezaugarri nagusienak hauek dira:

1. Esplizituak dira.

Konposizio metodo hauek esplizituak dira. Metodo hauetan ez da ekuazio-sistemarik askatu behar, eta beraz implementazioa simplea da.

2. Sekuentzialak dira.

Azpi-urrats bakoitzaren kalkulua modu sekuentzialean ($i = 1, \dots, s$) egin behar dugu.

3. Memoria gutxi behar dute.

Ez da tarteko baliorik eta datu-egitura berezirik memorian gorde behar.

4. Bigarren ordenako ekuazio diferentzialentzat egokiak dira.

Bigarren ordenako ekuazio diferentziala ($\ddot{q} = f(p)$), *Störmer-Verlet (Leap-frog* izenarekin ere ezaguna) metodoan oinarritutako, s-ataletako konposizio metodoarekin integratzeko, urrats bakoitzean ekuazio diferenzialaren s

balioztapen egin behar ditugu:

$$\begin{aligned} q_{n+1/2} &= q_n + \frac{h}{2} p_n, \\ p_{n+1} &= p_n + h f(q_{n+1/2}), \\ q_{n+1} &= q_{n+1/2} + \frac{h}{2} p_{n+1}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Konposizio simetrikoak

ϕ_h oinarrizko metodoa $p = 2$ ordenakoa eta simetrikoa izanik, era honetako konposizioak aurkitu dira,

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_s h} \circ \phi_{\gamma_{s-1} h} \circ \cdots \circ \phi_{\gamma_2 h} \circ \phi_{\gamma_1 h} \quad (2.22)$$

non $\gamma_s = \gamma_1, \gamma_{s-1} = \gamma_2, \dots$

CO1035: 10 ordenako konposizio metodoa

Sofroniou eta Spaletta-ren [106, 2004] $s = 35$ eta $p = 10$ ordenako metodoa, orain arteko ordena altueneko konposizio metodo eraginkorrena bezala har daiteke (2.1. taula). Konposizio metodo simetrikoa: oinarrizko metodoa simetrikoa eta $p = 2$ ordenakoa da.

2.1. Taula: 10 ordenako konposizio metodoa [54, 158.or] (CO1035)

Koefizientea	Balioa	Koefizientea	Balioa
$\gamma_1 = \gamma_{35}$	0.07879572252168641926390768	$\gamma_{10} = \gamma_{26}$	-0.39910563013603589787862981
$\gamma_2 = \gamma_{34}$	0.31309610341510852776481247	$\gamma_{11} = \gamma_{25}$	0.10308739852747107731580277
$\gamma_3 = \gamma_{33}$	0.02791838323507806610952027	$\gamma_{12} = \gamma_{24}$	0.41143087395589023782070412
$\gamma_4 = \gamma_{32}$	-0.22959284159390709415121340	$\gamma_{13} = \gamma_{23}$	-0.00486636058313526176219566
$\gamma_5 = \gamma_{31}$	0.13096206107716486317465686	$\gamma_{14} = \gamma_{22}$	-0.39203335370863990644808194
$\gamma_6 = \gamma_{30}$	-0.26973340565451071434460973	$\gamma_{15} = \gamma_{21}$	0.05194250296244964703718290
$\gamma_7 = \gamma_{29}$	0.07497334315589143566613711	$\gamma_{16} = \gamma_{20}$	0.05066509075992449633587434
$\gamma_8 = \gamma_{28}$	0.11199342399981020488957508	$\gamma_{17} = \gamma_{19}$	0.04967437063972987905456880
$\gamma_9 = \gamma_{27}$	0.36613344954622675119314812	γ_{18}	0.04931773575959453791768001

Hamiltondarra $H = H_1 + H_2$ izanik, eta Stömer-Verlet metodoan (2.21) ($\phi_h = \varphi_{h/2}^{H_1} \circ \varphi_h^{H_2} \circ \varphi_{h/2}^{H_1}$) oinarritutako konposizio metodoaren implementazioaren zehaztasunak honakoak dira.

1. Konposizio metodo orokorra.

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_s h} \circ \phi_{\gamma_{s-1} h} \circ \cdots \circ \phi_{\gamma_2 h} \circ \phi_{\gamma_1 h}$$

2. Stömer-Verlet oinarrizko metodoaren konposizio metodoa,

$$\Psi_h = (\varphi_{h\gamma_s/2}^{H_1} \circ \varphi_{h\gamma_s}^{H_2} \circ \varphi_{h\gamma_s/2}^{H_1}) \circ \cdots \circ (\varphi_{h\gamma_1/2}^{H_1} \circ \varphi_{h\gamma_1}^{H_2} \circ \varphi_{h\gamma_1/2}^{H_1}).$$

3. Jarraian dauden φ^{H_1} fluxuak era honetan elkartu daitezke,

$$\Psi_h = \varphi_{ha_{s+1}}^{H_1} \circ \varphi_{hb_s}^{H_2} \circ \varphi_{ha_s}^{H_1} \circ \cdots \circ \varphi_{hb_2}^{H_2} \circ \varphi_{ha_2}^{H_1} \circ \varphi_{hb_1}^{H_2} \circ \varphi_{ha_1}^{H_1}$$

non $a_1 = a_{s+1} = \gamma_1/2$, $b_i = \gamma_i$, $a_k = (\gamma_k + \gamma_{k-1})/2$, $i = 1, \dots, s$ eta $k = 2, \dots, s$.

4. Azkenik, integrazioaren tarteko urratsetan, lehen atala $\varphi_{ha_{s+1}}^{H_1}$ eta azkena $\varphi_{ha_1}^{H_1}$ bakar batean elkartu daitezke,

$$\Psi_h = \varphi_{h2a_{s+1}}^{H_1} \circ \varphi_{hb_s}^{H_2} \circ \varphi_{ha_s}^{H_1} \circ \cdots \circ \varphi_{hb_2}^{H_2} \circ \varphi_{ha_2}^{H_1} \circ \varphi_{hb_1}^{H_2}.$$

Splitting metodoak

Splitting metodoak, $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ sistema osoa integratzeko, $f^{[i]}$ ($f = \sum_{i=1}^m f^{[i]}$) azpiproblemetan deskonposatu daitezkeen ekuazio diferentzialetarako zenbakizko integrazio metodoak dira [104, 54].

Splitting metodoa modu errazean aplika daiteke, H Hamiltondarra, $H = H_1 + H_2$ eran bana daitekeenean eta Hamiltondar bakoitzari dagokion sistema modu esplizituan integratu daitekeenean.

Splitting arruntak

H_1 eta H_2 sistemaren fluxu zehatzak $\varphi_t^{[H_2]}$ eta $\varphi_t^{[H_1]}$ izendatzen baditugu, honako splitting metodoak definituko ditugu:

1. Lie-Trotter splitting 1 ordenako metodoak,

$$\phi_h = \varphi_h^{[H_2]} \circ \varphi_h^{[H_1]} \quad \text{edo} \quad \phi_h^* = \varphi_h^{[H_1]} \circ \varphi_h^{[H_2]}. \quad (2.23)$$

Adibidea. Era honetako Hamiltondar banagarrieta $H(q, p) = T(p) + V(q)$, $H_1 = T$ eta $H_2 = V$ izanik, zati bakoitzari dagokion fluxua era honetan definitzen da,

$$\varphi_t^{[H_1]} = (p, q + t\nabla T(p)), \quad \varphi_t^{[H_2]} = (p - t\nabla V(q), q).$$

Adibide honen splitting metodo partikularra, *Euler metodo simplektiko* izenarekin ezaguna da,

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - h\nabla V(q_{n+1}), \\ q_{n+1} &= q_n + h\nabla T(p_n). \end{aligned}$$

2. Strang-Marchuk splitting 2 ordenako metodo simetrikoa,

$$\phi_h = \varphi_{h/2}^{[H_1]} \circ \varphi_h^{[H_2]} \circ \varphi_{h/2}^{[H_1]}. \quad (2.24)$$

Adibidea. Hamiltondar banagarrieta rako $H(q, p) = T(p) + V(q)$, Störmer-Verlet metodo ezaguna lortzen da,

$$\begin{aligned} q_{n+1/2} &= q_n + \frac{h}{2} \nabla T(p_n), \\ p_{n+1} &= p_n - h \nabla V(q_{n+1/2}), \\ q_{n+1} &= q_{n+1/2} + \frac{h}{2} \nabla T(p_{n+1}). \end{aligned}$$

Fluxu zehatza eta zenbakizko fluxua konbinatuz

Demagun, sistemaren bi fluxu zehatzetariko bat $\varphi_t^{[H_1]}$ edo $\varphi_t^{[H_2]}$ ezin daitekeela kalkulatu. Kasu honetan ere splitting teknika aplika daiteke metodo simplektikoak eraikitzeko. Adibidez, $\varphi_t^{[H_2]}$ ezezaguna bada eta Lie-Trotter teknika aplikatuz,

$$\phi_h = \varphi_h^{[H_1]} \circ \varphi_h^{[H_2]}, \quad \phi_h^* = \varphi_h^{[H_2]} \circ \varphi_h^{[H_1]},$$

eta lortzen den zenbakizko metodoak, $\phi_t^{[H_2]}$ zenbakizko metodoaren propietateak mantentzen ditu.

Splitting orokorrak

Aurreko splitting metodoen (2.23) orokorpena modu honetan zehaztuko dugu,

$$\phi_h = \varphi_{\beta_s h}^{[H_2]} \circ \varphi_{\alpha_s h}^{[H_1]} \circ \varphi_{\beta_{s-1} h}^{[H_2]} \circ \cdots \circ \varphi_{\beta_1 h}^{[H_2]} \circ \varphi_{\alpha_1 h}^{[H_1]}. \quad (2.25)$$

non β_i , α_i koefizienteak ($\sum \beta_i = 1$, $\sum \alpha_i = 1$) metodoaren ordena definitzen duten.

Algoritmoa

Splitting metodoen implementazio orokorra [7](#) algoritmoan ikus daiteke:

```

for  $n \leftarrow 0$  to (endstep-1) do
     $Y_{0,n} = y_{n-1};$ 
    for  $i=1,2,\dots,s$  do
         $| Y_{i,n} = (\varphi_{\beta_i h}^{[H_2]} \circ \varphi_{\alpha_i h}^{[H_1]})(Y_{i-1,n});$ 
    end
     $y_{n+1} = Y_{s,n};$ 
end

```

Algoritmoa 7: Splitting metodoak

Splitting metodoen implementazioarentzat, konposizio metodoen algoritmoei buruz aipatutako ezaugarri berdinak errepikatu beharko genitzke (esplizituak dira, sekuentzialki exekutatzen dira, memoria gutxi, ...).

Eguzki-sistemari egokitutako splitting metodoak

Har dezagun, N-gorputzeko problema grabitazionalaren Hamiltondarra,

$$H(q, p) = T(p) + U(q).$$

Eguzki-sistemaren integratzaileko erabiltzen diren koordenatu sistema nagusiak, *Jacobi* eta koordenatu heliozentrikoak dira [[111](#), [37](#)]. Bi koordenatu sistema hauekin, Hamiltondarra beste modu honetan berridatz daiteke,

$$H = H_A + \epsilon H_B, \quad |H_B| \ll |H_A|,$$

non alde nagusia H_A planeta bakoitzaren eguzkiaren inguruko mugimendu Kepleriarraren eta H_B aldiz, planeten arteko interakzioek eragiten duten perturbazio txikia. Jacobi koordenatuetaan H_B -k ez dauka p -ren menpekotasunik, heliozentrikoetan, ordea, bi aldagaien menpekotasuna dauka (ikus [B.2.](#) eranskinean):

$$\begin{aligned} H_{Jab} &= H_A(p, q) + H_B(q), \\ H_{Hel} &= H_A(p, q) + H_B(p, q), \end{aligned}$$

$H_A(p, q)$ (mugimendu Kepleriarrari dagokion zatia), Kepler-en fluxua kalkulatzen duen implementazio bat aplikatuz ([3.4.](#) atala) zehazki kalkulatuko da.

Eguzki-sistemaren problema grabitazionalari egokitutako zenbakizko bi integratzaile simplektiko azalduko ditugu. Lehena, Laskar-ek eta Robutel-ek [[82](#)] definitutako *SABAC*₄ integratzailea eta bigarrena, Blanes et al. [[16](#), [37](#)] definitutako *ABAH1064* integratzailea.

SABAC₄ integratzailea

Laskarrek [82, 2001], $CSABA_n$ eta $CSBAB_n$ integratzaile simplektikoak proposatu zituen. Metodo hauek koefiziente positiboekin eraikitako metodo simplektikoak dira eta $\mathcal{O}(h^k\epsilon + h^4\epsilon^2)$ ordenakoak dira, n bikoitia denean $k = n + 2$ izanik eta n bakoitia denean $k = n + 3$ izanik.

Eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioan [80] erabilitako $CSABA_4$ integratzailea deskribatuko dugu. Hamiltondarra $H = H_A + \epsilon H_B$ bada, era honetan definituko dugu metodoa,

$$\begin{aligned} SABA_4 &= \varphi_{c_1h}^{[A]} \circ \varphi_{d_1h}^{[B]} \circ \varphi_{c_2h}^{[A]} \circ \varphi_{d_2h}^{[B]} \circ \varphi_{c_3h}^{[A]} \circ \varphi_{d_2h}^{[B]} \circ \varphi_{c_2h}^{[A]} \circ \varphi_{d_1h}^{[B]} \circ \varphi_{c_1h}^{[A]}, \\ CSABA_4 &= \varphi_{-c/2}^{[B]} \circ SABA_4 \circ \varphi_{-c/2}^{[B]}, \end{aligned}$$

eta koefizienteak 2.2. taulan zehaztu ditugu.

2.2. Taula: $CSABA_4$ splitting metodoa [82]

Koefiziente	Balioa	Koefiziente	Balioa
c_1	$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{70}$	d_1	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{30}}{72}$
c_2	$\frac{(\sqrt{525+70\sqrt{30}} - \sqrt{525-70\sqrt{30}})}{70}$	d_2	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{30}}{72}$
c_3	$\frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}$		
c	0.00339677504820860133153215778349		

ABAH1064 integratzailea

Blanes-ek (2013), ABA eta $ABAH$ metodo simplektikoak proposatu zituen [16, 37]. ABA metodoak, Jacobi koordenatuetara egokitutako integratzaileak eta $ABAH$ integratzaileak, koordenatu heliozentrikoetara egokitutako integratzaileak.

Atal honetan, koordenatu heliozentrikoei egokitutako $ABAH1064$, $p = 10$ ordenako metodoa deskribatuko dugu. Eguzki-sistemaren integraziorako koordenatu heliozentrikoei dagokion Hamiltondarra era honetakoa dugu,

$$H_{Hel}(p, q) = H_K(p, q) + H_I(p, q), \quad H_I(p, q) = T_1(p) + U_1(q).$$

$H_I(p, q)$ fluxua zehazki kalkulatu beharrean honen hurbilpen bat erabiliko dugu,

$$\varphi_t^I \approx \tilde{\varphi}_t^I = \varphi_{tb_i/2}^{[U_1]} \circ \varphi_{tb_i}^{[T_1]} \circ \varphi_{tb_i/2}^{[U_1]}.$$

2.3. Taula: ABAH1064 splitting metodoa [16]

Koeficiente	Balioa	Koeficiente	Balioa
$a_1 = a_9$	0.04731908697653382270404371796320	$b_1 = b_9$	0.11968846245853220353128642974898
$a_2 = a_8$	0.26511052357487851595394800361856	$b_2 = b_8$	0.37529558553793742504201285376875
$a_3 = a_7$	-0.0099765228838112408432674681648	$b_3 = b_7$	-0.4684593418325993783650820409805
$a_4 = a_6$	-0.0599291997349415512639524798772	$b_4 = b_6$	0.33513973427558970103930989429495
a_5	0.25747611206734045344922822646033	b_5	0.27667111912108009750494572633568

ABAH1064, $p = 10$ eta $s = 9$ splitting metodoa definituko dugu,

$$ABAH1064 = \prod_{i=1}^s \varphi_{a_i h}^K \circ (\varphi_{hb_i/2}^{[U_1]} \circ \varphi_{hb_i}^{[T_1]} \circ \varphi_{hb_i/2}^{[U_1]})$$

non a_i, b_i koefizienteak 2.3. taulan definitzen diren.

2.5. Laburpena

Atal honetan, metodo simplektikoen ikuspegia orokorra eman dugu. Hurrengo 2.4. taulan, ordena altuko lau integratzaile simplektikoen ezaugarriak laburtu ditugu. Izaera implizituen implementazioen (1 algoritmoa) eta izaera esplizituen (6, 7 algoritmoak) implementazioen konplexutasuna erakutsi dugu.

2.4. Taula: Integrazio metodo simplektikoen laburpena

	<i>C1035</i>	<i>CSABA</i> ₄	<i>ABAH1064</i>	<i>GAUSS</i> – 12
Hamiltondarra	Banagarria	Banagarria	Perturbatua	Orokorra
Mota	Esplizitua	Esplizitua	Esplizitua	Implizitua
Koordenatuak	Orokorra	Helio/Jacobi	Heliozentrikoa	Orokorra
Ordena	10		10	12
Atalak	35	9	9	6
Paralelizagarri	Ez	Ez	Ez	Bai

Metodo simplektikoei buruzko liburu monografiko hauek gomendatuko ditugu: [67, 54, 83, 38]. Eguzki-sistemaren epe luzeko simulazioei buruzko lan hauek ere azpimarratuko ditugu: [20, 71, 90, 64, 70].

3. Kapitulua

Problemak

3.1. Sarrera

Gure helburua eguzki-sistemaren simulaziorako zenbakizko integratziaileak hobetzea eta hobekuntza horiek barneratzen dituen implementazioa eskaintza da. Eguzki-sistematuz nahi bezain komplexua den sistema har daiteke: planeta guztiek, planeta nanoak, planeten ilargiak, kometak, erlatibitate efektua eta abar har daitezke kontutan. Baino sistema sinplifikatuan hobekuntzak egiten badira, sistema konplexuak ere hobeto integratzeko bidea irekiko da. Hori dela-eta, guk eredu simpleekin jardun dugu, eta zenbakizko esperimentuetan, eguzki-sistemaren bi eredu erabili ditugu, bata oso simplea eta bestea osatuagoa: alde batetik kanpo-planeten problema (eguzkia, kanpo-planetak eta Plutonek osatutakoa), eta bestetik, *9-planeten problema* (eguzkia, 8 planetak eta Plutonek osatutakoa). Bi eredu hauetan, gorputzak masa puntuak dira eta gorputz hauen arteko erakarpen gravitacionalak bakarrik hartu ditugu kontutan.

Aipatu beharra dago, zenbakizko metodo simplektiko nagusienak esplizituak direla eta metodo horiek, Hamiltondar banagarria duten problemetan bakarrik erabil daitezkeela. Gainera, problema zurruna bada metodo esplizituak ez dira eraginkorrik eta metodo implizituek abantaila azaltzen dute. Gauss metoda, orokorra eta implizitua izanik, problema zurrutarako eta Hamiltondar banagarria ez den problemetarako aplikagarria dela ere kontuan hartu behar da.

Hori dela-eta, problema osagarri gisa aukeratu dugu pendulu bikoitzaren problema, zenbakizko esperimentuak modu aberatsago eta zabalago batean egiteko. Pendulu bikoitzaren bi bertsio konsideratu ditugu: pendulu bikoitz arrunta eta pendulu bikoitz zurruna.

N-gorputzeko problema gravitacionalaren Hamiltondarra banagarria da baina pendulu bikoitzarena aldiz, ez da banagarria. Bestalde, pendulu bikoitzari malguki bat gehituz problema zurruna bilakatuko dugu, problema hauen zaitasunei nola

aurre egin erakusteko. Gainera, eguzki-sistema kaotiko [78] kontsideratzen dela jakinik, pendulu bikoitz arruntak izaera kaotikoa azaltzen duen hasierako balio zehatzak aukeratu ditugu. Problema kaotikoak, hasierako balio edo parametroen perturbazioekiko, trunkatze edo birbitze erroreakiko esponentzialki sentikorrik dira.

Atal honetan, tesiaren zenbakizko esperimentuetan erabili ditugun problemak deskribatu ditugu, problema bakoitzari dagokion Hamiltondarra eta hasierako balioak zehaztuz. Lehenik, pendulu bikoitzaren problema eta N-gorputzen problema orokorra azaldu ditugu. Bigarrenik, eguzki-sistemaren problema gravitacionalean murgildu gara eta eredu ezberdinen zehaztapenak eman ditugu: Kepler problema, kanpo-planeten problema eta 9-planeten problema.

3.2. Pendulu bikoitzza

Pendulu bikoitzaren bi bertsio deskribatuko ditugu: lehena, pendulu bikoitz arrunta eta bigarren problema konplexuagoa, pendulu bikoitz zurruna.

Pendulu bikoitz arrunta

Pendulu bikoitzaren problema (ikus 3.1. irudia), planoan mugitzen diren eta elkarri lotuta dauden bi penduluk osatzen dute: penduluen masak m_1 eta m_2 dira, penduluetako bat puntu finko batetik zintzilik dago l_1 luzera duen eta okertzen ez den masarik gabeko lotura baten bidez. Beste pendulua, m_1 masa duen penduluan pisuari lotuta dago, lotura honen luzera l_2 da eta hau ere, masarik gabekoa eta okertzen ez dena da.

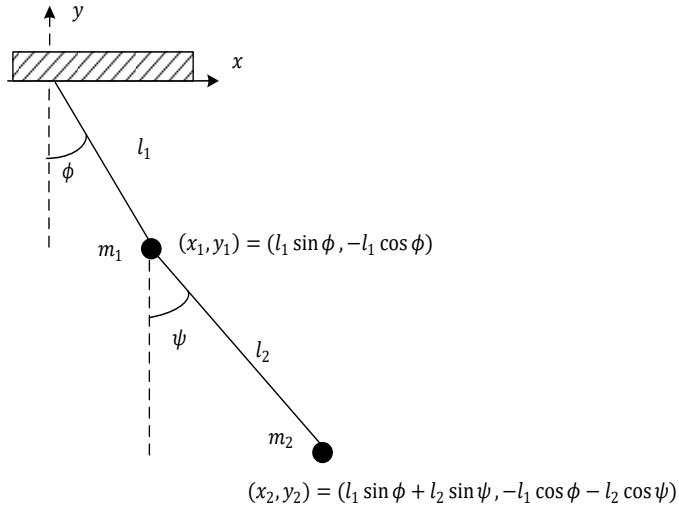
Sistemaren egoera aldagaiak, bi angelu $q = (\phi, \theta)$ eta dagozkion momentuak $p = (p_\phi, p_\theta)$ dira. ϕ lehen penduluaren ardatz bertikalarekiko angelua da eta bigarren penduluaren angelua, era honetan definituko dugu $\psi = \phi + \theta$.

Hamiltondar funtzioa $H(q, p)$ honakoa da,

$$\begin{aligned} & - \frac{l_1^2 (m_1 + m_2) p_\theta^2 + l_2^2 m_2 (p_\theta - p_\phi)^2 + 2 l_1 l_2 m_2 p_\theta (p_\theta - p_\phi) \cos(\theta)}{l_1^2 l_2^2 m_2 (-2 m_1 - m_2 + m_2 \cos(2\theta))} \\ & - g \cos(\phi) (l_1 (m_1 + m_2) + l_2 m_2 \cos(\theta)) + g l_2 m_2 \sin(\theta) \sin(\phi), \quad (3.1) \end{aligned}$$

Sistemaren parametroak. Gure esperimentuetarako honako parametroak kontsideratuko ditugu,

$$g = 9.8 \text{ m/s}^2, \quad l_1 = 1.0 \text{ m}, \quad l_2 = 1.0 \text{ m}, \quad m_1 = 1.0 \text{ kg}, \quad m_2 = 1.0 \text{ kg}.$$



3.1. Irudia: Pendulu bikoitz arrunta

Hasierako balioak. Bi hasierako balio ezberdin konsideratu ditugu [31]: lehenak, izaera ez-kaotikoa du eta bigarrenak, izaera kaotikoa duen mugimendua agertzen du.

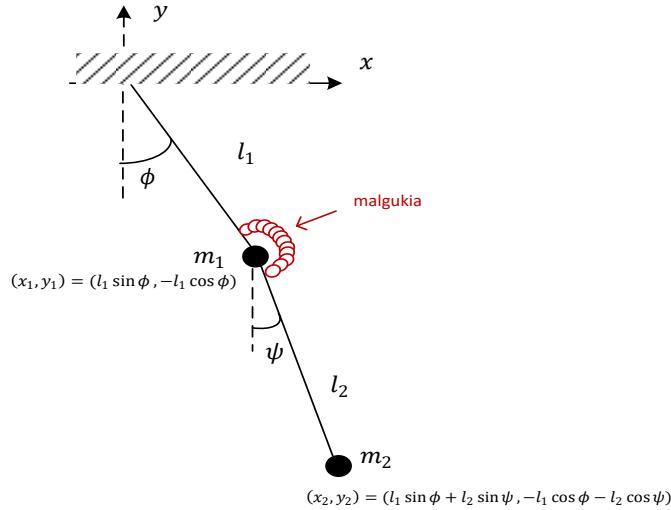
1. Hasierako balio ez-kaotikoak (NCDP): $q(0) = (1.1, -1.1)$ eta $p(0) = (2.7746, 2.7746)$. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioa egin dugu.
2. Hasierako balio kaotikoak (CDP): $q(0) = (0, 0)$ eta $p(0) = (3.873, 3.873)$. $T_{end} = 2^8$ segundoko integrazioa egin dugu.

Urrats luzera, $h = 2^{-7}$ aukeratu dugu, trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiagoa izan dadin.

Pendulu bikoitz zurruna

Pendulu bikoitz arruntari, malguki bat gehitutako sistema da (ikus 3.2. irudia): m_1 eta m_2 masadun bi penduluk eta hauen artean k parametroaren araberako malgutasuna duen malgukiak osatzen duten sistema mekanikoa. $k = 0$ balioarentzat, problema ez da zurruna (hau da, pendulu bikoitz arrunta) eta problemaren zurruntasuna, k balioarekin batera handitzen da.

Sistemaren egoera aldagaiak, bi angelu $q = (\phi, \theta)$ eta dagozkion momentuak $p = (p_\phi, p_\theta)$ dira. ϕ lehen penduluak ardatz bertikalarekiko duen angelua da eta bigarren penduluaren angelua, era honetan definituko dugu $\psi = \phi + \theta$.



3.2. Irudia: Pendulu bikoitza (zurruna)

Hamiltondar funtzioa. Formulazio Lagrangiarrean ($L = T - V$), energia potentzialari $1/2 k \theta^2$ gaia gehituz, dagokion $H(q, p)$ funtzioko Hamiltondarra lortuko dugu,

$$\begin{aligned}
 & - \frac{l_1^2 (m_1 + m_2) p_\theta^2 + l_2^2 m_2 (p_\theta - p_\phi)^2 + 2 l_1 l_2 m_2 p_\theta (p_\theta - p_\phi) \cos(\theta)}{l_1^2 l_2^2 m_2 (-2 m_1 - m_2 + m_2 \cos(2\theta))} \\
 & - g \cos(\phi) (l_1 (m_1 + m_2) + l_2 m_2 \cos(\theta)) + g l_2 m_2 \sin(\theta) \sin(\phi) + \frac{k}{2} \theta^2.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Sistemaren parametroak. Honako parametroak konsideratu ditugu,

$$g = 9.8 \text{ m/s}^2, \quad l_1 = 1.0 \text{ m}, \quad l_2 = 1.0 \text{ m}, \quad m_1 = 1.0 \text{ kg}, \quad m_2 = 1.0 \text{ kg},$$

eta k malgutasun parametroaren balio batzuk finkatu ditugu, zurruntasun maila ezberdineko pendulu bikoitzaren dinamikak aztertzeko

$$k = 2^{2i}, \quad i = 0, \dots, 11.$$

Hasierako balioak. Hasierako balioak, era honetan aukeratu ditugu:

1. $k = 0$ problemarako, [31] artikulutik izaera ez-kaotikoa duen hasierako balioak hartu ditugu: $q(0) = (1.1, -1.1)$ and $p(0) = (2.7746, 2.7746)$.

2. $k \neq 0$ problemetarako hasierako balioak,

$$q(0) = \left(1.1, \frac{-1.1}{\sqrt{1+100k}} \right), \quad p(0) = (2.7746, 2.7746),$$

aukeratu ditugu, non sistemaren energia $k \rightarrow \infty$ doanean bornatua dagoen.

$k = 0$ problema ez-zurrunerako, $h = 2^{-7}$ urrats luzera finkatu dugu trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiagoa izan dadin eta gainontzeko integrazio guztietarako urrats luzera berdina erabili dugu. $k > 0$ zurruntasun balio batetik aurrera, trunkatze errorea birbiltze errorea baino garrantzitsuago da. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioa egin dugu.

3.3. N-Gorputzen problema

Problemaren formulazioa eman aurretik, K.Tanikawa-k eta T.Ito-k [64] 3-gorputzen problemari buruzko deskribapena aipatuko nahi genuke,

Never be attracted to the three-body problem. It is too dangerous.
The three-body problem has long been an attractive but dangerous subject for students. This is because it has quite a simple setting and it appears relatively easy. However, it has been investigated for so many years that it is very difficult to obtain anything new.

Newtonen lege grabitazionalen araberako N-gorputzen problemaren ekuazio diferentzialak era honetan definitzen dira,

$$m_i \ddot{q}_i = G \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{m_i m_j}{\|q_j - q_i\|^3} (q_j - q_i), \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad (3.3)$$

non $(N + 1)$ gorputz kopurua den, eta $q_i \in \mathbb{R}^3$, $m_i \in \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, N$ gorputz bakoitzaren kokapena eta masa den.

Hamiltondar sistema. Momentuen definizio hau ordezkatz $p_i = m_i * \dot{q}_i$, N-gorputzeko problemaren formulazio Hamiltonarra lortzen da,

$$H(q, p) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \frac{\|p_i\|^2}{m_i} - G \sum_{0 \leq i < j \leq N} \frac{m_i m_j}{\|q_i - q_j\|}. \quad (3.4)$$

Ekuazio differentzialak. Abiaduraren eta kokapenaren araberako ekuazioak hauek dira,

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= v_i, \quad i = 0, 1, \dots, N, \\ \dot{v}_i &= \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{Gm_j}{\|q_j - q_i\|^3} (q_j - q_i), \quad i = 0, 1, \dots, N\end{aligned}\tag{3.5}$$

Problemaren integralak. Integrazioan zehar konstante mantentzen diren kantitateei problemaren integralak edo inbarianteak deitzen zaie. N-gorputzen problemak 10 integral ditu [72]:

1. Masa zentroaren sei integralak.

Era horretan definitzen dugun P balio konstantea dela modu errazean frogatzen daiteke,

$$P = \sum_{i=0}^N m_i \dot{q}_i = \sum_{i=0}^N p_i.$$

Eta ondorioz,

$$O = \sum_{i=0}^N m_i q_i = Pt + B.$$

$P, B \in \mathbb{R}^3$ bektoreen osagaiei, masa zentroaren sei integralak esaten zaie. Masa zentroaren kokapena (Q) eta abiadura (V) era horretan definitzen dira,

$$Q = \frac{\left(\sum_{i=0}^N m_i q_i \right)}{M}, \quad V = \frac{\left(\sum_{i=0}^N m_i \dot{q}_i \right)}{M}$$

non $M = \sum_{i=0}^N Gm_i$ den.

2. Momentu angeluarra.

Momentu angeluarra $L \in \mathbb{R}^3$, problemaren beste hiru integral dira,

$$L = \sum_{i=0}^N p_i \times q_i = \sum_{i=0}^N q_i \times m_i \dot{q}_i.$$

3. Energia.

Hamitoniar sistema osoaren energia da eta problemaren beste integrala da,

$$E = H(q, p).$$

Problemaren 10 integral hauek, zenbakizko integrazioaren doitasuna neurtze-ko erabil daitezke. Guk koordenatu barizentrikoak (koordenatu sistemaren jatorria masa zentroaren kokapena) erabiliko ditugu eta koordenatu hauetan, $P = 0$ eta $B = 0$ dira. Beraz, integratzeko erabiliko ditugun hasierako (\hat{q}_i, \hat{v}_i) balioak modu honetan finkatuko ditugu,

$$\begin{aligned}\hat{q}_i &= q_i - Q, \\ \hat{v}_i &= v_i - V, \quad i = 0, \dots, N,\end{aligned}$$

eta era honetan, masa zentroaren kokapen eta abiadurak zero egiten dira:

$$\hat{Q} = \frac{\left(\sum_{i=0}^N m_i \hat{q}_i \right)}{M} = 0, \quad \hat{V} = \frac{\left(\sum_{i=0}^N m_i \hat{v}_i \right)}{M} = 0.$$

Momentu angeluarra eta energia, zenbakizko integrazioaren doitasuna neur-tzeko erabili ohi dira. Energia zenbakizko integracioen biribiltze errorea neurtze-ko integral egokiena da.

3.4. Eguzki-sistema

Sarrera

Eguzki-sistemaren planeten orbiten mugimenduaren eredu matematikoa, sistema Hamiltondar bati dagokion ekuazio diferentzial arrunten bidez formulatzen da. N planeta badaude, $6N$ ekuazio diferenzialeko sistema izango da.

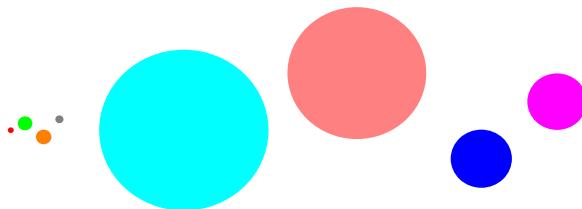
Eguzki sistemaren eredu simplea integratuko dugu. Eguzki-sistemaren gorputzak masa puntualak konsideratuko ditugu eta gure ekuazio diferenzialak defini-tzeko, soilik gorputz hauen arteko erakarpen grabitazionalak hartu ditugu kontu-tan.

Eguzki-sistemaren gorputz nagusien (eguzkia eta planetak) integrazioetara mu-gatuko gara. Ereduen gorputz kopurua txikia izango da, kanpo-planeten proble-man $N = 6$ eta 9-planeten probleman $N = 10$ izango da.

Eguzkiak, planetak baino 1.000 aldiz masa handiago du eta hauxe da, eguzki-sistemaren ezaugarri garrantzitsuenetakoak: eguzkiaren grabitazio indar nagusiak eta planeten arteko perturbazio txikiak sortzen duten sistema dinamikoa da. Pla-nenetan eta beren sateliteen mugimenduan kolisiotik gertuko egoerarik edo eszentri-kotasun handiko orbitalik ez dago. Beraz, ikuspuntu honetatik sistema dinamiko simplea dela, esan daiteke. Eguzki-sistema egonkorra konsideratzen da, hau da, epe luze batean planeten arteko talkarik edo planeten kanporatzerik gertatzea, ez da espero [78, 56].

Eguzki-sistemaren jatorria, orain 5×10^9 urtetan finkatzen da eta beraz, eguzki-sistemaren eboluzioa integratzeko, urrats kopuru oso handia beharrezkoa da. Eguzki-sistemaren eredu osoaren (9-planeten problema) integrazioetako ohiko urratsa $h = 0.0025$ urtekoa bada (orbita txikierekiko periodoaren %1), eman beharreko urrats kopurua 2×10^{12} izango da. Era berean, eguzki-sistemaren eredu simpleagoaren (kanpo-planeten problema) integrazioetako urrats tamaina handiagoa bada ere, urrats kopurua 5×10^{10} ingurukoa da.

Eguzki-sistemaren problemaren eskalak, anitzak dira. [3.3.](#) irudian, planeta nagusien tamainak irudikatu ditugu eta [3.1.](#) taulan, eguzki-sistemaren planeten ezaugarri nagusienak eman ditugu. Aniztasunaren adierazgarri, Ilargiaren, Lurra-ren eta Neptunoren orbitak konpara ditzakegu: Ilargiak 27.32 eguneko periodoa duen orbita dauka, Lurrak urtebetekoa eta Neptunok 163 urtekoa.



3.3. Irudia: Irudian, planeten arteko tamainen proportzioak irudikatu ditugu. Ezkerretik eskuinera: Merkurio, Artizarra, Lurra, Marte, Jupiter, Saturno, Urano eta Neptuno

3.1. Taula: Eguzki-sistemaren planeta nagusien masak, eguzkiarekiko distan-tziak, orbitaren periodoa eta eszentrikotasuna

Planeta	Masak kg	Distantzia AU	Periodoa urteak	Eszentrikotasuna
Eguzkia	1.99×10^{30}			
Merkurio	3.30×10^{23}	0.39	0.24	0.205
Artizarra	4.87×10^{24}	0.72	0.007	0.007
Lurra	5.97×10^{24}	1.00	1.007	0.017
Marte	6.42×10^{23}	1.52	1.88	0.094
Jupiter	1.90×10^{27}	5.20	11.86	0.049
Saturno	5.68×10^{26}	9.54	29.42	0.057
Urano	8.68×10^{25}	19.19	83.75	0.046
Neptuno	1.02×10^{26}	30.06	163.72	0.011
Pluton	1.31×10^{22}	39.53	248.02	0.244

Hiru dira erabiltzen diren koordenatu sistema nagusienak:

1. Koordenatu barizentrikoak.
2. Koordenatu heliozentrikoak.
3. Koordenatu jacobiarak.

Ohikoa da ekuazio diferenzialak koordenatu heliozentrikoen (eguzkiaren zen-troarekiko) arabera definitzea. Ekuazioen zehaztapenak [B.2.](#) eranskinean eman ditugu.

Problemak

Eguzki-sistemaren simulaziorako test problemak deskribatuko ditugu. Kanpo-planeten problematik abiatuta, gero eta problema konplexuagoak azalduko ditugu. PW, Sharp-ek [105] eguzki-sistemaren problemen bilduma interesgarria egin zuen, eta bertan problema hauek guztiak problema ez-zurrunak konsideratzen dituela nabarmentzekoa da.

Kanpo-planeten problema

Kanpo-planeten problemaren ereduan, eguzkia, lau planeta nagusiak (Jupiter, Saturno, Urano, Neptuno) eta Pluton konsideratuko ditugu. Eguzki-sistemaren kanpo-planeten mugimenduaren azterketa interesgarria da. Lehenik, planeta nagusi hauen eboluzioa eguzki-sistema osoaren zati garrantzitsuena da eta barne-planeten mugimendua kontutan hartzeak ala ez, kanpo-planeten zenbakizko integrazioarengan oso eragin txikia du. Bigarrenik, urrats luzera handia erabil daiteke eta beraz, epe luzeko integrazioak errazten dira (konputazio denbora gutxiago behar delako). Hirugarrenik, Plutonen orbitaren berezitasunak ikertzea, 1960–1980 urteetan interes handikoa izan zen.

Hasierako balioak [54] liburutik hartu ditugu. Planetei dagokien masak [3.2.](#) taulan eta kokapenak/abiadurak [3.3.](#) taulan laburtu ditugu. planeten masak eguzkiarekiko erlatiboak dira, hau da, eguzkiaren masa 1 da eta gravitazio konstantea $G = 2.95912208286 \cdot 10^{-4}$. Barne-planeten masak eguzkiaren masari gehitu zaizkio eta horregatik, eguzkiaren masak, $m_0 = 1.00000597682$ balioa hartzen du.

9-planeten problema

Eguzki-sistemaren 9-planeten zenbakizko integrazioak, kanpo-planeten problemak baino konplexutasun handiago du. Planeten eta eguzkiaren arteko interakzio kopurua 45 (kanpo-planeten problemen 15) da. Planeten orbiten periodoaren arteko aldea askoz handiago da. Merkurioren orbitaren eszentrikotasuna $e = 0.206$ (Jupiterren orbitaren eszentrikotasuna $e = 0.048$) da.

3.2. Taula: Kanpo-planeten masak

Gorputza	Masa
Eguzkia	1.000005976823
Jupiter	0.000954786104043
Saturno	0.000285583733151
Urano	0.0000437273164546
Neptuno	0.0000517759138449
Pluton	$1/(1.3 \cdot 10^8)$

Eedu honetan, Lur-Ilargi sistema (*EMB*) masa puntual bakarra konsideratzen da. Lur-Ilargi sistemaren masa, bi gorputzen masen arteko batura da eta kokapena, Lur-Ilargi sistemaren barizentroan finkatzen da.

Hasierako balioak *DE-430* (2.014) [41] azken efemeride artikulutik hartu ditugu. Eguzki eta planeten hasierako kokapenak (AU) eta abiadurak (AU/egun), (3.5.) taulan laburtu ditugu. Era berean, planeta bakoitzari dagokion Gm balioa (3.4.) taulan laburtu dugu.

Laskar-en eredu

Eguzki-sistemaren mugimenduaren azterketa zehatza egiteko, planeten eta Ilargiaren orbiten mugimenduaren ekuazioak nahiz lur eta Ilargiaren errotazio mugimenduaren ekuazioak integratu behar dira.

Laskar-ek, 2.011. urtean epe luzeko zenbakizko integratorako [80] erabilitako eguzki-sistemaren eredu deskribatuko dugu. Hasierako integracioetan, eguzkia, 8 planetak, Pluton eta Ilargia bakarrik konsideratu zituen. Eguzkiaren erlatibilitatea efektua (Saha eta Tremaine-ek [101] finkatutako teknikaren arabera) eta eredu errealistaren indar ez grabitazional garrantzitsuenak aplikatu zituen. Azken integracioetan, Zeres, Palas, Vesta, Iris eta Bamberga asteroideak gehitu zituen.

Ilargia gorputz independente gisa konsideratu zuen. Ilargiaren Lurrareko distantzia (380.000 km), beste gorputzekiko distantziekin alderatzen badugu (eguzkiarekiko 150.000.000 km eta Artizarrarekiko 45.000.000 km) oso txikia da. Hori dela eta, Ilargiaren kokapena, eguzki-sistemaren barizentroarekiko konsideratu ordez, Lurrareko konsideratuz doitasun handiagoa lortuko da. Lurraren eguzkiarekiko kokapena (q_e) eta Ilargiaren eguzkiarekiko kokapen (q_m), hurrenez-hurren, Lur-Ilargi sistemaren barizentroaren eguzkiarekiko kokapena (q_B) eta Ilar-

3.3. Taula: Kanpo-planeten problemaren hasierako balioak, kokapenak (x, y, z) eta abiadurak (v_x, v_y, v_z)

Gorputza	Balioa			
Eguzkia	x, y, z	0.	0	0.
	v_x, v_y, v_z	0.	0.	0.
Jupiter	x, y, z	-3.5023653	-3.8169847	-1.5507963
	v_x, v_y, v_z	0.00565429	-0.00412490	-0.00190589
Saturno	x, y, z	9.0755314	-3.0458353	-1.6483708
	v_x, v_y, v_z	0.00168318	0.00483525	0.00192462
Urano	x, y, z	8.3101420	-16.2901086	-7.2521278
	v_x, v_y, v_z	0.00354178	0.00137102	0.00055029
Neptuno	x, y, z	11.4707666	-25.7294829	-10.8169456
	v_x, v_y, v_z	0.00288930	0.00114527	0.00039677
Pluton	x, y, z	-15.5387357	-25.2225594	-3.1902382
	v_x, v_y, v_z	0.00276725	-0.00170702	-0.00136504

giaren Lurrarekiko kokapena (q_{em}) aldagaiekin ordezkatzen dira,

$$q_B = \frac{Gm_e q_e + Gm_m q_m}{Gm_e + Gm_m},$$

$$q_{em} = q_m - q_e.$$

Argitzea komeni da, ekuazio diferenzialaren eskuin aldeko expresioa ebaluatze-ko (q_e, q_m) aldagaiak erabiliko ditugula eta (q_B, q_{em}) aldagai berriak integratzeko erabiliko ditugula.

```
Lurra, Ilargia = { $q_B, q_{em}$ };  

for  $i \leftarrow 1$  to endstep do  

   $\{q_e, q_m\} \leftarrow \{q_B, q_{em}\};$   

  Ebaluatu  $\dot{y} = f(y);$   

   $\{q_B, q_{em}\} \leftarrow \{q_e, q_m\};$   

  Integrazioa ( $q_B, q_{em}$ );  

end
```

Algoritmoa 8: Ilargiaren kalkuluak

3.5. Laburpena

Atal honetan, pendulu bikoitzaren problema eta eguzki-sistema grabitazionalaren eredu ezberdinen zehaztasunak eman ditugu. Batetik, pendulu bikoitzaren proble-

3.4. Taula: Planeten GM balioak

Gorputza	$GM (au^3/day^3)$
Eguzkia	$0.295912208285591100e - 03$
Merkurio	$0.491248045036476000e - 10$
Artizarra	$0.724345233264412000e - 09$
Lurra	$0.888769244512563400e - 09$
Marte	$0.954954869555077000e - 10$
Jupiter	$0.282534584083387000e - 06$
Saturno	$0.845970607324503000e - 07$
Urano	$0.129202482578296000e - 07$
Neptuno	$0.0152435734788511000e - 07$
Pluton	$0.217844105197418000e - 11$
Ilargia	$0.109318945074237400e - 10$

maren hasierako balioak [31] artikulutik hartu ditugu. Bestetik, eguzki-sistema grabitacionalaren problemaren integratorako hasierako balioak lan hauetatik hartu ditugu: kanpo-planeten problemarentzat [54] liburutik eta 9-planeten problema-rentzat 2014. urteko efemerideen [41] artikulutik hartu ditugu. Eguzki-sistemaren problemaren integratorako hasierako balioak jasotzen dituzten beste lan hauek ere aipatu nahi genitzuke: P.W. Sharp-ek eguzki-sistemaren problemen bilduma [105] eta Laskar-en [81] artikuluaren informazio osagarria.

3.5. Taula: [

9-planeten problemaren hasierako balioak]Eguzkiaren eta 9 planeten hasierako balioak, kokapenak (x, y, z) (AU) eta abiadurak (v_x, v_y, v_z) (AU/egun). Julian data (TDB) 2440400.5 (1969. ekainaren 28) eta ICRFR2 (International Celestial Reference Frame) koordenatu sistemana emanak dira

Gorputza	Balioa			
Eguzkia	x, y, z	0.00450250878464055477	0.00076707642709100705	0.00026605791776697764
	v_x, v_y, v_z	-0.00000035174953607552	0.00000517762640983341	0.00000222910217891203
Merkurio	x, y, z	0.36176271656028195477	-0.09078197215676599295	-0.08571497256275117236
	v_x, v_y, v_z	0.00336749397200575848	0.02489452055768343341	0.01294630040970409203
Artizarra	x, y, z	0.61275194083507215477	-0.34836536903362219295	-0.19527828667594382236
	v_x, v_y, v_z	0.01095206842352823448	0.01561768426786768341	0.00633110570297786403
EMB	x, y, z	0.12051741410138465477	-0.92583847476914859295	-0.4015402264531522236
	v_x, v_y, v_z	0.01681126830978379448	0.00174830923073434441	0.00075820289738312913
Marte	x, y, z	-0.11018607714879824523	-1.32759945030298299295	-0.60588914048429142236
	v_x, v_y, v_z	0.01448165305704756448	0.00024246307683646861	-0.00028152072792433877
Jupiter	x, y, z	-5.37970676855393644523	-0.83048132656339789295	-0.22482887442656542236
	v_x, v_y, v_z	0.00109201259423733748	-0.00651811661280738459	-0.00282078276229867897
Saturno	x, y, z	7.89439068290953155477	4.59647805517127300705	1.55869584283189997764
	v_x, v_y, v_z	-0.00321755651650091552	0.00433581034174662541	0.00192864631686015503
Urano	x, y, z	-18.26540225387235944523	-1.16195541867586999295	-0.25010605772133802236
	v_x, v_y, v_z	0.00022119039101561468	-0.00376247500810884459	-0.00165101502742994997
Neptuno	x, y, z	-16.05503578023336944523	-23.94219155985470899295	-9.40015796880239402236
	v_x, v_y, v_z	0.00264276984798005548	-0.00149831255054097759	-0.00067904196080291327
Pluton	x, y, z	-30.48331376718383944523	-0.87240555684104999295	8.91157617249954997764
	v_x, v_y, v_z	0.00032220737349778078	-0.00314357639364532859	-0.00107794975959731297

3.6. Taula: Eguzki-sistemaren planeta, Ilargia eta asteroide nagusien parametroak

Planeta	Distantzia AU	Periodoa urte	GM ($au^3/egun^3$)	Ezentrizitatea
Eguzkia			$0.2959e - 03$	
Merkurio	0.39	0.24	$0.4912e - 10$	0.205
Artizarra	0.72	0.007	$0.7243e - 09$	0.007
Lurra	1.00	1.007	$0.8887e - 09$	0.017
Ilargia			$0.1093e - 10$	0.055
Marte	1.52	1.88	$0.9549e - 10$	0.094
Jupiter	5.20	11.86	$0.2825e - 06$	0.049
Saturno	9.54	29.42	$0.8459e - 07$	0.057
Urano	19.19	83.75	$0.1292e - 07$	0.046
Neptuno	30.06	163.72	$0.1524e - 07$	0.011
Zeres	2.77	4.6	$0.1400e - 12$	0.07
Palas	2.77	4.61	$0.3104e - 13$	0.23
Vesta	2.36	3.63	$0.3854e - 13$	0.08
Iris	2.38	3.68	$0.2136e - 14$	0.21
Bamberga	2.68	4.39	$0.1388e - 14$	0.34
Pluton	39.53	248.02	$0.2178e - 11$	0.244

3.7. Taula: Ilargiaren Lurrarekiko hasierako balioak

Gorputza	Balioa			
Ilargia	x, y, z	-0.00080817735147818490	-0.00199462998549701300	-0.00108726268307068900
	v_x, v_y, v_z	0.00060108481561422370	-0.00016744546915764980	-0.00008556214140094871

4. Kapitulua

Koma higikorreko aritmetika

4.1. Sarrera

Konputagailuetan, zenbaki errealak (\mathbb{R}) bit kopuru finituaren bidez adierazi behar dira eta honetarako, koma-higikorreko adierazpen sistema ($\mathbb{F} \subset \mathbb{R}$) erabiltzen da. Zenbaki erreal batzuk, \mathbb{F} sistemaren adierazpen zehatza dute, baina beste batzuk hurbildu egin behar dira. Era berean, eragiketa aritmetikoen (+, -, *, /) kalkulu gehienetan ere emaitzaren hurbilpena egin beha da. \mathbb{R} sistematik \mathbb{F} sistemara bihurtzeko funtziotako biribiltzea esaten zaio. Oro har, konputazio zientzian biribiltze errore honen eragina garrantzitsua da eta errorea gutxitzeko ahalegin berezia beharrezkoa da.

Egungo konputagailuen koma-higikorreko aritmetikaren implementazioak, *IEEE-754* estandarrean [62] oinarritzen dira. *IEEE-754* estandarrak, koma-higikorreko aritmetikaren konputaziorako formatu eta metodoak definitzen ditu. Konputazioen fidagarritasuna eta aplikazioen portabilitatea bermatzen ditu.

Atal honetan, koma-higikorreko aritmetika eta biribiltze errorearen oinarria azalduko ditugu. Ondoren, konputazioetan biribiltze erroreak gutxitzeko teknika ezagun batzuk azalduko ditugu.

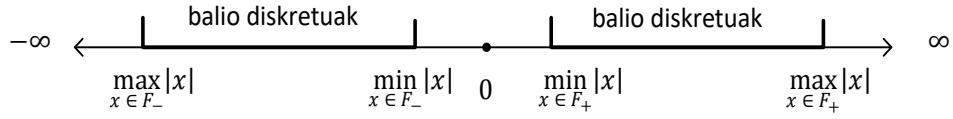
4.2. IEEE-754 estandarra

Koma-higikorreko zenbaki multzoa finitua da eta \mathbb{F} izendatuko dugu. Koma-higikorreko adierazpen zehatza duten zenbaki errealei koma-higikorreko zenbakiak deritzogu,

$$\mathbb{F} \subset \mathbb{R}.$$

\mathbb{F} zenbaki multzoa, 4.1.irudian laburtu dugu. Bai zenbaki positiboentzat, bai negatiboentzat, adieraz daitekeen zenbaki handienaren eta txikienaren arteko balio

bakanez osatuta dago. Multzoaren kanpoaldean zenbaki hauek guztiak ditugu: batetik overflow tarteak ($(-\infty, \max_{x \in \mathbb{F}_-} |x|)$ eta $(\max_{x \in \mathbb{F}_+} |x|, \infty)$) daudenak; bestetik underflow tarteak ($(\min_{x \in \mathbb{F}_-} |x|, 0)$ eta $(0, \min_{x \in \mathbb{F}_+} |x|)$) daudenak.



4.1. Irudia: Koma-higikorreko zenbakien multzoa

IEEE-754 estandarraren arabera, n -biteko koma-higikorreko adierazpenak bi zati ditu (ikus 4.2. irudiko adibidea),

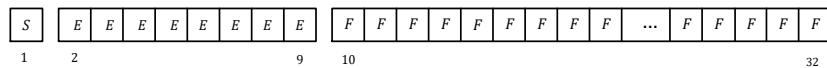
1. m bitez osatutako zatia, mantisa (M) izenekoa. Horietako bit batek (S) zeinuadierazten du. Bestalde M mantisa modu normalizatu honetan emanda, $\pm 1.F$ eta zati erreala (F) bakarrik gorde behar da.
2. Esponentea (E), $(n - m)$ bitez adierazitako zenbaki osoa. Zeinuarentzat ez da bit zehatzik, baizik *bias* izeneko balio bat kenduz adierazten dira zenbaki positiboak eta negatiboak.

Beraz, oinarri bitarrean koma-higikorreko zenbaki hauek adierazten dira,

$$M \times b^E, \quad b = 2,$$

eta biribiltze unitatea (*unit roundoff*) era honetan definituko dugu,

$$u = 2^{-m}.$$



4.2. Irudia: 32-biteko koma-higikorreko zenbakiaren adierazpena: esponentearentzat 8-bit eta mantisarentzat 24-bit (bit bat zeinuarentzat eta beste 23 bit, $1.F$ eran normalizatutako mantisarentzat) banatuta

IEEE-754 estandarrean, oinarri bitarreko koma-higikorreko hiru formatu definitzen dira: bata doitasun arrunta (*single precision*), bestea doitasun bikoitza

4.1. Taula: IEEE-754 koma-higikorreko formatuak

Formatoa	Tamaina	Mantisa	Esponentea	Tartea	$u = 2^{-m}$
	n	m	n-m		
Arrunta	32 bit	24	8	$10^{\pm 38}$	6×10^{-8}
Bikoitza	64 bit	53	11	$10^{\pm 308}$	1×10^{-16}
Laukoitza	128 bit	113	15	$10^{\pm 11356}$	1×10^{-35}

(*double precision*) eta hirugarrena doitasun laukoitza (*quadruple precision*) ize-nekoak (4.1. Taula).

Doitasun bikoitzeko oinarrizko eragiketak (batuketa, kenketa, biderketa, zatiketa, eta erro karratua) hardware bidez exekutatzen dira [91] eta azkarrik dira. Makina ziklo bakoitzeko, 2 eta 4 batuketa, kenketa edo biderketa egin ohi dira; zatiketa eta erro karratua aldiz, eragiketa motelagoak dira. Bestalde, doitasun arruntaren aritmetika, doitasun bikoitza baino azkarragoa da: garraiatu behar den bit kopuru erdia delako eta gainera, hardware bereziei esker (adibidez Intel makinan SSE moduluak), eragiketa aritmetikoak azkarragoak direlako. 2008. urtean, IEEE-754 estandarrak, 128-biteko koma-higikorreko aritmetika onartu zuen, baina inplementazioa softwarez bidezkoa da eta exekuzioa, gutxi gorabehera, doitasun bikoitzeko aritmetika baino 10-15 aldiz motelagoa da.

Problema batzuk, doitasun bikoitza baino doitasun handiagoa behar dute [68]. Doitasun laukoitza edo altuagoa, software liburutegien bidez emulatu ohi dira. Doitasun altuko zenbakiak adierazteko nagusiki bi modu bereizten dira:

1. *Digitu-anitzeko adierazpena*. Zenbakiak esponente bakarra eta mantisa bat baino gehiagorekin adierazten dira (adb. *GNU MPFR liburutegia* [42]).
2. *Termino-anitzeko adierazpena*. Zenbakiak ebaluatu gabeko hainbat koma-higikorreko makina zenbaki estandarren batura gisa adierazten dira (adb. Bailey QD liburutegia) [58] eta exekuzioaren ikuspegitik, hardware bidezko inplementazioaren abantaila dute.

Doitasun laukoitzeko gure esperimentuetarako, *GCC libquadmath liburutegia* [47] erabili dugu. Doitasun laukoitzean exekutatutako integrazioen zenbakizko soluzioak, soluzio zehatzak konsideratu ditugu eta doitasun bikoitzeko inplementazioaren errorea, soluzio zehatzarekiko diferentzia gisa kalkulatu dugu.

Laskar-ek epe luzeko eguzki-sistemaren simulazioaren (-250 eta $+250$ milioitako integrazio tarteak) konputaziorako kalkuluak [80], kontu handiz eta doitasun handian egin behar ditu. Dena den, era honetako problemak salbuespenak dira eta ez da ohikoa izaten doitasun handian lan egin beharra. Egia da ere, neurri fi-

siko oso gutxi ezagutzen direla hain doitasun handian (adibidez 50-bitekin, Lurra eta Ilargiaren arteko distantzia, milimetroko errorearekin adieraz daiteke).

4.3. Biribiltze errorea

Zenbakizko integrazioen errorea, trunkatze eta biribiltze errorez osatuta dago. Urrats luzera nahi bezain txikia aukeratuz, trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiago izango da eta beraz, zenbakizko integrazio hauetan errorean biribiltze errorea nagusitzen da. Epe luzeko eta doitasun handiko integrazioetan, urrats luzera txikia erabiltzen denez, biribiltze errorea gutxitzea funtsezkoa izango da.

Bi biribiltze errore mota bereiziko ditugu, bata adierazpenaren errorea eta bestea, aritmetikaren errorea.

Adierazpenaren errorea

Zenbaki erreals batzuk, \mathbb{F} koma-higikorreko multzoan zehazki adieraz daitezke eta beste batzuk ordea, hurbilpen batez adierazi behar dira. $x \in \mathbb{R}$ izanik, $fl : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{F}$ koma-higikorreko zenbakia esleitzen dion funtzioari deituko diogu: $x \in \mathbb{R}$ balioaren gertuen dagoen $fl(x) \in \mathbb{F}$ itzultzen duen funtzioa bezala definitzen da. Hau da, $f_1, f_2 \in \mathbb{F}$ jarraian dauden koma-higikorreko zenbakiak badira eta $x \in \mathbb{R}$, $f_1 \leq x \leq f_2$ bada,

$$fl(x) = \begin{cases} f_1 & \text{if } |x - f_1| < |x - f_2| \\ f_2 & \text{if } |x - f_1| \geq |x - f_2| \end{cases}.$$

Jarraian, koma-higikorreko adierazpenaren errore absolutua eta errore erlatiboa finkatuko ditugu.

- Errore absolutua,

$$\Delta x = fl(x) - x = \tilde{x} - x.$$

- Errore erlatiboa,

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x} = \frac{\tilde{x} - x}{x}.$$

- Aurreko bi definizioen ondorioz honako formula erabilgarria dugu,

$$\tilde{x} = x + \Delta x = x(1 + \delta x).$$

Koma-higikorreko zenbaki sistema bitarrean (m = mantisa adierazteko bit kopurua izanik) $|x|$ balioa, \mathbb{F} multzoaren zenbaki txikienaren eta handienaren artean badago,

$$|\delta x| < u \text{ non } u = 2^{-m},$$

bermatuta dagoela froga daiteke [28].

Aritmetikaren errorea

Koma-higikorreko zenbakien arteko eragiketa baten emaitzak, ez du zertan \mathbb{F} multzoan adierazpen zehatza izan eta orduan, emaitza biribildu egingo da. Adibidez, m digituzko bi zenbakien biderketaren emaitza zehatza adierazteko, $2m$ digituzko mantisa behar dugu (m digituzko galera) [44]. Salbuespena, biderkagaietako bat 2-ren berretura denean gertatzen da, orduan biderketa zehatza baita.

Adibidea. Demagun lau digitu hamartar errealeko aritmetikarekin ari garela lanean.

Emaitza zehatza, $1,343 \times 2,103 = 2,824229$.

Hiru digitu hamartar errealeko aritmetika, $1,343 \times 2,103 \approx 2.824$.

Hauek zenbaki errealen arteko funtsezko eragiketak badira, $* : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

$$* \in \{+, -, \times, /\},$$

koma-higikorreko zenbakien arteko funtsezko eragiketak era honetan izendatuko ditugu $\circledast : \mathbb{F}^2 \rightarrow \mathbb{F}$,

$$\circledast \in \{\oplus, \ominus, \otimes, \oslash\}.$$

$\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{F}$ emanik eta $z = \tilde{x} * \tilde{y}$ emaitza zehatza bada, $\tilde{z} = \tilde{x} \circledast \tilde{y}$ (edo $\tilde{z} = fl(\tilde{x} * \tilde{y})$) eragiketaren emaitzaren errore absolutua eta errore erlatiboa definituko ditugu,

- Errore absolutua,

$$\Delta z = \tilde{z} - z = (\tilde{x} \circledast \tilde{y}) - (\tilde{x} * \tilde{y}).$$

- Errore erlatiboa,

$$\delta z = \frac{\Delta z}{z} == \frac{(\tilde{x} \circledast \tilde{y}) - (\tilde{x} * \tilde{y})}{(\tilde{x} * \tilde{y})}.$$

- Honako erlazio hau ondorioztatu daiteke,

$$\tilde{z} = (\tilde{x} \circledast \tilde{y}) = z + \Delta z = z (1 + \delta z).$$

Koma-higikorreko aritmetikan, $|\delta z| < u$, non $u = 2^{-m}$, beteko dela frog daiteke [28].

Zenbakizko algoritmoen biribiltze errorearen eraginaren azterketa formalak, propietate hauetan oinarritzen dira. Bestalde, errore erlatiboak emaitzaren digitu zuzenen kopurua neurtzen du:

$$\delta z \approx 10^{-k} \Rightarrow \approx k \text{ digitu hamartar zuzen.}$$

Biribiltze errorearen hedapena

Ohiko konputazioetan eragiketa aritmetiko kopuru handia egin behar dugu emaitza lortzeko. Batzuetan, eragiketen biribiltze erroreak elkar ezerezatzen dira baina kasu txarrenean, biribiltze errorea metatu eta magnitude handikoa izan daiteke.

Adibidea. Modu honetako batura batean , non $n > 2$ eta $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n \in \mathbb{F}$,

$$\bigoplus_{i=1}^n (\tilde{x}_i) = \left(\sum_{i=1}^n \tilde{x}_i \right) (1 + \delta),$$

$|\delta| < u$ non $u = 2^{-m}$ beteko denik, ezin daiteke bermatu.

Analisi zehatza egiten badugu $n = 3$ adibiderako, honako espresioa lortzen dugu,

$$((\tilde{x}_1 \oplus \tilde{x}_2) \oplus \tilde{x}_3) = ((\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2)(1 + \delta_1) + \tilde{x}_3)(1 + \delta_2), \quad \delta_1, \delta_2 < u.$$

Ezabapen arazoa

Algoritmoen kalkuluetan, doitasun galera azkarra gerta daiteke. Horren adibidea ezabapen arazoa dugu: oso antzekoak diren bi zenbakiren arteko kendura egiten dugunean gerta daitekeena.

Adibidea. Mathematican kalkulatutako adibide honetan, ezabapen errorea nola gertatzen den erakutsi dugu.

```
>> InputForm[N[Pi]]
>> 3.141592653589793

>> y=N[Pi]*10^(-10);
>> InputForm[y]
>> 3.1415926535897934*10^(-10)

>> z=1.+y;
>> InputForm[z]
>> 1.0000000003141594 # 16-digitu hamartar zuzenak.
```

```
>> InputForm[z - 1.]
>> 3.141593651889707*10^(-10)    # 6-digitu hamartar zuzenak.
```

4.4. Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak

Batuketa eta biderketa eragiketen biribiltze errorea kalkulatzeko algoritmoak ezagunak dira [30, 59]. Algoritmo hauek, *termino-gaitzeko adierazpenetan* oinarritzen dira eta baturaren kasuan, batura konpentsatu izeneko algoritmoaren oinarria da. Ikusiko dugun bezala, algoritmo simpleak dira eta konputazio kostu txikia dute.

Teknika hauek, zenbakizko integrazioaren implementazioaren kalkulu "kritikoetan" erabiliko ditugu, soluzioaren doitasuna handitzeko asmoarekin.

Batura: Fast2Sum

Fast2Sum algoritmoa, 1971.ean Dekker-ek asmatu zuen [30]. Koma-higikorreko $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{F}$ non $|\tilde{x}| \geq |\tilde{y}|$ bi zenbakien arteko $\tilde{z} = \tilde{x} \oplus \tilde{y}$ batuketari dagokion e biribiltze errorea era honetan kalkula daiteke,

$$\begin{aligned}\tilde{z} &= \tilde{x} \oplus \tilde{y}; \\ e &= \tilde{y} \ominus (\tilde{z} \ominus \tilde{x});\end{aligned}$$

Algoritmoa 9: Fast2Sum

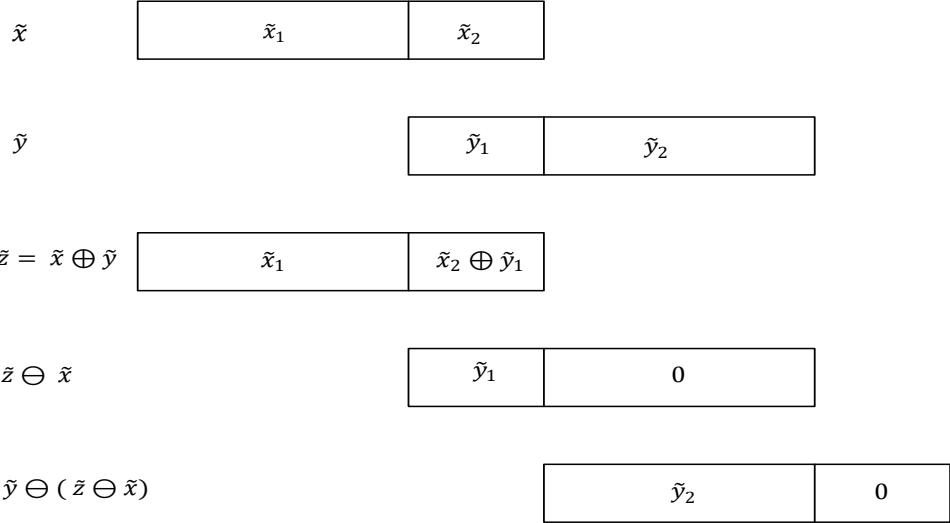
4.3.irudiaren laguntzarekin hobeto uler daiteke batuketaren biribiltze errorea-ren kalkulua [59].

Batura konpensatua

Era honetako batugai askoren arteko batuketan,

$$z_{n+1} = z_0 + \sum_{i=0}^n x_i,$$

biribiltze errorea gutxitzeko teknika ezaguna da [59, 91, 54]. Ideia da, bi zenbakien baturan egindako biribiltze errorea lortu, eta errore hau hurrengo baturan erabiltzea. Jarraian azaltzen den moduan, urrats bakoitzaren amaieran e_i errore



4.3. Irudia: Batuketaren biribiltze errorea

estimazioa kalkulatuko dugu eta hurrengo urratsean, batugaiari gehituko diogu.

```

 $\tilde{z}_0 = z_0; e_0 = 0;$ 
for  $i \leftarrow 0$  to  $n$  do
     $x = \tilde{z}_i;$ 
     $y = x_i + e_i;$ 
     $\tilde{z}_{i+1} = x + y;$ 
     $e_{i+1} = (x - z) + y;$ 
end

```

Algoritmoa 10: Kahan-en batura konpentsatua

Knuth-ek eta Kahan-ek [91] frogatu zuten, batura konpentsatuko algoritmoaren bidez kalkulatutako z_{n+1} baturak honakoa betetzen duela:

$$\left| z_{n+1} - (z_0 + \sum_{i=0}^n x_i) \right| \leq (2u + \mathcal{O}(nu^2)) \left(|z_0| + \sum_{i=1}^n |x_0| \right).$$

Jakina da, batugaiak bektoreak diren kasurako, hau da, $\tilde{z}_0, e_0, x_0, x_1, \dots, x_n \in \mathbb{F}^d$, algoritmoa orokor daitekeela. Beraz, 10 algoritmoa n eta d parametroak dituen funtzio familia gisa interpreta daiteke,

$$S_{n,d} : \mathbb{F}^{(n+3)d} \rightarrow \mathbb{F}^{2d}, \quad (4.1)$$

zeinek $\tilde{z}_0, e_0, x_0, x_1, \dots, x_n \in \mathbb{F}^d$ argumentuak emanik, $\tilde{z}_{n+1}, e_{n+1} \in \mathbb{F}^d$ balioak

itzultzen dituen, eta $(\tilde{z}_{n+1} + e_{n+1}) \approx (\tilde{z}_0 + e_0 + x_0 + x_1 + \cdots + x_n)$ hurbilketa den.

Zenbakizko integrazioak

Zenbakizko integrazioetan, $n = 1, 2, \dots$ balioentzat era honetako baturak kalkulatu behar ditugu [54],

$$y_{n+1} = y_n + \delta_n,$$

non $|\delta_n| < |y_n|$ izan ohi den. Beraz, integrazioaren batura honen biribiltze errorea gutxitzeko batura konpentsatua erabiliko dugu.

$y_{n+1} \in \mathbb{R}^d$, $y_{n+1} = \tilde{y}_n + \tilde{\delta}_n$ batura zehatza izanik eta $\tilde{y}_{n+1} \in \mathbb{F}^d$, $\tilde{y}_{n+1} = \tilde{y}_n \oplus \tilde{\delta}_n$ koma-higikorreko hurbilpena izanik, batura konpentsatuaren bidez lortutako errorearen estimazioa e_{n+1} , 11 algoritmoa jarraituz lor daiteke eta baturan egindako biribiltze errore zehatza da,

$$y_{n+1} = \tilde{y}_{n+1} + e_{n+1}. \quad (4.2)$$

$$\tilde{y}_0 = fl(y_0); e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$$

for $n = 0, 1, 2, \dots$ **do**

$$\begin{aligned} inc &= \tilde{\delta}_n \oplus e_n; \\ \tilde{y}_{n+1} &= \tilde{y}_n \oplus inc; \\ e_{n+1} &= (\tilde{y}_n \ominus \tilde{y}_{n+1}) \oplus inc; \end{aligned}$$

end

Algoritmoa 11: Batura konpentsatua (zenbakizko integrazioa)

Goian aipatutako ideia, beste ikuspegi batetik ere uler daiteke. Zenbakizko soluzioa, doitasun bikoitzeko bi balioen batura gisa $y_n = \tilde{y}_n + e_n$ (ia doitasun laukoitza), adierazten ari gara eta beraz, interpretazio honen arabera, konputazio eragiketa batzuk ia doitasun laukoitzean egiten ariko ginateke. Zentzu honetan gure implementazioan, hasierako balio zehatza $y_0 = y(t_0)$, bi balioen batura gisa $y_0 = \tilde{y}_0 + e_0$ ulertu behar da eta era honetan hasieratuko dugu,

$$\begin{aligned} \tilde{y}_0 &= fl(y_0), \\ e_0 &= fl(y_0 - \tilde{y}_0). \end{aligned}$$

Bidekerta: 2MultFMA

IEEE 754-2008 estandarrean, *FMA* [91] (*fused multiply-add*) instrukzioa gehitu zen eta hurrengo urteetan, ordenagailu arruntetan zabaltzea espero da. Instrukzio honen garrantzia handia da: orokorrean konputazioak azkartzen ditu eta biderketa eskalarren, matrize biderkaduren eta polinomio ebaluazioen biribiltze errorea

txikitzen du. *FMA* instrukzioa, zatiketa eta erro karratuaren algoritmo azkarren diseinuan ere erabiltzen da.

FMA instrukzioak, era honetako konputazioetan biribiltze errore bakarra beramatzen du,

$$fl(\tilde{x} \times \tilde{y} \pm \tilde{z}) = (\tilde{x} \times \tilde{y} \pm \tilde{z})(1 + \delta), \quad \delta < u \text{ non } u = 2^{-m}.$$

FMA instrukzioa erabilgarri dagoenean, biderketaren biribiltze errorea kalkulatzea erraza da; $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{F}$ bi zenbakien arteko biderketari $\tilde{z} = fl(\tilde{x} \times \tilde{y})$ dagokion biribiltze errorea e , non $\tilde{z} + e = \tilde{x} \times \tilde{y}$ den, era honetan kalkulatu daiteke,

$$\begin{aligned}\tilde{z} &= fl(\tilde{x} \times \tilde{y}); \\ e &= fl(\tilde{x} \times \tilde{y} - \tilde{z});\end{aligned}$$

Algoritmoa 12: 2MultFMA

Sterbenz Teorema

Sterbenz teoremaren arabera [107], bi zenbaki elkarrekiko gertu daudenean, honako baldintza betetzen bada, horien arteko kendura zehatza da.

$$x, y \in \mathbb{F}, \quad \frac{y}{2} \leqslant x \leqslant 2y \quad \Rightarrow \quad x - y \in \mathbb{F}. \quad (4.3)$$

4.5. Laburpena

Atal honetan, koma-higikorreko aritmetikaren deskribapena egin ondoren, konputazioen doitasuna handitzeko tresnak azaldu ditugu. Tresna hauek, konputazio kostu txikia dute eta zenbakizko integrazioetan, biribiltze errorea txikitzeo aplikatuko ditugu.

Koma-higikorreko aritmetikan sakontzeko honako bibliografia azpimarratuko dugu: [94, 91, 59, 28].

III. Atala

Ekarpenak.

5. Kapitulua

IRK: Puntu-finkoaren iterazioa.

5.1. Sarrera.

Sistema Hamiltondar ez-zurrunen doitasun altuko zenbakizko integraciolarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa garatu dugu. Konputazioetarako koma-higikorreko aritmetika erabiltzen denez, biribiltze erroreak integrazioen doitasuna mugatzen du. Hortaz, epe luzeko doitasun altuko zenbakizko integrazioen implementazioetan, biribiltze errorearen eragina txikia izatea eta honen estimazioa ezagutzea interesgarria izan daiteke.

Runge-Kutta implizitu simplektikoaren (Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoa) implementazioa proposatu dugu, eta biribiltze errorearen garapena txikia izateko ahalegin berezia egin dugu. Implementazioa, problema ez-zurrunetan aplikatzeko garatu dugunez, ekuazio-sistema implizitua, puntu-finkoaren iterazioaren bidez ebatziko dugu (puntu-finkoaren iterazioan eta Newtonen iterazio simplifikatuan oinarritutako implementazioen eraginkortasun azterketak, [54, 67] lanetan kontsulta daitezke).

Integracioaren exekuzio denborak onargarriak izan daitezen, honako suposizioa egingo dugu: ekuazio diferentzialaren eskuin aldeko funtziaren sarrera eta irteera argumentuak, makina zenbakiak dira, hau da, koma-higikorreko aritmetikaren hardware bidezko exekuzioa azkarra duen datu-mota. Gaur-egungo zientzia-konputazioa, 64-biteko koma-higikorreko aritmetikan (*double* datu-mota) oinarritzen da eta beraz, erabiltzaileak ekuazio diferentziala datu-mota honetan zehaztuko duela suposatu dugu.

Gure implementazioa, biribiltze errorearen garapenaren ikuspegitik, ia optimoa izatea nahi dugu, hau da, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazio onenaren birbiltze errorearen garapenaren antzekoa duen implementazioa lortu nahi dugu. Era berean, biribiltze errorearen estimazioa kalkulatzeko teknika garatu dugu, doitasun txikiagoko bigarren integrazio baten soluzioaren differentzia

gisa kalkulatzen dena.

Lehenengo, Hairer-en IRK metodo simplektikoaren implementazioa [55] aztertuko dugu. Ondoren, IRK implementazio hau hobetzeko gure proposamenak azalduko ditugu eta azkenik, zenbakizko integrazioen bidez, gure implementazio berriaren abantailak erakutsiko ditugu.

5.2. Hairer-en implementazioa.

IRK implementazio estandarra.

Gure abiapuntua, Hairer-ek [55] proposatutako IRK metodoaren implementazioa (batura konpentsatuaren teknikarekin [59] garatutakoa) da. Hairer ohartu zen, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodo simplektikoaren implementazio estandarrean, biribiltze erroreak energian errore sistematiko bat eragiten zuela, beste metodo simplektiko esplizituetan gertatzen ez zena. Bere azterketaren ondorioen arabera, errore sistematiko honen jatorriak bi dira:

1. Aplikatutako IRK metodoa ez da sinpletikoa, hau da ez du (5.8) baldintza betetzen. Integrazioan $a_{ij}, b_i \in \mathbb{R}$ koefiziente zehatzak erabili beharrean, biribildutako $\hat{a}_{ij}, \tilde{b}_i \in \mathbb{F}$ erabiltzen direlako.
2. Geratze irizpide estandarraren ondorioz, urrats bakoitzean errore sistematikoa eragiten da. Geratze irizpide estandarra honakoa da:

$$\Delta^{[k]} = \max_{i=1,\dots,s} \|Y_i^{[k]} - Y_i^{[k-1]}\|_\infty \leq \text{tol} \quad (5.1)$$

non tol finkatutako tolerantzia den.

Konponbideak.

Hairer-ek, energiaren errore sistematikoa desagertzeko, implementazio estandarrean honako aldaketak proposatu zituen:

1. Metodoaren koefizienteen doitasuna handitzea, koefiziente bakoitza komahigikorreko bi koefizienteen batura konsideratz,

$$a_{ij} = \hat{a}_{ij} + \tilde{a}_{ij}, \quad b_i = \hat{b}_i + \tilde{b}_i \quad (5.2)$$

non $\hat{a}_{ij} > \tilde{a}_{ij}$ eta $\hat{b}_i > \tilde{b}_i$ diren.

Adibidez, koefizienteak era honetan zehaztu daitezke,

$$\hat{a}_{ij} = (a_{ij} \otimes 2^{10}) \oslash 2^{10}, \quad \tilde{a}_{ij} = a_{ij} \ominus \hat{a}_{ij}.$$

2. Puntu-finkoaren iterazioen geratze irizpide berria; iterazioak geratu, definitutako norma txikitzeari uzten dionean edo konbergentzia lortu duenean,

$$\Delta^{[k]} = 0 \text{edo } \Delta^{[k]} \geq \Delta^{[k-1]}. \quad (5.3)$$

Hairer-en implementazioaren algoritmoa.

Hairer-ek bere implementazioaren **Fortran kodea** eskuragarri du. Bere funtsa **13** algoritmoan ikus daiteke, eta horrez gain, batura konpentsatuaren teknikaren erabileria **14** algoritmoan zehaztu dugu.

```

 $y_0 = y(t_0); e_0 = 0;$ 
for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $k = 0;$ 
     $Y_{n,i}^{[0]} = y_n + h c_i f(y_n);$ 
    while ( $\Delta^{[k]} \neq 0$  and  $\Delta^{[k]} < \Delta^{[k-1]}$ ) do
         $k = k + 1;$ 
         $F_{n,i}^{[k]} = f(Y_{n,i}^{[k-1]});$ 
         $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + h \left( \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} F_{n,j}^{[k]} \right) + h \left( \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} F_{n,j}^{[k]} \right);$ 
         $\Delta^{[k]} = \max_{i=1,\dots,s} \|Y_{n,i}^{[k]} - Y_{n,i}^{[k-1]}\|_\infty;$ 
    end
     $(y_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow BaturaKonpentsatua(y_n, e_n, F_n^{[k]});$ 
end

```

Algoritmoa 13: Hairer-en IRK implementazioa

Function $BaturaKonpentsatua(y_n, e_n, F_n^{[k]})$

```

 $\hat{\delta}_n = h \left( \sum_{i=1}^s \hat{b}_i F_i^{[k]} \right);$ 
 $\tilde{\delta}_n = h \left( \sum_{i=1}^s \tilde{b}_i F_i^{[k]} \right);$ 
 $ee = \hat{\delta}_n + e_n;$ 
 $yy = y_n + ee;$ 
 $ee = (y_n - yy) + ee;$ 
 $ee = \tilde{\delta}_n + ee;$ 
 $y_{n+1} = y_n + ee;$ 
 $e_{n+1} = (yy - y_{n+1}) + ee;$ 
return  $(y_{n+1}, e_{n+1});$ 

```

Algoritmoa 14: Hairer-en IRK implementazioaren, batura konpentsatua

Hairer-en implementazioaren arazoak.

Hairer-ek bere implementazioarekin, *Hénon-Helies* eta eguzki-sistemaren kanpo-planeten problemetarako energiaren errore sistematikorik ez zegoela baiezta zuen. Energiaren errorea, $k\sqrt{t_n}$ espresioaren arabera handitzen dela erakutsi zuen eta implementazioak, *Brouwer legea* [49] betetzen duela ondorioztatu zuen. Integrazioen azterketa estatistikoa egin zuen biribiltze errorearen ausazkotasuna baiez-tatzeko. Problemaren hasierako balio zehatz bati dagokion perturbatutako $P = 1.000$ integracio exekutatu zituen eta integracio horien energia errorearen batez-bestekoa (μ), zero eta desbideratze estandarra (σ), $k\sqrt{t_n}$ espresioaren araberakoa zela erakutsi zuen. Era berean, integracio amaiera uneko energi erroreen histogramak, $N(\mu, \sigma)$ distribuzio normala betetzen duela erakutsi zuen.

Hairer-en *Fortran* implementazioarekin, zenbakizko integracio berriak egin ditugu eta zenbait kasutan, geratze irizpidea goizegi geratzen dela konprobatu dugu. Eguzki-sistemaren kanpo-planeten hasierako baliodun problemaren integrazioa, $h = 500/3$ eguneko urrats luzerarekin zuzena da baina aldiz okerra $h = 1000/3$ urratsarekin. Gainera, bere implementazioaren biribiltze errorearen propagazioa optimoa ez dela uste dugu.

5.3. Gure implementazioa.

IRK metodoaren puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioa hobetzeko lau proposamen egin ditugu. Lehenik, Runge-Kutta metodoaren birformula-zio bat proposatu dugu, metoda definitzen duten koma-higikorreko koefizienteek izaera simplektikoa zehazki bete dezaten. Bigarrenik, Hairer-ek proposatutako geratze irizpidearen arazoak gainditzeko, geratze irizpide sendoagoa eta normareki-ko independentea garatu dugu.

Hirugarrenik, biribiltze errorea gutxitzeko helburuarekin, koma-higikorreko konputazioak bereziki zaindu ditugu. Kahan-en batura konpentsatuaren [69, 59, 91] algoritmoaren aldaera bat aplikatu dugu.

Azkenik, biribiltze errorearen estimazioa monitorizatzeko teknika proposatu dugu. Biribiltze errorearen estimazioa, integracio nagusi eta doitasun txikiagoko bigarren integrazio baten soluzioen arteko differentzia gisa kalkulatu dugu. Zenbakizko soluzio hauek, bi modutara kalkula daitezke: paraleloan, exekuzio independenteak kontsideratuta; edo bi soluzioen integracio sekuentziala kalkulatz, konputazio kostu gehigarri txikiarekin.

Har dezagun, honako hasierako baliodun problema,

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \tag{5.4}$$

non $y_0 \in \mathbb{R}^d$ eta $f : \mathbb{R}^{d+1} \longrightarrow \mathbb{R}^d$ diren.

Denbora diskretizazioa $t_0 < t_1 < t_2 < \dots$ emanik, (5.4) problemaren $y(t)$ soluzioaren zenbakizko soluzioa $y_n \approx y(t_n)$ ($n = 1, 2, \dots$), integrazio metodo bat aplikatuz lortuko dugu,

$$y_{n+1} = \Phi(y_n, t_n, t_{n+1} - t_n), \quad (5.5)$$

non $\Phi : \mathbb{R}^{d+2} \rightarrow \mathbb{R}^d$ den.

S-ataletako IRK metodoaren kasuan, a_{ij}, b_i , eta $c_i \in \mathbb{R}$ ($1 \leq i, j \leq s$) koefizienteek definitzen dute Φ integrazio metodoa,

$$\Phi(y, t, h) = y + h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, Y_i), \quad (5.6)$$

non $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$ izan ohi da eta Y_i atalak, era honetan implizituki definitzen diren,

$$Y_i = y + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_j) \quad i = 1, \dots, s. \quad (5.7)$$

IRK metodoa simplektikoa da, honako baldintza betetzen bada [67]:

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (5.8)$$

IRK metodoa simplektikoa bada, (5.4) sistemaren integral koadratikoak zehazki mantenduko ditu eta sistema Hamiltondarra balitz, $H(y)$ funtzioko Hamiltondarraren balioa integrazio tarte luzeetarako ondo kontserbatuko du.

Metodoaren birformulazioa.

Metodoa definitzen duten $a_{ij}, b_i \in \mathbb{R}$ koefizienteak, $\tilde{a}_{ij} := fl(a_{ij}), \tilde{b}_i := fl(b_i) \in \mathbb{F}$ biribildutako koefizienteen hurbilpenekin ordezkatzen ditugunean, hauek ez du te simplektikoa izateko baldintza (5.8) beteko. Ondorioz, metodoak ez ditu integral koadratikoak kontserbatuko eta Hamiltondar funtzioaren eboluzioan, drift lineala ageriko da [67].

Arazo hau gainditzekeo, IRK metodoa era honetan birformulatuko dugu,

$$Y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}, \quad L_{n,i} = h b_i f(Y_{n,i}), \quad i = 1, \dots, s, \quad (5.9)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s L_{n,i}, \quad (5.10)$$

non

$$\mu_{ij} = a_{ij}/b_j, \quad 1 \leq i, j \leq s.$$

Runge-Kutta metodoa simplektikoa izateko baldintza (5.8), modu honetan berridatziko dugu,

$$\mu_{ij} + \mu_{ji} - 1 = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (5.11)$$

Birformulazio honek formulazio estandarrarekiko duen abantaila da, baldintza zehazki beteko duten $\tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak aurkitzeko bidea errazten duela, ez baita biderketarik agertzen espresioetan. Jarraian, Gauss kolokazio metodoaren $\tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak finkatzeko teknika deskribatuko dugu.

1. Koefizienteen matrize diagonaleko balioek koma-higikorreko adierazpen zehatza dute,

$$\tilde{\mu}_{ii} := 1/2, \quad i = 1, \dots, s.$$

2. Koefiziente matrizearen behe-diagonaleko balioak finkatuko ditugu,

$$\tilde{\mu}_{ij} := fl(\mu_{ij}), \quad 1 \leq j < i \leq s.$$

3. Koefiziente matrizearen goi-diagonaleko balioak esleituko ditugu,

$$\tilde{\mu}_{ji} := 1 - \tilde{\mu}_{ij}, \quad 1 \leq j < i \leq s.$$

Sterbenz-en teoremak (4.3) ziurtatzen du, $1/2 < |\mu_{ij}| < 2$ denez, $1 - \tilde{\mu}_{ij}$ balioak koma-higikorreko adierazpen zehatza izango duela. Laburtuz, hauek ditugu birformulatutako simplektikotasun baldintza (5.11) zehazki betetzen duten koma-higikorreko $\tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak,

$$\tilde{\mu} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1 - fl(\mu_{21}) & \dots & 1 - fl(\mu_{s1}) \\ fl(\mu_{21}) & 1/2 & \dots & 1 - fl(\mu_{s2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ fl(\mu_{s1}) & fl(\mu_{s2}) & \dots & 1/2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{s \times s}. \quad (5.12)$$

Bestalde, b_i koefizienteak eta ν_{ij} atalen hasieraketarako interpolazio koefizienteak finkatzeko zehaztapenak honakoak dira.

1. hb_i koefizienteak.

Gure implementazioak, $hb_i = h \times b_i$ koefizienteak aurre-kalkulatu egiten ditu. Koefiziente hauek simetrikoak direnez eta $\sum_{i=1}^s hb_i = h$ berdintza bete behar dela jakinda, modu honetan kalkulatuko ditugu,

$$hb_i = fl(h \times b_i), \quad i = 2, \dots, s-1,$$

$$hb_1 := hb_s := \left(h - \sum_{i=2}^{s-1} hb_i \right) / 2.$$

2. ν_{ij} interpolazio koefizienteak.

Formulazio estandarraren λ_{ij} koefizienteetatik abiatuta (2.3.atala), formulazio berriari dagozkion ν_{ij} interpolazio koefizienteak era honetan definituko ditugu,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y_n + h \sum_{j=1}^s \nu_{ij} L_{n-1,j}, \quad \nu_{ij} = \lambda_{ij}/b_j \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (5.13)$$

Geratze irizpidea.

Puntu-finkoaren iterazioaren metodoaren bidez, (5.9) ekuazio implizituaren soluzioa lortzeko, iterazioaren abiapuntua $Y_{n,i}^{[0]}$ finkatu eta $k = 1, 2, \dots$ iterazioetarako $Y_{n,i}^{[k]}$ hurbilpenak lortu behar dira geratze irizpidea bete arte.

```

Hasieratu  $Y_{n,i}^{[0]}$ ;
for ( $k=1, 2, \dots$  konbergentzia lortu arte) do
     $L_{n,i}^{[k]} = h b_i f(Y_{n,i}^{[k-1]}), \quad i = 1, \dots, s;$ 
     $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s;$ 
end

```

Algoritmoa 15: IRK puntu-finkoaren iteraziao

Iterazioa, $Y_{n,i}^{[0]} = y_n$ balioarekin hasieratu daiteke edo aurreko urratsetako atalen balioen interpolazioz lortutako balioekin [54]. Urrats luzera h behar bezain txikia aukeratuz gero, iterazioek (5.9) ekuazio aljebraikoen soluzioa den puntu-finkora konbergituko dute. Gure zenbakizko esperimentuetan nahiz Hairer-ek egindako esperimentuetan [55], h urrats luzera txikiarekin integrazioaren urrats gehienetan, puntu-finkoa lortzen dela baiezta dugu.

IRK metodoaren implementazio estandarraren geratze irizpidea honakoa da,

$$\begin{aligned} \Delta^{[k]} &= (Y_{n,1}^{[k]} - Y_{n,1}^{[k-1]}, \dots, Y_{n,s}^{[k]} - Y_{n,s}^{[k-1]}) \in \mathbb{F}^{sd}, \\ \|\Delta^{[k]}\| &\leq tol \end{aligned} \quad (5.14)$$

non $\|\cdot\|$ aurre-finkatutako bektore norma eta tol , errore tolerantzia den. Tolerantzia txikiegia aukeratzen bada, gerta daiteke tolerantzia hori ez lortzea eta infinituki iterazioak exekutatzea. Baino tolerantzia ez bada behar bezain txikia, iterazioa puntu-finkora iritsi aurretik geratuko da eta lortutako $Y_i^{[k]}$ hurbilpenaren errorea, biribiltze errorea baino handiagoa izango da. Gainera, Hairer-ek iterazio errorea modu sistematikoan metatzen dela konprobatu zuen.

Hairer-ek proposatutako geratze irizpidearen arabera bi arrazoi egon daitezke geratzeko; alde batetik $\Delta^{[k]} = 0$, hau da, puntu-finkora iristea eta beste aldetik,

$\|\Delta^{[k]}\| \geq \|\Delta^{[k-1]}\|$ non

$$\|\Delta^{[k]}\| := \max_{i=1,\dots,s} \|Y_i^{[k]} - Y_i^{[k-1]}\|_\infty,$$

geratzeko bigarren arrazoi honetan, konsideratzen du biribiltze errorearen ondorioz gertatu dela baldintza hori, ondorioz geratzea erabakitzentzu du.

Orokorrean, geratze irizpide honek ondo funtzionatzen du baina zenbait esperimentutan, iterazioak goizegi geratzen direla konprobatu dugu. Hairer-ek, eguzki-sistemaren kanpo-planeten problemaren $h = 500/3$ eguneko urrats luzerarekin egindako integrazioan ondo funtzionatzen du, baina $h = 1000/3$ urrats luzerarekin integratzerakoan, tamaina handiko energia errorea agertzen da. Energiaren errore erlatiboaren eboluzioa 5.1.(a) irudian erakutsi dugu. Integrazioaren lehen urratsaren iterazioak aztertzen badugu,

$$\|\Delta^{[1]}\| > \|\Delta^{[2]}\| \dots > \|\Delta^{[12]}\| = 3.91 \times 10^{-14} \leq \|\Delta^{[13]}\| = 4.35 \times 10^{-14}$$

13.iterazioan geratuko dela konprobatuko dugu. Baino iterazioekin jarraituko bagenu $\|\Delta^{[13]}\| > \|\Delta^{[14]}\| > \|\Delta^{[15]}\| > \|\Delta^{[16]}\| = 0$ gertatzen da, beraz goizegi geratu dela esan daiteke.

Hairer-en geratze irizpidea aztertu ondoren bi ondorio atera daitezke. Alde batetik, izan bedi

$$\Delta_j^{[k]}, \text{ non } \Delta^{[k]} = (\Delta_1^{[k]}, \dots, \Delta_{sd}^{[k]}) \in \mathbb{F}^{sd} \quad (1 \leq j \leq sd),$$

ezin daiteke suposatu $\{\Delta_j^{[0]}, \Delta_j^{[1]}, \dots, \Delta_j^{[k]}\}$ segida beherakorra denik. Bigarrenik, $\|\Delta^{[k]}\| \geq \|\Delta^{[k-1]}\|$ baldintzak, biribiltze errorea nagusia dela adierazten duen arren, gerta daiteke $\exists j \in \{1, \dots, sd\}$ osagairen batentzat $|\Delta_j^{[k]}| < |\Delta_j^{[k-1]}|$ izatea. Hau da, osagai horrek hobetzeko tartea izango luke eta horregatik, iterazio gehiago eman beharko genitzuk.

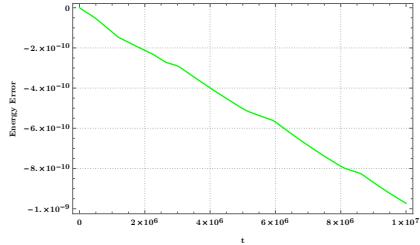
Arazo hauei aurre egiteko, geratze irizpide berri bat proposatu dugu. Iterazioak geratzea, $\Delta^{[k]} = 0$ denean edo bi aldiz honako baldintza betetzen denean:

$$\forall j \in \{1, \dots, sd\}, \quad \min \left(\{|\Delta_j^{[1]}|, \dots, |\Delta_j^{[k-1]}|\} / \{0\} \right) \leq |\Delta_j^{[k]}|. \quad (5.15)$$

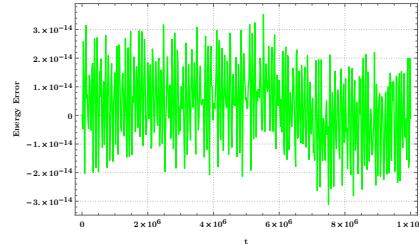
K baldin bada, $k = K-1$ eta $k = K$ balioetarako (5.15) baldintza betetzen ez duen lehen zenbaki oso positiboa, orduan $y_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ era honetan kalkulatuko dugu,

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s L_{n,i}^{[K]}.$$

Hairer-ek eguzki-sistemaren kanpo-planeten problemaren integrazioa, $h = 1000/3$ eguneko urrats luzerarekin errepikatu dugu eta geratze irizpide berriarekin, energia errorearen eboluzioa zuzena dela ikus daiteke (5.1.(b) Irudia).



(a) Hairen geratze irizpidea



(b) Geratze irizpidea berria

5.1. Irudia: Energia errore erlatiboaren eboluzioa, $h = 1000/3$ urrats luzerarekin eguzki-sistemaren kanpo-planeten problemaren integratziorako [55]. (a) Hairen geratze irizpidea, (b) Geratze irizpide berria

Tolerantzi testa.

Urrats gehienetan, puntu-finkoaren iterazioak $\forall j$, $\Delta_j^{[K]} = 0$ bete delako geratuko dira. Gainontzeko urrats gutxi horietan, zeinetan $\exists j$, $\Delta_j^{[K]} \neq 0$ izanik iterazioa geratu den, orduan urratsa onargarria den ala ez erabaki behar dugu. Iterazioa, biribiltze errorearen eraginez edo h urrats luzera behar bezain txikia aukeratu ez delako, gera daiteke.

Puntu-finkoaren iterazioak amaitzerakoan, erabiltzaileak definitutako tolerantzia lortu den ala ez aztertuko dugu. Horretarako, iterazioaren azken bi hurbilpenak konparatuko ditugu. Honako notazioaren laguntzarekin,

$$Y_i = Y_i^{[k]}, \quad \tilde{Y}_i = Y_i^{[k-1]}, \quad i = 1, \dots, s,$$

erabiltzaileak finkatutako tolerantzia erlatiboa eta tolerantzia absolutuaren parametroen arabera $(rtol_i, atol_i, i = 1, \dots, d)$, *distantzia normalizatua* definituko dugu,

$$\max_{i=1,\dots,d} \frac{\max_{j=1,\dots,s} |Y_j^i - \tilde{Y}_j^i|}{\left(((\max_{j=1,\dots,s} |Y_j^i| + \max_{j=1,\dots,s} |\tilde{Y}_j^i|)/2) rtol_i + atol_i \right)}.$$

Distantzi normalizatua > 1 bada, orduan ez da lortu tolerantzia eta integrazioa amaituko dugu. Azpimarratu behar da, tolerantzia ez dugula erabiliko puntu-finkoaren iterazioa geratzeko, behin iterazioa geratu denean, urratsa onargarria den ala ez erabakitzeko baizik.

Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak.

4.4. ataleko koma higikorreko aritmetikaren azalpenetan, batuketa nahiz biderketa eragiketen biribiltze errore zehatzta, modu errazean kalkula daitekeela ikusi dugu. Eragiketa hauen biribiltze erroreak, ondorengo konputazioetan erabiliko ditugu, soluzioaren doitasuna hobetzeko.

Batugai askoren baturen konputazioen doitasuna hobetzeko teknikari *batura konpentsatua* esaten zaio (10 algoritmoa) eta zenbakizko integracioetan erabili ohi da. Atal honetan, batetik IRK metodoetan batura konpentsatuaren aplikazio estandarra hobetzeko proposamena azalduko dugu. Beste aldetik, IRK metodoaren biribiltze errorearen beste jatorri nagusiak (biderketa eta batuketa bat) modu finagoan kalkulatzeko proposamena egingo dugu.

Batura konpentsatua.

Integracioaren zenbakizko soluzioa, $y_n \approx y(t_n) \in \mathbb{R}^d$, $n = 1, 2, \dots$, bi bektoreen batura gisa, $\tilde{y}_n + e_n \in \mathbb{F}^d$ lortuko dugu. Hasierako balioa $y_0 \in \mathbb{R}^d$, $\tilde{y}_0 + e_0$ batura moduan adieraziko dugu, non $\tilde{y}_0 = fl(y_0)$ eta $e_0 = fl(y_n - \tilde{y}_0)$ diren.

IRK metodoaren ekuazioetan, implizituki definitutako $Y_{n,i}$ atalen balioak askatzeko, \tilde{y}_n balioa erabili beharrean, $(\tilde{y}_n \oplus e_n)$ espresioa erabiltzea proposatu dugu,

$$L_{n,i}^{[k]} = hb_i f(Y_{n,i}^{[k-1]}), \quad Y_{n,i}^{[k]} = \tilde{y}_n \oplus (e_n \oplus \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k]}). \quad (5.16)$$

Aldaketa honekin, lortutako zenbakizko soluzioaren doitasuna, batura konpentsatu estandarrarekin baino zerbait hobea izatea espero dugu.

Urratsaren konputazioa.

$\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1} \in \mathbb{F}^d$, non $\tilde{y}_{n+1} + e_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ den, era honetan kalkulatuko dugu:

1. Biderketaren biribiltze errorea.

$hb_i f(Y_{n,i})$ biderketaren biribiltze errorea kalkulatu eta e_n gaiari gehituko diogu. Biderketaren biribiltze errorea jasotzea, FMA eragiketan oinarritutako teknika (12 algoritmoa) aplikatuko dugu.

$$\begin{aligned} E_{n,i} &= hb_i f(Y_{n,i}^{[K-1]}) - L_{n,i}^{[K]}, \quad i = 1, \dots, s, \\ \delta_n &= e_n + \sum_{j=1}^s E_{n,j}. \end{aligned}$$

2. Batura konpentsatua.

Azkenik, batura konpentsatua (4.1) aplikatuko dugu,

$$(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[K]}, \dots, L_{n,s}^{[K]}). \quad (5.17)$$

Function BaturaKonpentsatua ($\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[K]}, \dots, L_{n,s}^{[K]}$)

```

 $s_0 = \tilde{y}_n$ 
 $ee = \delta_n$ 
for  $i \leftarrow 1$  to ( $s$ ) do
     $s_1 = s_0$ 
     $inc = L_{n,i}^{[K]} + ee$ 
     $s_0 = s_1 + inc$ 
     $ee = (s_1 - s_0) + inc$ 
end
 $\tilde{y}_{n+1} = s_0$ 
 $e_{n+1} = ee$ 
return ( $\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}$ )

```

Algoritmoa 16: BaturaKonpentsatua, $S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[K]}, \dots, L_{n,s}^{[K]})$ funtziaren implementazioa da

Biribiltze errorearen estimazioa.

Zenbakizko soluzioaren $\tilde{y}_n + e_n \approx y(t_n)$ $n = 1, 2, \dots$, biribiltze errorearen estimazioa, doitasun txikiagoko bigarren zenbakizko integrazio baten soluzioaren $\hat{y}_n + \hat{e}_n \approx y(t_n)$ differentzia gisa kalkulatu dugu.

$r \geq 0$ zenbaki osoa, eta $x \in \mathbb{F}$ (m -biteko doitasuneko koma-higikorreko zenbakia) izanik, honako funtzioa definitu dugu,

Function flr (x, r)

```

 $res = (2^r x + x) - 2^r x$ 
return res

```

Algoritmoa 17: flr

Funtzio honek, $(m - r)$ -biteko doitasuneko koma-higikorreko zenbakia itzultzen du, edo beste modu batera esanda, $x \in \mathbb{F}$, m -biteko koma-higikorreko zenbakiaren azken r bitak zeroan jartzen dituen funtzioa da.

Bigarren zenbakizko soluzioa, $(\hat{y}_n + \hat{e}_n)$, funtzio horretan oinarrituz, $r < m$ finkatu eta soluzioaren bigarren hurbilketa honela lor daiteke:

$$(\hat{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\hat{y}_n, \hat{\delta}_n, flr(L_{n,1}^{[K]}, r), \dots, flr(L_{n,s}^{[K]}, r)).$$

Zenbakizko integrazioaren biribiltze errorearen estimazioa, soluzio nagusiaren ($y_n + e_n$) eta r balio txiki baterako (esaterako $r = 3$) kalkulatutako bigarren

zenbakizko soluzioaren $(\hat{y}_n + \hat{e}_n)$ arteko diferentziaren norma bezala kalkulatuko dugu.

$$\text{estimazioa}_n = \|(y_n + e_n) - (\hat{y}_n + \hat{e}_n)\|_2. \quad (5.18)$$

Biribiltze errorearen estimazioa lortzeko, bi integrazioak sekuentzialki eta konputazio kostu txikiarekin kalkula daitezke. Urrats bakoitzean, bi integrazioen $Y_{n,i}, \hat{Y}_{n,i}$ ($i = 1, \dots, s$) ataletako balioak, biribiltze errorearen estimazioa handiegia ez den artean, antzekoak mantentzen dira. Ondorioz, lehen integrazioaren bukaerako $Y_{n,i}^{[k]}$ ($i = 1, \dots, s$) atalen balioak, bigarren integrazioaren $\hat{Y}_{n,i}^{[0]}$ ($i = 1, \dots, s$) atalen hasieraketarako erabiltzen baditugu, bigarren integrazioak, iterazio kopuru txikia beharko du (ikus 18 algoritmoa).

```

for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $Y_n^{[0]} = G(Y_{n-1}, h);$ 
    ... lehen integrazioa ...;
     $(y_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow BaturaKonpentsatua(y_n, \delta_n, L_n^{[K]});$ 
    if ( $initwithfirst$ ) then
         $\hat{Y}_n^{[0]} = Y_n^{[k]} + (\hat{y}_n - y_n);$ 
    else
         $\hat{Y}_n^{[0]} = G(\hat{Y}_{n-1}, h);$ 
    end
    ... bigarren integrazioa ...;
     $(\hat{y}_{n+1}, \hat{e}_{n+1}) \leftarrow BaturaKonpentsatua(\hat{y}_n, \hat{\delta}_n, flr(\hat{L}_n^{[K]}, r));$ 
     $estimation_{n+1} = \|(y_{n+1} + e_{n+1}) - (\hat{y}_{n+1} - \hat{e}_{n+1})\|_2;$ 
end
```

Algoritmoa 18: RKG2: errore estimazioa

$G()$ interpolazio funtzioa da eta $initwithfirst$ aldagaiak egiazko balioa izango duen, integrazioen arteko diferentzia txikia den artean.

Algoritmoa.

Azkenik, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazio berriari dagoion algoritmoa laburtuko dugu ([19](#) algoritmoa).

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $k = 0;$ 
    Hasieratu  $Y_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
    while (not konbergentzia) do
         $k = k + 1;$ 
         $F_{n,i}^{[k]} = f(Y_{n,i}^{[k-1]})$ ;
         $L_{n,i}^{[k]} = h b_i F_{n,i}^{[k]}$ ;
         $Y_{n,i}^{[k]} = \tilde{y}_n + (e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k]})$ ;
        konbergentzia  $\leftarrow$  GeratzeIrizpidea( $Y^{[k]}$ ,  $Y^{[k-1]}$ ,  $\Delta_{min}$ );
    end
    if ( $\exists j$  non  $\Delta_j^{[K]} \neq 0$ ) then
        if ( $NormalizeDistance(Y^{[k]}, Y^{[k-1]}) > 1$ ) then
            fail convergence;
        end
    end
     $E_{n,i} = h b_i f_{n,i}^{[k]} - L_{n,i}^{[k]}$ ;
     $\delta_n = e_n + \sum_{i=1}^s E_{n,i}$ ;
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpentsatua( $\tilde{y}_n, \delta_n, L_n^{[k]}$ );
end
```

Algoritmoa 19: IRK (puntu-finkoaren iterazio).

Zenbakizko soluzioa.

Integrazio tartea $[t_0, t_{end}]$ eta urrats tamaina h bada, emandako urrats kopurua $N = (t_{end} - t_0)/h$ izango da. Bestalde, urrats bakoitzaren ondoren, erabiltzaileak definitutako funtzio bati deitzeko aukera ere eskaintzen du kodeak, baina ohikoa den bezala, m urratsero, hau da, $t_i = t_0 + i * (m \cdot h)$, $i = 1, \dots, N/m$ uneetan zenbakizko soluzioa fitxategi bitar batean idazten duen funtzioa ere erabil dezake.

Erabiltzaileak, bi integrazio mota exekutatu ditzake:

1. Integrazio arrunta.

Zenbakizko integrazio bakarra konputatzen da eta zenbakizko soluzioa (y_i, e_i) fitxategi batean itzultzen dugu. Fitxategiaren lerro bakoitzaren egitura ho-

nakoa da:

$$(t_i, y_i, e_i) \text{ non } t_i \in \mathbb{R} \text{ eta } y_i, e_i \in \mathbb{R}^d.$$

$$y_i = (q_i, p_i) \text{ eta } e_i = (eq_i, ep_i).$$

non

$$(q_i + eq_i, p_i + ep_i) \approx (q(t_i), p(t_i)), \quad i = 1, \dots, N/m.$$

2. Integrazioa errore estimazioarekin.

Integrazioaren zenbakizko soluzioa (y_i, e_i) eta errorearen estimaziona (est_i) fitxategi batean itzultzen ditugu. Lerro bakoitzaren egitura honakoa da,

$$(t_i, y_i, e_i, est_i) \text{ non } t_i \in \mathbb{R} \text{ eta } y_i, e_i, est_i \in \mathbb{R}^d.$$

$$y_i = (q_i, p_i), \quad e_i = (eq_i, ep_i) \text{ eta } est_i = (estq_i, estp_i).$$

5.4. Zenbakizko esperimentuak.

Atal honetan, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako 6 ataletako Gauss metodoaren implementazioarekin egindako zenbakizko esperimentuak azalduko ditugu. Esperimentu hauen konputaziorako, 64-biteko doitasuneko IEEE koma-higikorreko aritmetika erabili dugu.

Problemak.

Bi Hamiltondar sistema konsideratuko ditugu: pendulu bikoitz arruntaren eta kanpo-planeten problemak [54] [31]. Integrazio guztietañ h urrats luzera, truncatze errorea biribiltze errorea baino txikiago izan dadin aukeratu dugu.

Pendulu bikoitz arrunta

Pendulu bikoitz arruntaren Hamiltondarra eta parametroak, 3.2. atalean definitu ditugu. Sistema Hamiltondar honetarako, hasierako bi balio konsideratu ditugu: hurrenez hurren, izaera ez-kaotikoa (NCDP) eta kaotikoa (CDP) duten mugimenduak eragiten dituztenak. Bi problema hauek (NCDP eta CDP) energia errorearen eboluzioaren eta biribiltze errorearen estimazioaren azterketa egiteko erabiliko ditugu. Energia errorearen jatorria aztertzeko integracio luzerako ordea, problema ez-kaotikoa (NCDP) bakarrik erabiliko dugu.

Kanpo-planeten problema

Eguzki-sistemaren kanpo-planeten eredu Newtoniarra, 3.4. atalean azaldu dugu. Hamiltondar sistema banagarria da,

$$H(q, p) = T(p) + Uq,$$

eta ezaguna da, puntu-finkoaren bertsio partizionatua (4), puntu-finkoaren iterazio estandarra baino eraginkorragoa dela [102]. Dena den, zenbakizko esperimentuetarako, Hairer-en [55] lanean bezala, puntu-finkoaren bertsio estandarraren emaitzak erakutsi ditugu. Puntu-finkoaren bertsio partizionatua aplikatu dugunean, antzeko emaitzak lortu ditugu baina urrats bakoitzean iterazio kopuru gutxiago behar izan ditu.

Energia errorearen jatorria.

Doitasun bikoitzeko IRK metodo simplektikoaren implementazioaren zenbakizko soluzioaren $\tilde{y}_n + e_n \approx y(t_n)$ ($n = 1, 2, \dots$) errorea, jatorri ezberdineko erroreen konbinazioa da:

1. Trunkatze errorea: hasierako baliodun problemaren $y(t_n)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) soluzio zehatza, (5.9)-(5.10) metodoa aplikatuz (b_i, μ_{ij} koefiziente zehatzekin) lortutako y_n zenbakizko soluzioa ordezkatzerakoan eragindako errorea da.
2. Iterazio errorea: praktikan, puntu-finkoaren (15 algoritmoa) K iterazio finitu aplikatzen dira, eta (5.9) sistemaren $L_{n,i}, Y_{n,i}$ ($i = 1, \dots, s$) soluzioa, $L_{n,i}^{[K]}, Y_{n,i}^{[K]}$ hurbilpenarekin ordezkatzen da. Hurbilpen honen araberako \bar{y}_{n+1} zenbakizko soluzioa kalkulatzen da,

$$\bar{y}_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s L_{n,i}^{[K]}.$$

3. Funtzio zehatza $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, doitasun bikoitzeko bertsioaz $\tilde{f} : \mathbb{F}^d \rightarrow \mathbb{F}^d$ ordezkatzerakoan sortutako errorea. Ordezkapen honek, bi eragin ditu: batetik, urrats gehienetan K iterazio finituetan puntu-finkora iritsiko gara, zeinak ekidin ezineko iterazio errorea sortuko duen; bestetik, \tilde{f} funtzioaren konputazioan sortutako biribiltze erroreak.
4. IRK metodoaren koefiziente zehatzak $b_i, \mu_{ij} \in \mathbb{R}$, dagozkien doitasun bikoitzeko koefizienteez $\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ ordezkatzeagatik eragindako errorea.
5. Algoritmoaren implementazioaren eragiketa aritmetikoak (\tilde{f} funtzioaren ebaluazioan egindakoaz gain), doitasun bikoitzean kalkulatzeagatik eragindako errorea.

Errore jatorri hauek energian duten eragina estimatzeko, honako algoritmoak implementatu ditugu:

A. Implementazio zehatza.

Trunkatze errorea estimatzeko, konputazio guztiak (ekuazio diferentzialaren funtziaren ebaluazioa barne) doitasun laukoitzeko (128-bit) koma higikorreko aritmetikan kalkulatzen dituen implementazioa aplikatuko dugu.

B. Implementazio superideala.

Zenbakizko integracio hau, iterazio errorea estimatzeko erabiliko dugu. Konputazio guztia doitasun laukoitzean egindako implementazioa da baina geratze irizpidea, doitasun bikoitzean neurtuko dugu,

$$\Delta^{[k]} = |\text{double}(Y^{[k]}) - \text{double}(Y^{[k-1]})|.$$

C. Implementazio ideala.

Ekuazio diferenzialaren eskuin aldeko funtzioren ebaluazioa izan ezik, beste eragiketa guztiak doitasun laukoitzean kalkulatzen dituen implementazioa da. Ekuazio diferenziala doitasun bikoitzean kalkulatzeak eragiten duen errorea neurtzeko erabiliko dugu eta integracio hau, hobetu ezin daitekeen zenbakizko integraciōtza hartuko dugu.

D. Implementazio sasi-idealak.

Doitasun bikoitzeko koefizienteak ($\tilde{\mu}_{ij}, \tilde{b}_i \in \mathbb{F}$) erabiltzeak, eragiten duen errorea neurtzeko integracioa da. Konputazio guzta doitasun laukoitzean kalkulatzen da baina doitasun bikoitzeko koefizienteen balioak erabiliz (hauei doitasun bikoitzeko koeficiente koadrifikatuak esaten diegu).

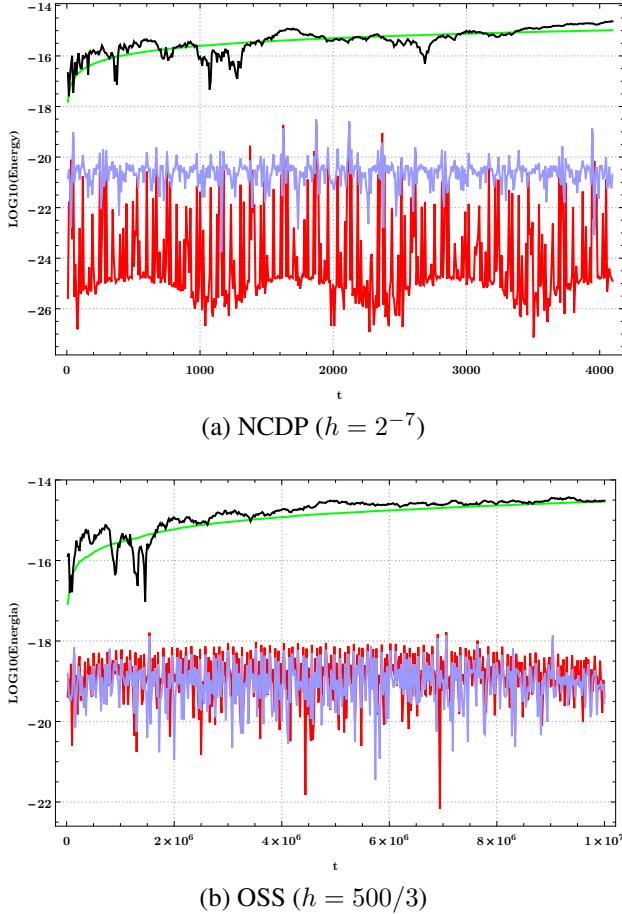
Lau implementazioetan oinarrituz, bi problemen zenbakizko soluzioei dagoien energia-errorearen eboluzioa [5.2.](#) irudian erakutsi dugu. Hainbat ondorio atera daitezke. Aukeratutako h urrats luzerarentzat, trunkatze errorea biribiltze errorearen azpitik dagoela baiezttatu dugu. Metodoaren doitasun bikoitzeko koefizienteak ($\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$) erabiltzeak, ez du eraginik biribiltze errorearen garapenean. Iterazio errorea, biribiltze errorearen oso antzoko da, eta energia errorearen drift lineala eragitea espero daiteke.

Errore azterketa estatistikoa.

Biribiltze erroreak eragiten duen zenbakizko erroreen azterketa fidagarriagoa egiteko, analisi estatistikoa aplikatu dugu (Hairer-en [\[55\]](#) lanean bezala). Problema bakoitzarentzat, hasierako balioaren osagai bakoitza ausaz perturbatutako ($\mathcal{O}(10^{-6})$ tamainako errore erlatiboarekin) $P = 1000$ integracio exekutatu ditugu eta emaitza hauen guztien batezbestekoan oinarritu gara, biribiltze errorearen azterketa zehatzagoa egiteko.

Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako 6-ataletako Gauss kolokazio metodoaren hiru implementazio konparatu ditugu:

1. Implementazio idealak: ekuazio diferenzialaren eskuin aldeko funtzioren ebaluazioa izan ezik, beste eragiketa guztiak doitasun laukoitzean (128-bit) kalkulatzen dituen implementazioa da. Implementazio hau FPIEA (fixed point iteration with exact arithmetic) izendatuko dugu.
2. Doitasun bikoitzeko gure implementazioa berria. Implementazioa hau, DP izendatu dugu.
3. Hairer-ek proposatutako implementazioa [\[55\]](#). Zenbakizko esperimentuera rako, Hairer-en IRK metodoaren [Fortran kodea](#) exekutatu dugu.



5.2. Irudia: A-implementazioak trunkatze errorea estimatzen du (gorriz), B-implementazioarekin iterazio errorearen estimazioa lortzen du (berdez), C-implementazioak \tilde{f} funtzioa doitasun bikoitzean ebaluatzeak eragiten duen errorea (beltzez) eta azkenik, D-implementazioak erakusten du metodoaren koefizienteak $\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij}$ doitasun bikoitzean adierazteak eragindako errorea (urdinez). Goiko irudia, pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikoari dagokio eta behekoa, kanpo-planeten problemari

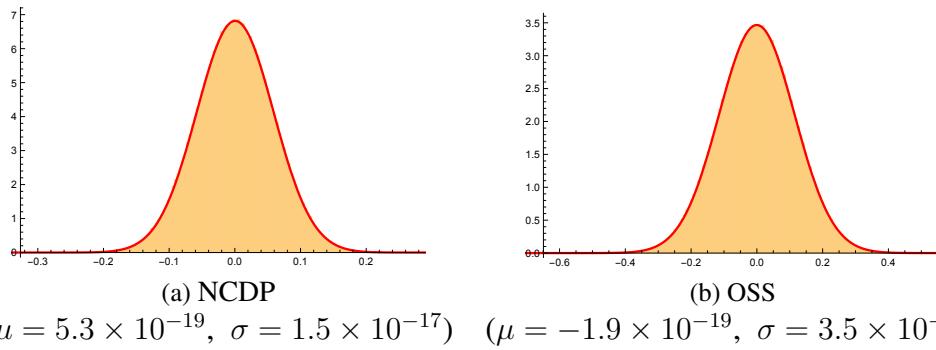
Batetik, DP implementazioaren biribiltze errorearen garapena, FPIEA implementazioaren (aritmetika zehatza) errorearekiko kualitatiboki antzekoa dela eta magnitudean gertu dagoela ziurtatu nahi dugu. Bestalde, DP implementazioa, Hairer-en implementazioarekin konparatu nahi dugu.

Aipatutako hiru implementazioetarako, 5.1. taulan iterazioetan puntu-finkoa lortu den urratsen portzentaia eta urratsetan egin den iterazio kopuruaren batez-bestekoa erakutsi dugu. Hairer-en implementazioarekin baino gehiagotan lortu da puntu-finkoa, hori geratze irizpidearen ondorioa da.

5.1. Taula: Puntu-finkoa lortu den urratsen portzentaia eta iterazio batezbestekoak, pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikorako (NCDP), pendulu bikoitzaren problema kaotikorako (CDP), eta kanpo-planeten problemarako (OSS). Zutabetan, hiru implementazio konparatu ditugu: FPIEA (ideala), DP (doitasun bikoitza) eta Hairer-en kodea.

	FPIEA		DP		Hairer	
	%	#	%	#	%	#
NCDP	98.7	9.5	98.8	8.6	98.5	8.6
CDP	98.9	9.5	98.9	8.6	98.4	8.6
OSS	97.4	15.2	97.4	14.2	87.5	14.1

Energia differentzieng banaketa.



5.3. Irudia: DP implementazioarekin lortutako KP energia differentzieng histogramak, eta $N(\mu, \sigma)$ banaketa normala, pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikoarentzat (NCDP) eta kanpo-planeten problemarentzat (OSS). Ardatz horizontala 10^{15} balioarekin biderkatu dugu eta ardatz bertikalak, maiztasuna adierazten du

Integratzailearen implementazioa ona bada, biribiltze erroreak eragindako energiareng errore lokala $H(y_n) - H(y_{n-1})$, ausazkoa izatea espero da. Hortaz, zenbakizko soluzioa m urratsero jasotzen dugula jakinik, energia differentzia $H(y_{km}) - H(y_{km-m})$ ausazkoa izatea espero da, μ batezbesteko ($\mu = 0$ idealki) eta σ desbideratzea duen banaketa Gausiararekin. Ondorioz, metatutako energia differentziak,

$$H(y_{km}) - H(y_0),$$

$t_{mk} = t_0 + kmh$ uneetarako, $k^{1/2}\sigma = (t_{mk}/(mh))^{1/2}\sigma$ desbideratze estandarra duen ausazko ibilbide Gaussiar bat (*random walk*) jarraituko du. Honi, konputazio zientzian [49] Brouwer legea deritzote, Brouwer-ek [18] Kepler problemarentzat egin zuen zenbakizko integrazioaren birbiltze errorearen azterketa gogoratzu.

Ideia hau jarraituz, doitasun bikoitzeko (DP) implementazioan, m urrats arteko energiarenei differentziari,

$$\frac{H(y_{km}) - H(y_{km-m})}{H(y_0)},$$

banaketa Gaussiarra dagokion aztertuko dugu.

Integrazio tartea $[t_0, t_{end}]$ eta P perturbatutako hasierako balioen kopurua bada, KP energia differentzienei balio ditugu, non $K = (t_{end} - t_0)/(mh)$ den. DP implementazioarekin lortutako KP energia differentzienei histograma eta $N(\mu, \sigma)$ banaketa normala irudikatu ditugu (non μ eta σ , balioei dagokien batezbestekoa eta desbideratze tipikoak diren). [5.3.](#) irudian, pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikoari (NCDP) dagokion histograma, eta kanpo-planeten problemari (OSS) dagokion histograma, $N(\mu, \sigma)$ banaketa normalari oso ondo egokitzen zaizkiola ikus daiteke.

Energia errorearen batezbestekoaren eta desbideratze estandarraren eboluzioa

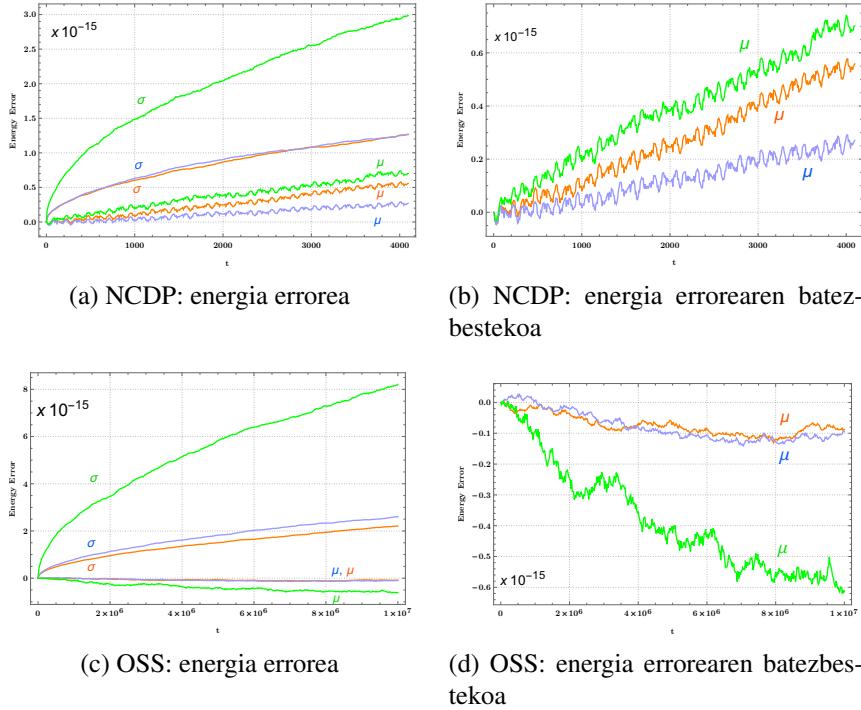
[5.4.](#) irudian, FPIEA, DP eta Hairer-en implementazioetarako, NCDP eta OSS problemen integrazioen energia errorearen batezbestekoa eta desbideratze estandarra irudikatu ditugu.

FPIEA, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazio optimoeña kontsideratu daiteke, f ebaluatzea, dagokion doitasun bikoitzeko \tilde{f} funtzioa aplikatuko dugula suposatzen badugu. Esperimentu hauetan, FPIEA implementazioaren geratze irizpidea DP implementazioarena baino gogorragoa erabili dugu: iterazioa geratu dugu $\Delta^{[k]} = 0$ delako edo ([5.15](#)) baldintza hamar iterazio jarraietan bete delako. Era honetan, puntu-finkoa lortu ez den urratsetarako, iterazio errorea ekiditen saiatu gara.

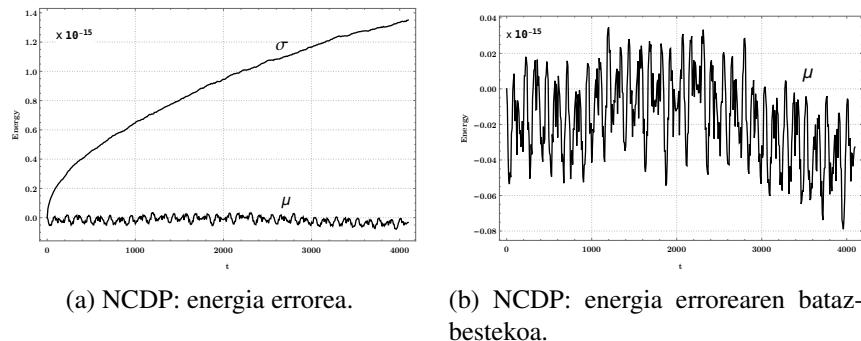
[5.4.](#) irudiko zenbakizko esperimentuetan, DP implementazioaren energia errorearen batezbestekoaren eta desbideratze tipikoaren eboluzioa ia optimoa da (FPIEA implementazioarekiko gertu).

Sinistuta gaude, ekinde ezina dela puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodoen implementazioan, energia errorearen batezbestekoan drift txiki bat, NCDP probleman gertatzen denaren antzera. [5.2.](#) irudian iterazio errorea eta biribiltze errorea oso antzekoak zirela ikusi dugu, horrek eragin dezake integrazioa aurreratu ahala energia errorea handitzen joatea. Beraz, bi grafikoak konsistenteak dira.

Energia drift-a, ez da IRK metodo simplektikoen berezko arazoa. [5.5.](#) irudian, Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioarekin NCDP problemaren aurreko esperimentua errepikatu dugu eta energia errorearen batezbestekoaren eboluzioan ez da drift linealik agertzen.

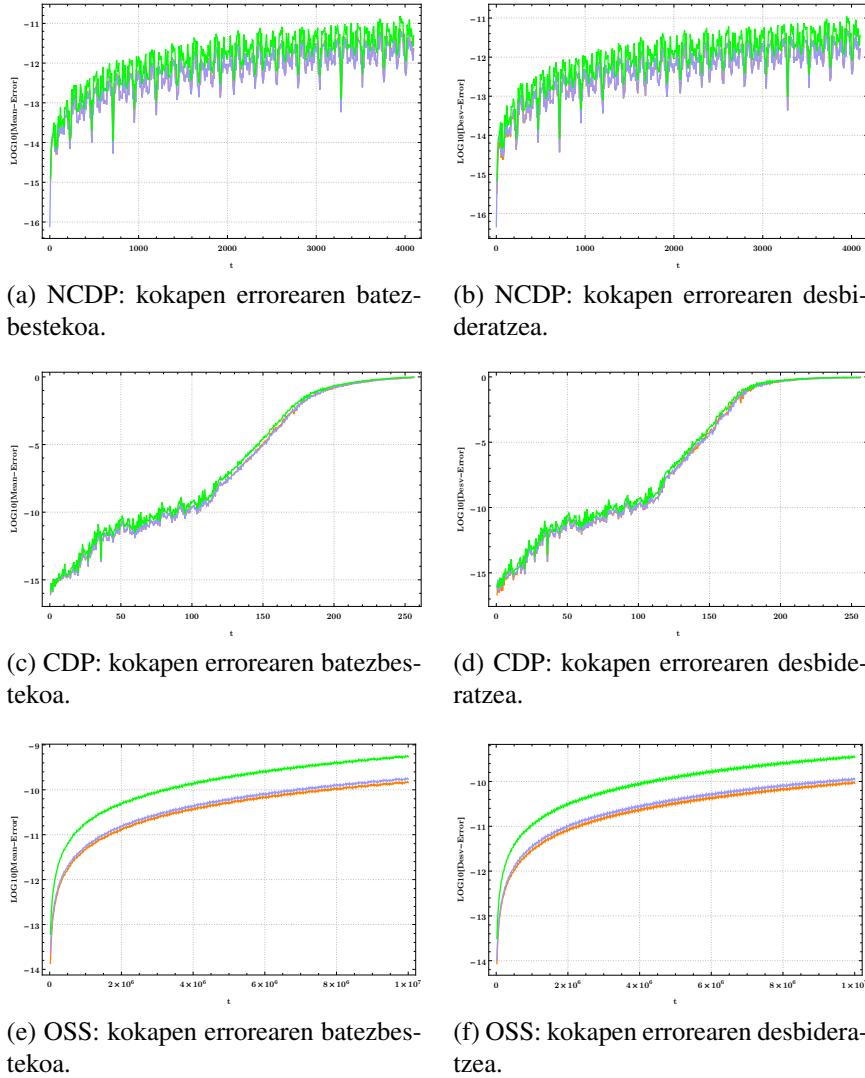


5.4. Irudia: Energia errorearen batezbestekoa (μ) eta desbideratze estandarra (σ) (ezkerrean) eta energia errorearen batezbestekoaren zehaztapena (eskuinean), DP implementazioarentzat (urdinez), FPIEA implementazioarentzat (laranjaz), eta Hairer-en implementazioarentzat (berdez). Pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikoa (a,b) eta kanpo-planeten problema (c,d)



5.5. Irudia: Energia errorearen batezbestekoa (μ) eta desbideratze estandarra (σ), Newton simplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioa aplikatuta

Zenbakizko esperimentuen atala amaitzeko, [5.6.](#) irudian, FPIEA, DP eta Hairer-en implementazioen integrazioen kokapen errorearen eboluzioa (batezbestekoa eta desbideratze estandarra) erakutsi ditugu. Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako gure implementazioa, implementazio optimoarengandik oso gertu dagoenaren ideia indartu egiten dute.



5.6. Irudia: Kokapen errorearen batezbestekoa (ezkerrean) eta desbideratze estandarra (eskuinean), DP implementazioarentzat (urdinez), FPIEA implementazioarentzat (laranjaz) eta Hairer-en implementazioarentzat (berdez): NCDP (a,b), CDP (c,d) eta OSS (e,f)

Biribiltze errorearen estimazioa

5.3. atalean azaldu dugun teknikak, biribiltze errorearen estimazioa ondo egiten duela erakusteko hainbat proba egin ditugu. Hiru problemak hartu ditugu kontutan, hau da, NCDP, CPP eta OSS problemen integrazioak egin ditugu, $r = 3$ aukeratu dugu eta hasierako balioekin DP implementazioa erabiliz integratu ditugu hiru problemak. 5.7. irudiko ezker aldean, integrazio bakoitzari dagozkion kokapen erroreak eta teknika berriarekin estimatutako erroreak konpara daitezke. Emaitza hauek, proposatutako biribiltze errorearen estimazioa kalkulatzeko teknikaren erabilgarritasuna erakusten dutela uste dugu.

Bestalde, hasierako balioen, 1000 perturbazioekin ere integratu ditugu 3 problemak eta integrazio bakoitzean lortutako errore estimazioen batezbestekoak eta erroreen batezbestekoak erakusten dituzte eskuin aldeko grafikoek.

5.5. Laburpena.

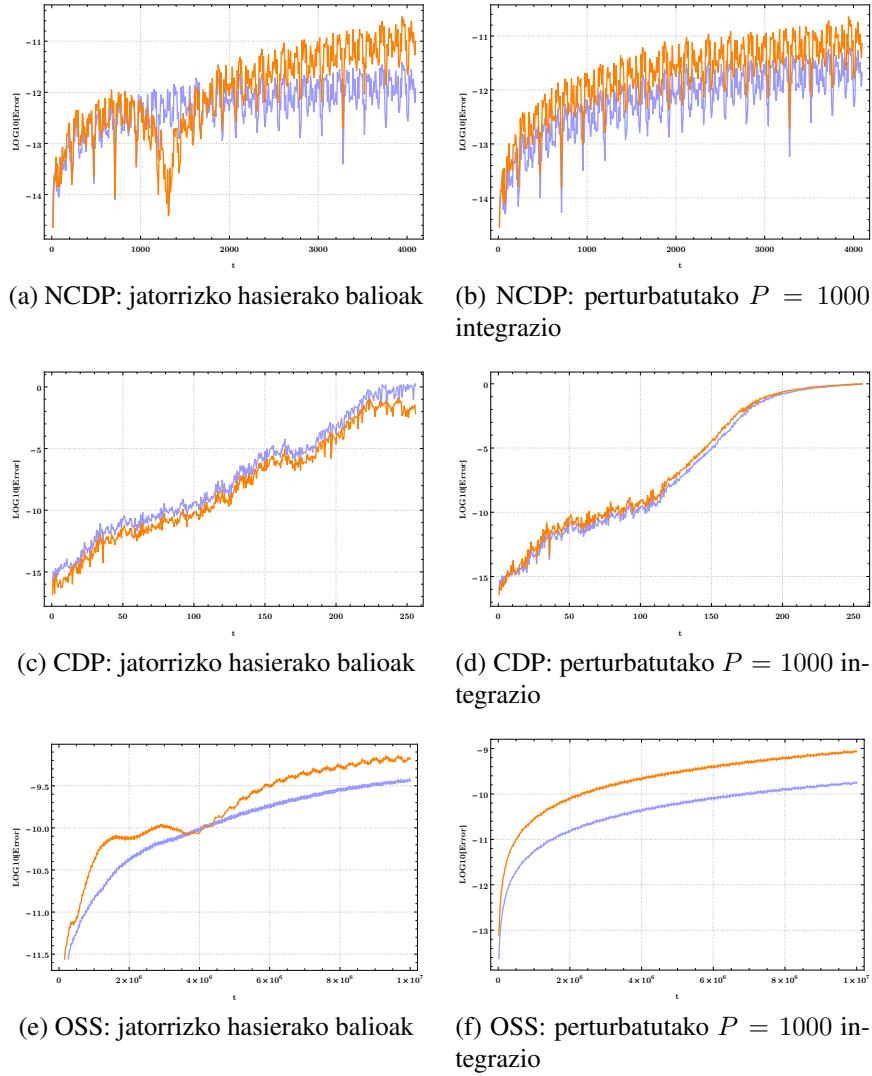
Runge-Kutta metodo implizituak (adibidez, Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoak) Hamiltondar sistemek doitasun altuko integrazioetarako aproposak dira. Problema ez-zurruntarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioa, Newton metodoaren iterazioan oinarritutako implementazioak baino eraginkorragoa da.

Implementazio berri honetan, biribiltze errorearen eragina txikitzen ahalegin berezia egin dugu eta gainera, biribiltze errorearen estimazioa kalkulatzeko aukera eman dugu. Gure implementazioak sortzen duen biribiltze errorearen eboluzioaren estimazioa lor daiteke, eta puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazio optimoaren, antzeko eboluzioa du. Eta zentzu honetan, gure implementazio ia optimoa da. Zenbakizko esperimentuek hala baieztago dute.

Implementazioaren gakoetako bat, puntu-finkoaren iterazioaren geratze irizpide berria da. Geratze irizpidea, beste eremu batzuetan ere aplikagarria izan daitekeela pentsatzen dugu.

Bestalde, puntu-finkoaren iterazioaren implementazioaren zenbakizko esperimentu batzuetan, energia errorearen drift lineal txiki bat, ekidin ezinezkoa, agertu zaigu. Energia errorearen drift-a gainditzea garrantzitsua denenerako, Newtonen iterazioan oinarritutako implementazioa beharrezkoa izango da.

Azkenik, aipatu nahi dugu, atal honen edukiak [Numerical Algorithms](#) aldizkarrian publikatu direla [7] eta implementazioaren kodea, helbide honetan <https://github.com/mikelehu/IRK-FixedPoint> eskuragarri jarri dugula.



5.7. Irudia: Kokapen errorea (urdinez) eta kokapen errorearen estimazioa (laranjaz). Ezkerrean, perturbatu gabeko hasierako balioen integrazioak eta eskuinean, hasierako balioen perturbatutako $P = 1000$ integrazioen batezbestekoak

6. Kapitulua

IRK: Newtonen Iterazioa.

6.1. Sarrera.

Atal honetan, Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoen implementazio eraginkorra ikertuko dugu. Problema zurruna denean, puntu-finkoaren iterazioa ez da eraginkorra eta Newtonen iterazioa aplikatu behar da. Gainera problema ez-zurruna izanik ere, Newtonen iterazioak interesgarriak izan daitezke; bereziki doitasun altuko (doitasun laukoitzta) konputazioetan iterazio metodoaren konbergentzia ezaugarri onak direla-eta.

Ikusiko dugunez, d -dimentsioko ekuazio diferenzialen sistema, Newtonen iterazioan oinarritutako s -ataletako IRK metodoaren bidez integratzeko, era honetako ekuazio-sistema lineala askatu behar da

$$(I_d \otimes I_s - h A \otimes J) \in \mathbb{R}^{sd \times sd}, \quad (6.1)$$

non $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ Runge-Kutta metodoaren koefizienteen den eta J matrizea, ataletan ebaluatutako matrize Jacobiarraren hurbilpen komuna den. Integrazioaren urrats bakoitzean, $sd \times sd$ tamainako ekuazio-sistema lineala askatu behar da.

Hainbat lanetan [22, 85, 15], (6.1) matrizearen egitura berezia aprobetxatuz, ekuazio-sistema linealak modu eraginkorrean ebatzeko proposamena egin zuen. Zehazki, ia blokeka diagonala den (6.1) matrizearen antzekoa era honetako $I_d - h\lambda_j J \in \mathbb{R}^{d \times d}$ ($j = 1, \dots, s$) s -bloke duen matrizea, bloke bat A matrizearen λ_j balio propio bakoitzeko. Normalean, ordena altuko IRK metodoaren koefizienteen A matrizeak, $[s/2]$ balio propio konplexu pare ditu (s bakoitia denean, balio propio erreal bat gehituta).

Gure ekarpenean, sd -dimentsioko (6.1) ekuazio-sistema, $(s+1)d$ dimentsioko sistema gisa berridatziko dugu, eta $d \times d$ tamainako $[s/2] + 1$ matrizeren LU deskonposaketa (eta tamaina bereko matrize batzuen biderketa) kalkulatuz, askatuko dugu. Tamaina txikiko matrizeen LU deskonposaketa azkarra denez, konputazio-nalki eraginkorra izatea espero dugu. Implementazioa, IRK metodo simetriko eta

simplektikoetarako garatu dugu. Dena den, bai IRK metodo ez-simetriko simplektikoetarako, bai IRK metodo simetriko ez-simplektikoetarako garatu daiteke.

Newtonen iterazio metodoaren bidez, $u \in \mathbb{R}^n$ eta $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ emanik, $F(u) = 0$ betetzen duen $u^{[*]}$ soluzioa aurkitu nahi dugu. Hasierako soluzioaren $u^{[0]}$ estimazioa emanik, Newtonen iterazio sinplifikatuaren definizioa 20 algoritmoan ikus daiteke.

```

Hasieratu  $u^{[0]}$  (64-bit);
 $M = LU(J)$  (32-bit);
for ( $k=1,2,\dots$  konbergentzia lortu arte) do
     $F^{[k]} = F(u^{[k-1]})$  (64-bit);
    Askatu  $M \Delta u^{[k]} = -F^{[k]}$  (32-bit);
     $u^{[k]} = u^{[k-1]} + \Delta u^{[k]}$  (64-bit);
end
```

Algoritmoa 20: Newton sinplifikatua.

non $J \approx J(u^{[k]}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matrize Jacobiarraren hurbilpena den,

$$J(u^{[k]}) = (J_{ij}(u^{[k]}))_{i,j}^n \text{ non } J_{ij}(u^{[k]}) = \partial F_i / \partial u_j(u^{[k]}), \quad 1 \leq i, j \leq n.$$

Newton metodoaren eragiketa konplexuenak doitasun txikiagoan kalkula daitezke [9] eta honek, konputazionalki abantaila interesgarria suposatzen du. 20 algoritmoaren eskuin aldean, implementazioak erabilitako doitasuna 64-biteko dela suposatuz, eragiketa bakoitzarentzat zein doitasun erabili beharko litzatekeen adierazi dugu; Jacobiarraren balioztapena eta aljebra linealeko eragiketak, doitasun arruntean (32-bit) kalkulatu daitezke. Horrela konputazio denbora azkartuko litzateke.

Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoen azterketa, era honetan egituratu dugu. Lehenengo, (6.2.) atalean, Newtonen iterazio estandarraren azalpenak eman ditugu eta notazioa finkatu dugu. (6.3.) atalean, Newtonen iterazioen ekuazio-sistema modu eraginkorrean askatzeko teknika deskribatu dugu. Hurrengo, (6.4.)-(6.5.) ataletan, Runge-Kutta metodoen formulazio berriarekin aplikatzeko zehaztasunak eman ditugu. (6.6.) atalean, Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazio berria aurkeztu dugu. Azkenik, (6.7.) atalean, implementazio berriarekin egindako zenbakizko esperimentuen emaitzak eman ditugu.

6.2. IRK-Newton estandarra.

Demagun honako hasierako baliodun problema,

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \tag{6.2}$$

non $y_0 \in \mathbb{R}^d$ eta $f : \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{R}^d$ diren.

Denbora diskretizazioa $t_0 < t_1 < t_2 < \dots$ emanik, (6.2) hasierako baliodun problemaren $y(t)$ soluzioaren $y_n \approx y(t_n)$, ($n = 1, 2, \dots$) zenbakizko soluzioa, integrazio metodo bat aplikatuz lortuko dugu:

$$y_{n+1} = \Phi(y_n, t_n, t_{n+1} - t_n), \quad (6.3)$$

non $\Phi : \mathbb{R}^{d+2} \rightarrow \mathbb{R}$ den.

S-ataletako IRK metodoaren kasuan, a_{ij} , b_i , eta c_i ($1 \leq i, j \leq s$) koefizienteek definitzen dute Φ integrazio metodoa,

$$\Phi(y, t, h) = y + h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, Y_i) , \quad (6.4)$$

non $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$ izan ohi den eta Y_i atalak era honetan implizituki definitzen diren,

$$Y_i = y + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_j) \quad i = 1, \dots, s. \quad (6.5)$$

(6.4) kalkulatu ahal izateko, $Y_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, s$ ezezagunak lortu behar ditugu. Bakotza d dimentsiokoa denez, sd tamainako ekuazio-sistema ez linea- la adierazten du (6.5) ekuazioak eta sistema hori askatzeko metodo iteratiboak erabil ditzakegu. Iterazio metodo simpleena, puntu-finkoaren iterazioa da. Problema zurruna denean, puntu-finkoaren iterazioa ez da egokia eta orduan, Newtonen iterazioa aplikatu beharra dago. Problema ez-zurruna izanik ere, Newtonen iterazioak interesgarriak izan daitezke; bereziki doitasun altuko (doitasun laukoitza) konputazioetan, doitasun ezberdinak nahasten [9] dituen teknikari esker (algebra lienaleko eragiketak eta Jacobiarraren balioztapena doitasun txikiagoan kalkula- tzea baitago).

Edozein kasutan, Newtonen iterazio bakotzean, Jacobiarraren s balioztapen eta $sd \times sd$ neurriko matrizearen LU deskonposaketa kalkulatu behar direnez, aldaera konputazionalki merkeagoak aplikatzen dira.

Newton iterazioa.

Newtonen iterazioan, (6.5) ekuazio implizituko Y_i ($i = 1, \dots, s$) atalentzako $Y_i^{[k]}$ $k = 1, 2, \dots$ hurbilpenak kalkulatzeko algoritmoa, modu honetan defini daiteke,

$$1) \quad r_i^{[k]} := -Y_i^{[k-1]} + y + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_j^{[k-1]}), \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.6)$$

$$2) \quad \text{Askatu } \Delta Y_i^{[k]},$$

$$\Delta Y_i^{[k]} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} J_j^{[k]} \Delta Y_j^{[k]} = r_i^{[k]} \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.7)$$

$$\text{non } J_i^{[k]} = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, Y_i^{[k-1]}) \quad i = 1, \dots, s,$$

$$3) \quad Y_i^{[k]} := Y_i^{[k-1]} + \Delta Y_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.8)$$

Iterazio bakoitzeko, $J_i^{[k]}$ Jacobiarren s ebaluazio eta $sd \times sd$ tamainako ekuazio-sistemaren LU deskonposaketa kalkulatu behar dugu. Eragiketa hauek konplexuak dira eta horregatik, Newton osoaren implementazioa, konputazionalki garestia da. Aukera eraginkorragoen artean, bi aipatuko ditugu:

1. Newton simplifikatuaren iterazioak aplikatzea. Aukera honetan, (6.7) ekuazioaren $J_i^{[k]}$ Jacobiar matrizeak, $J_i^{[0]} = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, Y_i^{[0]})$ matrizeekin ordezkatuko ditugu. Urrats bakoitzean, LU deskonposaketa behin bakarrik kalkulatu behar dugu.

$$\Delta Y_i^{[k]} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} J_j^{[0]} \Delta Y_j^{[k]} = r_i^{[k]} \quad i = 1, \dots, s.$$

Problema zurruna denean, atalen hasieraketa $Y_i = y_n$, $i = 1, \dots, s$ erabili ohi da, eta orduan, $J_i^{[0]} = J := \frac{\partial f}{\partial y}(y)$, $i = 1, \dots, s$ ordezkatuko dugu eta ekuazio-sistema lineala era honetan simplifikatzen zaigu,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y^{[k]} = r^{[k]}.$$

2. Jatorrizko Newtonen iterazioaren (6.7) ekuazio-sistema, matrize honen,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \quad (6.9)$$

alderantzizkoarekin aurre-baldintzatuta, [98] iterazio metodo baten bidez ebattea. Praktikan, (6.7) ekuazio-sistemaren soluzioaren hurbilpen bat lortuko dugu, eta metodo hauek, Sasi-Newton (inexact Newton) izenarekin ezagutzen dira.

Aurreko bi aukeretan, era honetako ekuazio-sistemak askatu behar ditugu,

$$(I_d \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r \quad (6.10)$$

non $r \in R^{sd}$ den. Ekuazio-sistema $sd \times sd$ tamainako matrize osoaren LU deskonposaketa eginez ebatzi daiteke baina modu eraginkorragoan egiteko bideak aztertuko ditugu.

Modu estandarrean [22, 85, 15], A matrizearen diagonalizazioa egiten da $\Lambda = S^{-1}AS = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ eta ondorioz,

$$I_s \otimes I_d - h \Lambda \otimes J = (S^{-1} \otimes I_d) (I_s \otimes I_d - h A \otimes J) (S \otimes I_d).$$

Beraz, ezker aldeko matrizearen LU deskonposaketa kalkulatuko da. Teknika honetan, A matrizearen balio propio erreal (edo balio propio konplexu) bakoitzari dagokion $d \times d$ matrize errealen (edo konplexuen) LU deskonposaketak kalkulatu behar dira.

Beste autore batzuk [19, 65], (6.9) ekuazio-sistema askatzeko, honako alde-rantzizko matrizea proposatzen dute:

$$I_d \otimes I_s - h \bar{A} \otimes J, \quad (6.11)$$

non $\bar{A} \in R^{s \times s}$ (LU deskonposaketa modu eraginkorragoan askatzeko aukeratua) aurre-baldintzatuta ebaaztea proposatzen dute.

Newton simplifikatuaren iterazioa.

Newton simplifikatuaren iterazioan, $J_i^{[k]}$ Jacobiarak, $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y(t + c_i h, Y_i^{[0]})$ $i = 1, \dots, s$ Jacobiarrez ordezkatzen dira eta orduan, askatu beharreko ekuazio-sistema honakoa da,

$$\Delta Y_i^{[k]} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} J_j^{[0]} \Delta Y_j^{[k]} = r_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.12)$$

non $J_i^{[0]} = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, Y_i^{[0]}), \quad i = 1, \dots, s$ den.

Lehen simplifikazio honetan, integrazioaren urrats bakoitzeko, $J_i^{[0]}$ Jacobiarren s-ebaluazio eta $sd \times sd$ tamainako matrizearen LU deskonposaketa behin bakarrik kalkulatu behar dugu. Modu baliokidean, ekuazio lineala notazio matriziala erabiliz laburtu daiteke,

$$\left(I_s \otimes I_d - h \begin{bmatrix} a_{11} J_1^{[0]} & \dots & a_{1s} J_s^{[0]} \\ a_{21} J_1^{[0]} & \dots & a_{2s} J_s^{[0]} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} J_1^{[0]} & \dots & a_{ss} J_s^{[0]} \end{bmatrix} \right) \Delta Y^{[k]} = r^{[k]}.$$

non,

$$Y^{[k]} = \begin{bmatrix} Y_1^{[k]} \\ \vdots \\ Y_s^{[k]} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{sd}, \quad r^{[k]} = \begin{bmatrix} r_1^{[k]} \\ \vdots \\ r_s^{[k]} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{sd}.$$

Newton super-simplifikatuaren iterazioa.

Bigarren simplifikazio bat aplika daiteke, $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y (t + c_i h, Y_i^{[0]})$, $i = 1, \dots, s$ matrizeak, $J_i^{[0]} \approx J$ hurbilpen bakarrarekin ordezkatzuz. Era honetako ekuazio-sistema lortuko dugu,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y^{[k]} = r^{[k]}. \quad (6.13)$$

non I_s, I_d identitateak eta $A = (a_{ij})_{i,j}^s$ koefizienteen matrizeak diren.

Nahiz eta, $Y_i^{[0]} = y_n$ ($i = 1, \dots, s$) ez den beste hasieraketa bat aplikatu, askotan gertatzen da (6.12) sistema lineala, (6.13) sistemarekin ordezkatza. Aukera egokia da [115], $J = \frac{\partial f}{\partial y}(t + \bar{c} h, \bar{y})$ aplikatzea, non $\bar{c} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s c_i$ (metodo simetrikoetan $\bar{c} = \frac{1}{2}$ da) eta $\bar{y} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s Y_i^{[0]}$ den. Maiz, $\partial f / \partial y$ konputazionalki merkeagoa den hurbilketa batez ordezkatza, nahikoa izango da.

Newtonen iterazioaren bertsio honi super-simplifikatua deitu diogu. Iterazio bakoitzean f funtzioaren s ebaluazio eta sd dimentsioko ekuazio-sistema lineala askatu behar da. $(I_s \otimes I_d - h A \otimes J)$ matriza iterazio guztiarako berdina da, bere LU deskonposaketa behin bakarrik egin behar da baina konputazionalki garestia da [22, 52]. Hau da aljebra linealari dagokion eragiketen konplexutasuna,

$$\begin{aligned} &\text{LU deskonposaketa, } 2s^3d^3/3 + \mathcal{O}(d^2), \\ &\text{Back substitution, } 2s^2d^2 + \mathcal{O}(d). \end{aligned}$$

Jarraian, Newton super-simplifikatuaren implementazioaren algoritmo orokorra laburtu dugu (21 algoritmoa).

Algoritmoa.

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $k = 0;$ 
    Hasieratu  $Y_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
     $J = \frac{\partial f}{\partial y}(t + h/2, y_n);$ 
     $M = LU(I_s \otimes I_d - h A \otimes J);$ 
    while (not konbergentzia) do
         $k = k + 1;$ 
         $r_i^{[k]} = -Y_{n,i}^{[k-1]} + y_n + (e_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_{n,j}^{[k-1]}));$ 
        Askatu ( $M \Delta Y_n^{[k]} = r^{[k]}$ );
         $Y_n^{[k]} = Y_n^{[k-1]} + \Delta Y_n^{[k]};$ 
        konbergentzia  $\leftarrow$  GeratzeErizpidea( $Y_n^{[k]}$ ,  $Y_n^{[k-1]}$ ,  $\Delta_{min}$ );
    end
    if ( $\exists j$  non  $\Delta_j^{[K]} \neq 0$ ) then
        if ( $NormalizeDistance(Y_n^{[k]}, Y_n^{[k-1]}) > 1$ ) then
            fail convergence;
        end
    end
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpentsatua( $y_n, e_n, Y_n^{[k]}$ );
end

```

Algoritmoa 21: IRK (Newton super-simplifikatua).

6.3. IRK-Newton eraginkorra.

Ekuazio-sistema.

Atal honetan, honako ekuazio-sistema lineala modu eraginkorrean askatzeko implementazioa proposatuko dugu,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r, \quad (6.14)$$

non $J \in \mathbb{R}^{d \times d}$ eta $r \in \mathbb{R}^{sd}$ diren.

S -ataletako IRK metodoa, Newton iterazioaren bidez d -dimentsioko ekuazio diferentzialen sistemari aplikatzeko, urrats bakoitzean $sd \times sd$ tamainako hainbat ekuazio-sistema (iterazio bakoitzeko bat) askatu behar dira. Atal honetan, jatorrizko sd -dimentsioko ekuazio-sistema, $(s+1)d$ dimentsioko ekuazio-sistema balio-kide moduan berridatziko dugu. Ekuazio-sistema baliokide hau, $d \times d$ tamainako

$[s/2]+1$ matrize errealen LU deskonposaketa bidez askatuko dugu. Tamaina txiki-ko matrizeen LU deskonposaketa azkarra denez, konputazionalki eraginkorragoa izatea espero dugu.

Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoak, simplektikoak eta simetrikoak [102] dira.

1. Simplektikoa.

Runge-Kutta metodoa simplektikoa izateko baldintza,

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (6.15)$$

2. Simetrikoa.

Runge-Kutta metodoa simetrikoa izateko baldintza,

$$\begin{aligned} b_{s+1-i} &= b_i, \quad c_{s+1-i} = 1 - c_i, \quad 1 \leq i, j \leq s, \\ b_j &= a_{s+1-i, s+1-j} + a_{i,j}, \quad 1 \leq i, j \leq s. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Implementazio eraginkorra garatzeko, goiko bi propietate hauetan oinarritu gara. S-ataletako IRK metodoaren (6.4) formulazioa, modu baliokide honetan berridatzi daiteke,

$$\Phi(y, t, h) := y + z, \quad (6.17)$$

non $Y_i \in \mathbb{R}^d$ atalak eta $z \in \mathbb{R}^d$ gehikuntza, implizituki era honetan definitzen diren,

$$Y_i = y + \frac{z}{2} + h \sum_{j=1}^s \bar{a}_{ij} f(t + c_j h, Y_j) \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.18)$$

$$z = h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, Y_i), \quad (6.19)$$

non

$$\bar{a}_{ij} = a_{ij} - \frac{b_j}{2}, \quad 1 \leq i, j \leq s \text{ den.} \quad (6.20)$$

Ekuazio implizitua ebatzeko Newtonen iterazio simplifikatua aplikatzen badugu, $(s+1) \times d$ dimentsioko ekuazio-sistema askatu behar dugu,

$$\begin{aligned} (I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) \Delta Y - \frac{1}{2} (e_s \otimes I_d) \Delta z &= r, \\ (-h e_s^T B \otimes J) \Delta Y + \Delta z &= 0, \end{aligned} \quad (6.21)$$

non $e_s = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$, eta $\bar{A} = (\bar{a}_{ij})_{i,j=1}^s$ den. $(\Delta Y, \Delta z)$ (6.21) ekuazio-sistemaren soluzioa bada, orduan ΔY gure jatorrizko (6.14) ekuazio-sistemaren soluzioa da.

Ekuazio-sistemaren adierazpen matriziala lagungarria izan daiteke,

$$\begin{bmatrix} -I_d/2 & & & \\ -I_d/2 & \ddots & & \\ & \vdots & \ddots & \\ I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J & & & -I_d/2 \\ -hb_1 J & -hb_2 J & \cdots & -hb_s J & I_d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta Y_1 \\ \Delta Y_2 \\ \vdots \\ \Delta Y_s \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_s \\ 0 \end{bmatrix}$$

Aldi berean, koefiziente notazio berri hau finkatuta,

$$\bar{c}_i = c_i - \frac{1}{2}, \quad \bar{a}_{ij} = a_{ij} - \frac{b_j}{2}, \quad 1 \leq i, j \leq s,$$

dagokion propietate simplektikoa (6.15) eta simetrikoa (6.16) berridatziko ditugu,

1. Simplektikoa.

Runge-Kutta metodoa simplektikoa da,

$$(B\bar{A}) \text{ antisimetrikoa bada,} \quad (6.22)$$

non $\bar{A} = (\bar{a}_{ij})_{i,j=1}^s$ eta $B, (b_1, b_2, \dots, b_s)$ balioen matrize diagonala diren.

2. Simetrikoa.

Runge-Kutta metodoa simetrikoa izango da, koefizienteek baldintza hauek betetzen dituztenean,

$$\begin{aligned} b_{s+1-i} &= b_i, & \bar{c}_{s+1-i} &= -\bar{c}_i, & 1 \leq i \leq s, \\ \bar{a}_{s+1-i, s+1-j} &= -\bar{a}_{ij}, & 1 \leq i, j \leq s. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Implementazio berrian, matrizeen dimentsioak zehazteko, parametro berri hauetan oinarrituko gara, $m = [(s+1)/2]$, eta $s-m = [s/2]$. Metodoaren s -atalen kopurua bikoiti ala bakoiti izan, bi kasu bereiziko ditugu:

- s bikoitia (Adibidea $s = 6 \rightarrow m = 3, s - m = 3$).
- s bakoitia (Adibidea $s = 7 \rightarrow m = 4, s - m = 3$).

IRK metodo simplektikoen garapena.

Lehenengo, IRK metodo simplektikoak konsideratuko ditugu. ($B\bar{A}$) antisimetrikoa bada, orduan $B^{1/2}\bar{A}B^{-1/2}$ antisimetrikoa da. Hori dela-eta, \bar{A} diagonalizagaria da eta balio propio irudikari puruak ditu. Beraz, Q , $s \times s$ tamainako matrize ortogonala existitzen da,

$$Q^{-1}\bar{A}Q = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

non D , balio erreal positiboen matrize diagonala eta $m \times (s-m)$ tamainakoa den. (6.21) ekuazio-sistemari, aldagai aldaketa hau aplikatzuz,

$$\Delta Y = (Q \otimes I_d) W,$$

honako ekuazio-sistema baliokidea lortuko dugu (garapenean (6.24) erabili dugu),

$$\begin{pmatrix} I_m \otimes I_d & -h D \otimes J \\ h D^T \otimes J & I_{s-m} \otimes I_d \end{pmatrix} W - \frac{1}{2} (Q^{-1} e_s \otimes I_d) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r, \quad (6.25)$$

$$-h (e_s^T B Q \otimes J) W + \Delta z = 0,$$

(B.3.) eranskinean, ekuazio baliokideak lortzeko eman diren urratsen zehaztapenak eman ditugu.

(6.25) sistemaren bloke bakanen egiturari esker, LU deskonposaketaren konputazioa, $d \times d$ tamainako matrizeen biderkaduren eta $[s/2] + 1$ matrize errealeen ($d \times d$) LU deskonposaketen bidez kalkulatuko dugu:

1. $I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2 \in \mathbb{R}^{d \times d}$, $i = 1, \dots, [s/2]$ matrizeen LU deskonposaketa, non $\sigma_1, \dots, \sigma_{[s/2]} \geq 0$, D matrizearen diagonaleko balioak diren.
2. Aurreko matrizeen espresiotik, lortutako $d \times d$ dimentsioko matrizearen LU deskonposaketa.

IRK metodo simetriko simplektikoen garapena.

Atal honetan, (6.15) propietate simplektikoaz gain, (6.16) simetria propietatea ere betetzen duten IRK metodoak konsideratuko ditugu. Lehenengo, garapenean era-biliko ditugun matrize laguntzaileak definituko ditugu.

1. P matrizea.

Kontsideratu $P = (P_1 \ P_2) \in \mathbb{R}^{s \times s}$ matrize ortogonala, non $P_1 \in \mathbb{R}^{s \times m}$ eta $P_2 \in \mathbb{R}^{s \times (s-m)}$ diren. Era horretan definituko dugu, $x = (x_1, \dots, x_s)^T \in \mathbb{R}^s$, $P_1^T x = (y_1, \dots, y_m)^T$, eta $P_2^T x = (y_{m+1}, \dots, y_s)^T$ non,

$$\begin{aligned} y_i &= \frac{\sqrt{2}}{2}(x_{s+1-i} + x_i), \quad i = 1, \dots, [s/2], \\ y_i &= \frac{\sqrt{2}}{2}(x_{s+1-i} - x_i), \quad i = m+1, \dots, s, \\ y_m &= x_m, \quad s \text{ bakoitia bada.} \end{aligned}$$

2. K matrizea.

Batetik, (6.23) simetria propietateak, $P_i^T B^{\frac{1}{2}} \bar{A} B^{-\frac{1}{2}} P_i = 0$, $i = 1, 2$ dela eta bestetik, propietate simplektikoak $B^{1/2} \bar{A} B^{-1/2}$ antisimetriko dela ziuratzzen dutenez, \bar{A} matriza honako matrizearen antzekoa dela ondorioztatu daiteke,

$$P^T B^{\frac{1}{2}} \bar{A} B^{-\frac{1}{2}} P = \begin{pmatrix} 0 & K \\ -K^T & 0 \end{pmatrix} \quad (6.26)$$

non $K = P_1^T B^{\frac{1}{2}} \bar{A} B^{-\frac{1}{2}} P_2 \in \mathbb{R}^{m \times (s-m)}$ den.

3. D matrizea.

$K = UDV^T$ balio singularren deskonposaketa izanik, non $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, eta $V \in \mathbb{R}^{(s-m) \times (s-m)}$ matrize ortonormalak diren eta $D \in \mathbb{R}^{m \times (s-m)}$, K matrizearen balio singularren $(\sigma_1, \dots, \sigma_{s-m})$ matrize diagonala den,

$$D = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{s-m} \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{s-m} \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.27)$$

s bakoitia bada, D matriza ezkerrekoa eta s bakoitia bada, D matriza eskuinekoa ($\sigma_m = 0$) da.

4. Q matrizea.

(6.24) simetriko izategatik, berdintza hauek baiezta daitezke,

$$Q = (Q_1 \ Q_2) = B^{-1/2} (P_1 \ P_2) \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} = B^{-1/2} (P_1 U \ P_2 V), \quad (6.28)$$

$$Q^{-1} = Q^T B. \quad (6.29)$$

Matrizearen dimentsioak laburtuz, $Q = (Q_1 \ Q_2) \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $Q_1 \in \mathbb{R}^{s \times m}$ eta $Q_2 \in \mathbb{R}^{s \times (s-m)}$ ditugu.

(6.21) ekuazio-sistemari, aldagai aldaketa hau aplikatuz,

$$\Delta Y = (Q \otimes I_d)W = (Q_1 \otimes I_d)W' + (Q_2 \otimes I_d)W'', \quad (6.30)$$

non $W = \begin{pmatrix} W' \\ W'' \end{pmatrix}$, $W' \in \mathbb{R}^{m \times d}$, $W'' \in \mathbb{R}^{(s-m) \times d}$ diren,

eta metodoa simetrikoa denez, (6.23) baldintzetako lehenagatik, $e_s^T B P_2 = 0$ eta $e_s^T B Q_2 = e_s^T B P_2 V = 0$ berdintasunak aplikatuz, honako ekuazio-sistema baliokidea lortuko dugu,

$$\begin{aligned} W' - h(D \otimes J)W'' - \frac{1}{2}(Q_1^T B e_s \otimes I_d)\Delta z &= (Q_1^T B \otimes I_d)r, \\ h(D^T \otimes J)W' + W'' &= (Q_2^T B \otimes I_d)r, \\ -h(e_s^T B Q_1 \otimes J)W' + \Delta z &= 0. \end{aligned} \quad (6.31)$$

(B.3.) eranskinean, ekuazioak lortzeko urratsen zehaztapenak eman ditugu.

Matrizearen egitura.

Aldagai aldaketarekin lortutako ekuazio-sistema, blokeka diagonala da eta hau aprobetxatzuz, Newton iterazioaren implementazio eraginkorra lortuko dugu. $S = 6$ ataletako IRK metodoari dagokion ekuazio-sistemaren matrizearen egitura beretza hau da.

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} I_d & & & -h\sigma_1 J & & & -\frac{\alpha_1}{2} I_d & & W' & R' \\ & I_d & & & -h\sigma_2 J & & -\frac{\alpha_2}{2} I_d & & W'' & R'' \\ & & I_d & & & -h\sigma_3 J & -\frac{\alpha_3}{2} I_d & & & \\ \hline h\sigma_1 J & & & I_d & & & 0 & & \\ & h\sigma_2 J & & & I_d & & 0 & & \\ & & h\sigma_3 J & & & I_d & 0 & & \\ \hline -h\alpha_1 J & -h\alpha_2 J & -h\alpha_3 J & 0 & 0 & 0 & I_d & & \Delta z & 0 \end{array} \right]$$

non

$$\begin{bmatrix} R' = (Q_1^T B^{1/2} \otimes I_d)r \\ R'' = (Q_2^T B^{1/2} \otimes I_d)r \end{bmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix} = Q_1^T B e_s.$$

Jarraian, ekuazio-sistemaren ezezagunak $(\Delta z, W', W'')$ askatzeko aplikatuko ditugun espresioak laburtuko ditugu.

W'' kalkulatzeko ekuazioak. (6.31) sistemaren bigarren ekuaziotik W'' askatu,

$$W'' = -h (D^T \otimes J) W' + (Q_2^T B \otimes I_d) r. \quad (6.32)$$

W' kalkulatzeko ekuazioak. (6.31) sistemako lehen ekuazioan W'' ordezkatuz, honako ekuazio-sistema lortuko dugu,

$$\begin{aligned} (I_m \otimes I_d + h^2 D D^T \otimes J^2) W' - \frac{1}{2} (Q_1^T B e_s \otimes I_d) \Delta z &= R, \\ -h (e_s^T B Q_1 \otimes J) W' + \Delta z &= 0, \\ \text{non } R &= (Q_1^T B \otimes I_d) r + h (D Q_2^T B \otimes J) r \in \mathbb{R}^{md}. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Goiko ekuazio-sistema honako notazioaren arabera,

$$R = \begin{bmatrix} R_1 \\ \vdots \\ R_m \end{bmatrix}, \quad W' = \begin{bmatrix} W_1 \\ \vdots \\ W_m \end{bmatrix}, \quad R_i, W_i \in \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, m$$

era honetan berridatziko dugu,

$$(I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2) W_i - \frac{\alpha_i}{2} \Delta z = R_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (6.34)$$

$$-h J \sum_{i=1}^m \alpha_i W_i + \Delta z = 0, \quad (6.35)$$

non,

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix} = Q_1^T B e_s,$$

eta $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_{s/2}$, K matrizearen balio singularrak diren; s bakoitia denean $\sigma_m = 0$ dela gogoratu (6.27).

Δz kalkulatzeko ekuazioak. Aurreko (6.34) ekuaziotik, W_i askatuz,

$$W_i = (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} (R_i + \frac{\alpha_i}{2} \Delta z),$$

eta (6.35) ekuazioan ordezkatuz, $\Delta z \in \mathbb{R}^d$ askatzeko ekuazioak lortuko ditugu,

$$M \Delta z = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i, \quad (6.36)$$

non

$$M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} \in \mathbb{R}^{d \times d}. \quad (6.37)$$

Ezezagunak askatzeko laburpena. Sistemaren ezezagunak askatzeko ekuazioak eta ordena laburtuko dugu: lehenengo, $\Delta z \in \mathbb{R}^d$ (6.36) ekuaziotik askatuko dugu; bigarren, $W' \in \mathbb{R}^{md}$ (6.34) ekuaziotik askatuko dugu; hirugarren, $W'' \in \mathbb{R}^{(s-m)d}$ (6.32) ekuaziotik askatuko dugu; eta azkenik, ΔY (6.30) ekuaziotik askatuko dugu.

IRK Newton: konplexutasun analisia.

$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J)\Delta Y = r$ ekuazio sistema modu eraginkorrean askatzeko, implementazio estandarraren eta gure implementazioen konplexutasunak konparatuko ditugu.

Implementazio estandarra.

Butcher edota Hairer-en implementazio estandarraren konputazioa bi modutan egin daiteke:

- Zenbaki konplexuak.

A matrizearen diagonalizazioak balio propio konplexuak ditu,

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \gamma_1 & & & & & \\ & \bar{\gamma}_1 & & & & \\ & & \gamma_2 & & & \\ & & & \bar{\gamma}_2 & & \\ & & & & \gamma_3 & \\ & & & & & \bar{\gamma}_3 \end{bmatrix},$$

eta ekuazio-sistema, zenbaki konplexuen aritmetika erabiliz ebatzi daiteke.

$$\begin{aligned} (I - h\gamma_j J) X &= b, \quad j = 1, \dots, 3, \\ (I - h\bar{\gamma}_j J) X &= \bar{b}. \end{aligned}$$

- Zenbaki errealkak.

Zenbaki konplexuekin ez bada lana egin nahi, zenbaki errealeko deskonposaketa baliokidea,

$$\begin{aligned} \gamma_j &= \alpha_j + i \beta_j, \\ P^{-1}AP &= \begin{bmatrix} \alpha_1 & -\beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2 & -\beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 & \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha_3 & -\beta_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_3 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Hairer-en implementazioan,

- s bikoitia bada $\rightarrow (2d \times 2d)$ tamainako $[s/2]$ LU deskonposaketa.
- s bakoitia bada $\rightarrow (2d \times 2d)$ tamainako $(s+1)/2$ LU deskonposaketa.

Gure implementazio berria.

\bar{A} matrizea, $\bar{A} = P^{-1}DP$ diagonalizatzen dugu eta D matrizeak, irudikari puruak ditu,

$$\bar{A} = Q^{-1}RQ, \quad R = \begin{bmatrix} 0 & -\gamma_1 & & \\ \gamma_1 & 0 & & \\ & & 0 & -\gamma_2 \\ & & \gamma_2 & 0 \\ & & & 0 & -\gamma_3 \\ & & & \gamma_3 & 0 \end{bmatrix}$$

Gure implementazioan,

- s bikoitia bada $\rightarrow (d \times d)$ tamainako $[s/2] + 1$ LU deskonposaketa.
- s bakoitia bada $\rightarrow (d \times d)$ tamainako $(s+1)/2$ LU deskonposaketa.

Konplexutasun konparaketa

Lehenengo eragiketa aljebraikoen konplexutasunak gogoratuko ditugu,

$$\begin{aligned} \text{LU deskonposaketa : } & 2s^3d^3/3 + \mathcal{O}(d^2), \\ \text{Back substitution : } & 2s^2d^2 + \mathcal{O}(d), \\ \text{inv : } & 2s^3d^3 \end{aligned}$$

Bi implementazioen konplexutasunen laburpena [6.1](#). taulan ikus daiteke.

6.4. IRK-Newton estandarra (formulazio berria).

5. atalean IRK puntu-finkoaren implementazioan erabilitako birformulazioa, IRK-Newton implementazioan ere aplikatuko dugu. Horrela, IRK metodoa simplektikoa izatea ziurtatzen dugu. IRK Newtonen iterazioaren implementazioan ordea, L_i ($i = 1, \dots, s$) aldagai ezezagunak eta Y_i ($i = 1, \dots, s$) aldagai laguntzaileak konsideratuko ditugu, biribiltze errorea gutxitzeko helburuarekin [93].

IRK metodoaren formulazio estandarra [\(6.4\)](#), era honetan berridatziko dugu,

$$\Phi(y, t, h) := y + \sum_{i=1}^s L_i, \tag{6.38}$$

6.1. Taula:

s	LU		Back Substitution	
	Estandarra	Berria	Estandarra	Berria
2m	$\frac{8m}{3}d^3$	$\frac{2}{3}(2m+1)d^3$	$4m(2d^2)$	$(6m+4)d^2$
$2m+1$	$\left(\frac{8m}{3} + \frac{2}{3}\right)d^3$	$\left(\frac{4m}{3} + \frac{2}{3}\right)d^3$	$(8m+2)d^2$	$(6m+4)d^2$

non $L_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, s$ implizituki era honetan definitzen diren,

$$L_i = h b_i f(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j), \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.39)$$

eta

$$\mu_{ij} = a_{ij}/b_j, \quad 1 \leq i, j \leq s.$$

Newton sinplifikatuaren iterazioa.

Newtonen iterazioa formulazio berriarekin honakoa izango da; $L_i^{[0]}$ hasieratu eta $k = 1, 2, \dots$ iterazioetarako, $L_i^{[k]}$ hurbilpenak era honetan kalkulatuko ditugu,

- 1) $Y_i^{[k]} := y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, \quad i = 1, \dots, s.$
 $g_i^{[k]} := -L_i^{[k-1]} + h b_i f(t + c_i h, Y_i^{[k]}), \quad i = 1, \dots, s,$
 - 2) Askatu $\Delta L_i^{[k]}$
 $\Delta L_i^{[k]} - h b_i J_i^{[k]} \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s,$
non $J_i^{[k]} = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, Y_i^{[k-1]}), \quad i = 1, \dots, s,$
 - 3) $L^{[k]} := L^{[k-1]} + \Delta L^{[k]}.$
- (6.40)

Newton sinplifikatuaren iterazioan, $J_i^{[k]}$ Jacobiarra $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y(t + c_i h, Y_i^{[0]})$ $i = 1, \dots, s$ Jacobiarraz ordezkatzen da eta askatu beharreko ekuazio-sistema hona-

koa da,

$$\Delta L_i^{[k]} - hb_i J_i^{[0]} \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s.$$

Modu baliokidean, ekuazio lineala notazio matriziala erabiliz laburtu daiteke,

$$\left(I_s \otimes I_d - h \begin{bmatrix} b_1\mu_{11}J_1^{[0]} & \dots & b_1\mu_{1s}J_1^{[0]} \\ b_2\mu_{21}J_2^{[0]} & \dots & b_2\mu_{2s}J_2^{[0]} \\ \dots & \ddots & \dots \\ b_s\mu_{s1}J_s^{[0]} & \dots & b_s\mu_{ss}J_s^{[0]} \end{bmatrix} \right) \Delta L^{[k]} = g^{[k]},$$

non,

$$L^{[k]} = \begin{bmatrix} L_1^{[k]} \\ \vdots \\ L_s^{[k]} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{sd}, \quad g^{[k]} = \begin{bmatrix} g_1^{[k]} \\ \vdots \\ g_s^{[k]} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{sd},$$

Newton super-simplifikatuaren iterazioa.

Honako bigarren simplifikazioarekin, $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y (t + c_i h, Y_i^{[0]})$, $i = 1, \dots, s$ matrizeak, $J_i^{[0]} \approx J$, $i = 0, \dots, s$ hurbilpenaz ordezkatzuz, ekuazio-sistema lineal hau lortuko dugu,

$$(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J) \Delta L = g. \quad (6.41)$$

non I_d, I_s identitate matrizeak eta B , (b_1, b_2, \dots, b_s) koefizienteen matrize diagonala diren.

Algoritmoa.

Formulazio berriari dagokion Newton super-simplifikatuaren implementazioa, (22) algoritmoan laburtu dugu.

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to (endstep − 1) do
     $k = 0;$ 
    Hasieratu  $L_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
     $J = \frac{\partial f}{\partial y}(y_n);$ 
     $M = LU(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J);$ 
    while (not konbergentzia) do
         $k = k + 1;$ 
         $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + (e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k-1]});$ 
         $g_i^{[k]} = -L_{n,i}^{[k-1]} + h b_i f(t + c_i h, Y_{n,i}^{[k]});$ 
        Askatu ( $M \Delta L_n^{[k]} = g^{[k]}$ );
         $L_n^{[k]} = L_n^{[k-1]} + \Delta L_n^{[k]};$ 
        konbergentzia  $\leftarrow$  GeratzeErizpidea( $L_n^{[k]}$ ,  $L_n^{[k-1]}$ ,  $\Delta_{min}$ );
    end
    if ( $\exists j$  non  $\Delta_j^{[K]} \neq 0$ ) then
        if (NormalizeDistance( $Y_n^{[k]}$ ,  $Y_n^{[k-1]}$ ) > 1) then
            | fail convergence;
        end
    end
     $\beta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]};$ 
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpentsatua( $\tilde{y}_n, \beta_n, L_n^{[k-1]}$ );
end

```

Algoritmoa 22: IRK (Newton super-simplifikatua).

Interpolazio koefizienteak. $L_{n,i}^{[0]}$ atalen hasieraketarentzat dagokien koefizienteak era honetan definituko ditugu: IRK puntu-finkoaren implementazioan finkatu genituen (5.13) interpolazio koefizienteetatik abiatuta modu errazean definituko

ditugu formulazio honi dagozkion interpolazio koefizienteak.

$$\begin{cases} Y_{n,i}^{[0]} = y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[0]} \\ Y_{n,i}^{[0]} = y_n + \sum_{j=1}^s \nu_{ij} L_{n-1,j} \end{cases} \Rightarrow L_n^{[0]} = (Mu^{-1}Nu)L_{n-1},$$

$$\Rightarrow (Mu^{-1}Nu)_{i,j}^s = \lambda_{ij}/a_{ij}.$$
(6.42)

Geratze irizpidea. Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioarentzat definitutako geratze irizpide berdina (5.15) erabiliko dugu baina $L_{n,i}$, $i = 1, \dots, s$ aldagaiiei aplikatuta.

$$\Delta^{[k]} = (L_{n,1}^{[k]} - L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k]} - L_{n,s}^{[k-1]}) \in \mathbb{F}^{sd},$$

Honako notazioa finkatuko dugu,

$$\Delta_j^{[k]}, \text{ non } \Delta^{[k]} \in \mathbb{F}^{sd} (1 \leq j \leq sd).$$

Iterazioak $k = 1, 2, \dots$ jarraitzea, $\Delta^{[k]} = 0$ bete arte edo honako baldintza bi iterazio jarraietan bete arte,

$$\forall j \in \{1, \dots, sd\}, \quad \min \left(\{|\Delta_j^{[1]}|, \dots, |\Delta_j^{[k-1]}|\} / \{0\} \right) \leq |\Delta_j^{[k]}|. \quad (6.43)$$

Batura konpentsatua. $\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1} \in \mathbb{F}^d$, non $\tilde{y}_{n+1} + e_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ era honetan kalkulatuko dugu:

1. $\Delta L^{[k]}$ gaiak gehitu.

$$\delta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]}$$

2. Batura konpentsatua.

Azkenik, batura konpentsatua aplikatuko dugu,

$$(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]}) \quad (6.44)$$

Function BaturaKonpentsatua ($y_n, \delta_n, L_n^{[k-1]}$)

```

 $s_0 = y_n$ 
 $ee = \delta_n$ 
for  $i \leftarrow 1$  to ( $s$ ) do
     $s_1 = s_0$ 
     $inc = L_{n,i}^{[k-1]} + ee$ 
     $s_0 = s_1 + inc$ 
     $ee = (s_1 - s_0) + inc$ 
end
 $y_{n+1} = s_0$ 
 $e_{n+1} = ee$ 
return ( $y_{n+1}, e_{n+1}$ )

```

Algoritmoa 23: BaturaKonpentsatua $S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]})$ funtziaren implementazioa da

6.5. IRK-Newton eraginkorra (formulazio berria).

Formulazio berrian, modu eraginkorrean askatu behar dugun ekuazio-lineala honakoa da,

$$(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J) \Delta L = g, \quad (6.45)$$

$J \in \mathbb{R}^{d \times d}$ eta $g \in \mathbb{R}^{s \times d}$ matrizeak izanik.

(6.45) ekuazio-lineala ebazteko, aurreko 6.3. atalean (6.14) moduko sistemak askatzeko deskribatutako teknika egokituko dugu. Jarraian, IRK metodo sime-triko sinplektikoetarako (6.3. atala) garatutako teknika, formulazio berriko (6.45) sistema ebazteko nola aplikatu daitekeen deskribatuko dugu.

Formulazio estandarretik formulazio berrirako urratsa.

Formulazio berriaren implementazio eraginkorra, (6.3. atala) formulazio estanda-rean emandako ekuazioak moldatuz zehaztuko dugu. Aurreko ataleko ekuazioetan, bi formulazioen aldagaien arteko erlazioak ordezkatuz,

$$\Delta Y = \Delta L (B \otimes I_d)^{-1} \quad (6.46)$$

$$r = (B^{-1} \otimes I_d) g, \quad (6.47)$$

formulazio berrirako ekuazio baliokideak lortuko ditugu.

1. Aldagai aldaketa. Formulazio estandarraren (6.30) aldagai aldaketari, (6.46) ekuazioa ordezkatuz,

$$\Delta L = (BQ_1 \otimes I_d) W' + (BQ_2 \otimes I_d) W''. \quad (6.48)$$

2. $R \in \mathbb{R}^{md}$ matrizea. Formulazio estandarreko R matrizearen (6.33) ekua-zioan, (6.47) ekuazioa ordezkatzu,

$$\begin{aligned} R &= (Q_1^T \otimes I_d) g + h (DQ_2^T \otimes J) g, \\ R &= Q_1^T g + h DQ_2^T g J^T. \end{aligned} \quad (6.49)$$

3. $W'' \in \mathbb{R}^{(s-m)d}$ matrizea. Formulazio estandarraren W'' matrizearen (6.32) ekuazioan, (6.47) ekuazioa ordezkatzu,

$$W'' = -h (D^T \otimes J) W' + (Q_2^T \otimes I_d) g. \quad (6.50)$$

Formulazio berrian, IRK Newton simplifikatuaren implementazioaren urratsak hauek dira,

1. LU deskonposaketak.

- (a) $\mathbb{R}^{d \times d}$ matrizeen LU deskonposaketa,

$$I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2, \quad i = 1, \dots, [s/2].$$

- (b) $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$ matriza kalkulatu,

$$M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} \in \mathbb{R}^{d \times d}.$$

- (c) M matrizearen LU deskonposaketa

$$M \Delta z = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i.$$

2. (6.45) ekuazio-sistemaren soluzioa ebatzi.

- $R \in \mathbb{R}^{md}$ kalkulatu,

$$R = (Q_1^T \otimes I_d) g + h (DQ_2^T \otimes J) g.$$

- d kalkulatu,

$$d = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i,$$

- $\Delta z \in \mathbb{R}^d$, ekuazio-sistematik askatu,

$$M \Delta z = d.$$

- $W_1, \dots, W_m \in \mathbb{R}^d$ kalkulatu,

$$(I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2) W_i - \frac{\alpha_i}{2} J \Delta z = R_i, \quad i = 1, \dots, m.$$

- $W'' \in \mathbb{R}^{sd}$ kalkulatu,

$$W'' = (-hD^T) W' J^T + Q_2^T g.$$

- $\Delta L \in \mathbb{R}^{sd}$ kalkulatu,

$$\Delta L = (BQ_1 \otimes I_d) W' + (BQ_2 \otimes I_d) W'',$$

IRK Newton sinplifikatuaren implementazioa, [24](#) algoritmoan laburtu dugu.

```

 $\tilde{y}_0 = fl(y_0);$ 
 $e_0 = fl(y_0 - \tilde{y}_0);$ 
for  $n \leftarrow 0$  to ( $endstep - 1$ ) do
     $k = 0;$ 
    Hasieratu  $L_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
     $J = \frac{\partial f}{\partial y}(y_n);$ 
     $M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1};$ 
    lum =  $LU(M);$ 
    while (not konbergentzia) do
         $k = k + 1;$ 
         $Y_{n,i}^{[k]} = y_n + (e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k-1]});$ 
         $g_i^{[k]} = -L_{n,i}^{[k-1]} + h b_i f(t + c_i h, Y_{n,i}^{[k]});$ 
         $R = Q_1^T g + (h D Q_2^T) g J^T;$ 
         $d = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i;$ 
        Solve(lum  $\Delta z = d$ );
         $W_i = (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} (R_i + \frac{\alpha_i}{2} \Delta z)$ ,  $i = 1, \dots, m$ ;
         $W^{\circ} = (-h D^T) W^{\circ} J^T + Q_2^T g;$ 
         $\Delta L = B Q_1 W^{\circ} + B Q_2 W^{\circ};$ 
         $L_n^{[k]} = L_n^{[k-1]} + \Delta L_n^{[k]};$ 
        konbergentzia  $\leftarrow$  GeratzeErizpidea( $L_n^{[k]}$ ,  $L_n^{[k-1]}$ ,  $\Delta_{min}$ );
    end
    if ( $\exists j$  non  $\Delta_j^{[K]} \neq 0$ ) then
        if ( $NormalizeDistance(Y_n^{[k]}, Y_n^{[k-1]}) > 1$ ) then
            | fail convergence;
        end
    end
     $\delta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]};$ 
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpentsatua( $\tilde{y}_n, \delta_n, L_n^{[k-1]}$ );
end

```

Algoritmoa 24: IRK (NSS-Eraginkorra).

6.6. IRK Newtonen iterazio mistoa.

Sasi-Newton iterazioa.

Newton iterazio bakoitza, (6.40) eskema jarraituz konputatzea da, eta egin beharretako bat ekuazio-sistema askatzea da. IRK metodoaren implementazio berria ekuazio-sistema hori askatzeko metodoa aldatuko dugu, hau da, honako sistema,

$$\Delta L_i^{[k]} - h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.51)$$

non

$$g_i^{[k]} = -L_i^{[k-1]} + h b_i f\left(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}\right), \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.52)$$

eta

$$\Delta L^{[k]} = \begin{pmatrix} \Delta L_1^{[k]} \\ \vdots \\ \Delta L_s^{[k]} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{sd}, \quad g^{[k]} = \begin{pmatrix} g_1^{[k]} \\ \vdots \\ g_s^{[k]} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{sd},$$

zehazki askatu beharrean, modu iteratiboan askatuko dugu. Horretarako, 25 algoritmoa aplikatuko dugu eta $\Delta L^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ soluzioaren $\Delta L_i^{[k,0]}, \Delta L_i^{[k,1]}, \Delta L_i^{[k,2]}, \dots$ hurbilpenak kalkulatuko ditugu.

```

 $\Delta L^{[k,0]} = (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} g^{[k]};$ 
while GeratzeErizpidea ( $fl_{32}(\Delta L^{[k,0]}), \dots, fl_{32}(\Delta L^{[k,l]})$ ) do
    
$$\left| \begin{array}{l} l = l + 1; \\ G_i^{[k,l]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,l-1]} + h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,l-1]}, \quad i = 1, \dots, s; \\ \Delta L^{[k,l]} = \Delta L^{[k,l-1]} + (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,l]}; \end{array} \right.$$

end
```

Algoritmoa 25: Barne iterazioa.

non $fl_{32}(x)$, $x \in \mathbb{R}$ zenbakitik gertuen dagoen 32-biteko IEEE doitasun arrunteko balioa den.

IRK implementazio berri honen 26 algoritmoan, (6.51) ekuazio-sistema linealaren J_i Jacobiar matrizeen ebaluazioak, doitasun arrunta duten Y_i atalekin kalkulatuko ditugu. Beraz, 25 algoritmoaren iterazioen geratze irizpidea, $fl_{32}(\Delta L^{[k,l]}) = fl_{32}(\Delta L^{[k,l-1]})$ doitasun arruntean betetzen dela aztertzea nahiakoa izango dugu.

IRK Newton Mistoia

Zenbakizko soluzioa $y_n \approx y(t_n) \in \mathbb{R}^d$, $n = 1, 2, \dots$, bi bektoreen batura gisa, $\tilde{y}_n + e_n \in \mathbb{F}^d$ lortuko dugu. Hasierako balioa $y_0 \in \mathbb{R}^d$, $\tilde{y}_0 + e_0$ batura moduan adieraziko dugu, non $\tilde{y}_0 = fl(y_0)$ eta $e_0 = fl(y_n - \tilde{y}_0)$ diren.

Zehazki, $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = \tilde{\Phi}(\tilde{y}_n, e_n, t_n, h)$ IRK metodoaren urrats berriaren zenbakizko soluzioa, bost faseetan kalkulatuko dugu:

1. $L^{[0]} = 0 \in \mathbb{R}^{sd}$ atalak hasieratu, eta Newton super-simplifikatuaren iterazioak aplikatu ((6.40) iterazioaren ekuazio-sistema, (6.41) sistemarekin ordezkatuz),

$$L^{[1]} = L^{[0]} + \Delta L^{[1]}, \quad L^{[2]} = L^{[1]} + \Delta L^{[2]}, \dots$$

geratze irizpidean, $\text{fl}_{32}(L^{[k]}) = \text{fl}_{32}(L^{[k-1]})$ bete arte.

2. $L^{[k]}$ berriari dagokion Jacobiarak ebaluatu

$$J_i = \frac{\partial f}{\partial y} \left(t + c_i h, \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]} \right), \quad i = 1, \dots, s.$$

3. Lehen fasean lortutako $\Delta L^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ balioa, (6.51) ekuazio-sistema linealaren $\Delta L^{[k]}$ soluzio zehatzaren $\Delta L^{[k,0]}$ hurbilpena kontsideratu eta 25 algoritmoa aplikatu, $\Delta L^{[k]}$ soluzioaren $\Delta L^{[k,\ell]}$ hurbilpena (gutxienez doitasun arruntarekin) lortzeko.
4. $L^{[k]} = L^{[k-1]} + \Delta L^{[k,\ell]}$, eta $k = k+1$ eguneratu ondoren, Sasi-Newton iterazio bat aplikatuko dugu bigarren urratsean kalkulatutako J_i Jacobiarren balioak erabiliz. Ekuazio-sistema linealaren (6.51)-(6.52), $\Delta L^{[k]}$ soluzioaren $\Delta L^{[k,\ell]}$ hurbilpenak (berriz ere doitasun arruntean) 25 algoritmoa aplikatuz kalkulatuko ditugu.
5. Azkenik, $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = \tilde{\Phi}(\tilde{y}_n, e_n, t_n, h)$ urrats berriaren zenbakizko soluzioa kalkulatuko dugu,

$$\tilde{\Phi}(\tilde{y}_n, e_n, t_n, h) = (\tilde{y}_n + e_n) + \sum_{i=1}^s (L_{n,i}^{[k-1]} + \Delta L_{n,i}^{[k,\ell]}).$$

Horretarako, Kahan-en batura konpentsatua (10 algoritmoa) modu honetan aplikatuko dugu:

- (a) $\Delta L^{[k]}$ gaien batura (magnitude txikiko bektoreen batura).

$$\delta_n := e_n + \sum_{i=1}^s \Delta L_{n,i}^{[k,\ell]}$$

- (b) Batura konpentsatua.

$$(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\tilde{y}, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]}).$$

Implementazio honen hainbat zehaztasun azpimarratuko ditugu:

- Algoritmoaren era honetako sistema linealak ($I_s \otimes I_d - h B A B^{-1} \otimes J$), 7.5.ataleko Newton implementazio eraginkorrarekin ([24 algoritmoa](#)) askatuko ditugu.
- $\mu_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteek, zehazki ([5.8](#)) propietate simplektikoa eta simetria propietatea $\mu_{j,i} = \mu_{s+1-i,s+1-j}$ betetzen dituzte.
- ([6.52](#)) ekuazioaren $g_i^{[k]}$ ($i = 1, \dots, s$) hondarren konputaziorako, $y \in \mathbb{R}^d$ balioaren ordez, $\tilde{y} + e$ ($\tilde{y}, e \in \mathbb{F}^d$) espresioa erabili beharko litzateke. Hala ere, hori horrela egitearen eragina, oso txikia izango litzateke, eta azken Sasi-Newton iterazioan bakarrik (4.fasea) kontutan hartzea erabaki dugu. Gainera, azken Sasi-Newtonen iterazioan, ([6.52](#)) ekuazioan y -ren ordez $\tilde{y} + e$ erabili beharrean, J_i Jacobiarak erabili ditugu honako hurbilketa egiteko:

$$h b_i f \left(t + c_i h, \tilde{y} + e + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]} \right) - L_i^{[k-1]} \approx \\ \left(h b_i f_i^{[k]} - L_i^{[k-1]} \right) + h b_i J_i e,$$

non $f_i^{[k]} = f \left(t + c_i h, \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]} \right)$.

Implementazioaren algoritmo osoa, 26 algoritmoan laburtu dugu.

```

 $L^{[0]} = 0;$ 
 $J = \frac{\partial f}{\partial y}(t + h/2, \tilde{y});$ 
 $M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1};$ 
Compute the LU decomposition of M;
***** 1-Fasea *****/;
k = 0;
while ContFcn( $fl_{32}(L^{[0]}), \dots, fl_{32}(L^{[k]})$ ) do
     $k = k + 1;$ 
     $Y_i^{[k]} = \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $f_i^{[k]} = f(t + c_i h, Y_i^{[k]}), i = 1, \dots, s;$ 
     $g_i^{[k]} = h b_i f_i^{[k]} - L_i^{[k-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k]} = (I_s \otimes I_d - h B A B^{-1} \otimes J)^{-1} g^{[k]};$ 
     $L^{[k]} = L^{[k-1]} + \Delta L^{[k]};$ 
end
***** 2-Fasea *****/;
 $J_i = \frac{\partial f}{\partial y} \left( t + c_i h, \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]} \right), i = 1, \dots, s;$ 
***** 3-Fasea *****/;
 $\ell = 0;$ 
 $\Delta L^{[k,0]} = \Delta L^{[k]};$ 
while ContFcn( $fl_{32}(\Delta L^{[k,0]}), \dots, fl_{32}(\Delta L^{[k,\ell]})$ ) do
     $\ell = \ell + 1;$ 
     $G_i^{[k,\ell]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,\ell-1]} + h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,\ell-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k,\ell]} = \Delta L^{[k,\ell-1]} + (I_s \otimes I_d - h B A B^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,\ell]};$ 
end
 $L^{[k]} = L^{[k-1]} + \Delta L^{[k,\ell]};$ 
***** 4-Fasea *****/;
 $k = k + 1;$ 
 $Y_i^{[k]} = \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
 $f_i^{[k]} = f(t + c_i h, Y_i^{[k]}), i = 1, \dots, s;$ 
 $g_i^{[k]} = (h b_i f_i^{[k]} - L_i^{[k-1]}) + h b_i J_i e, i = 1, \dots, s;$ 
 $\ell = 0;$ 
 $\Delta L^{[k,0]} = (I_s \otimes I_d - h B A B^{-1} \otimes J)^{-1} g^{[k]};$ 
while ContFcn( $fl_{32}(\Delta L^{[k,0]}), \dots, fl_{32}(\Delta L^{[k,\ell]})$ ) do
     $\ell = \ell + 1;$ 
     $G_i^{[k,\ell]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,\ell-1]} + h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,\ell-1]}, i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k,\ell]} = \Delta L^{[k,\ell-1]} + (I_s \otimes I_d - h B A B^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,\ell]};$ 
end
***** 5-Fasea *****/;
 $\delta = e + \sum_{i=1}^s \Delta L_i^{[k,\ell]};$ 
 $(\tilde{y}^*, e^*) = S_{s,d}(\tilde{y}, \delta, L_1^{[k-1]}, \dots, L_s^{[k-1]});$ 

```

6.7. Zenbakizko esperimentuak.

Newton iterazioan oinarritutako 6-ataletako Gauss kolokazio metodoaren implementazioarekin egindako zenbakizko esperimentuak azalduko ditugu. Esperimentu hauen konputaziorako, 64-biteko doitasuneko IEEE koma-higikorreko aritmetika erabili dugu.

Problemak

Pendulu bikoitz zurruna

Pendulu bikoitz zurrunaren problemaren Hamiltondarra eta parametroak, [3.2.](#) atalean definitu ditugu. k parametroak malgukiaren zurruntasun maila finkatzen du: $k = 0$ balioarentzat, problema ez da zurruna eta problemaren zurruntasuna, k balioarekin batera handitzen da.

Hasierako balioak, era honetan aukeratu ditugu: $k = 0$ problema ez zurrunarentzat, [\[31\]](#) artikulutik izaera ez-kaotikoa duen hasierako balioa hartu dugu: $q(0) = (1.1, -1.1)$ eta $p(0) = (2.7746, 2.7746)$. $k \neq 0$ problemen hasierako balioak,

$$q(0) = \left(1.1, \frac{-1.1}{\sqrt{1 + 100k}} \right), \quad p(0) = (2.7746, 2.7746),$$

espresioen bidez finkatu ditugu, horrela sistemaren energia $k \rightarrow \infty$ handitzen den heinean, bornatua dago.

Integrazio guztiak, $h = 2^{-7}$ urrats luzera erabiliz egin ditugu; problema ez zurrunarentzat ($k = 0$) trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiago izan dadin aukeratu dugu. Trunkatze errorea, biribiltze errorea baino handiagoa izango da $k > 0$ zurruntasun balio handietarako. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioak egin ditugu eta zenbakizko soluzioa, $m = 2^{10}$ urratsero itzuli dugu.

Biribiltze errorearen azterketa.

Lehenengo, Newtonen iterazioan oinarritutako IRK implementazio berriaren biribiltze errorearen hedapena egokia dela aztertuko dugu. Aurreko artikuluan [\[7\]](#), biribiltze errorearen hedapena gutxitzeko ahalegin berezia eginez, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioa proposatu genuen. Bi implementazioen, 6-ataleko Gauss kolokazio metodoaren biribiltze erroreak konparatuko ditugu.

Pendulu bikoitzaren k parametroaren hiru balioetarako, energia errorearen azterketa zehatza egin dugu: $k = 0$, non biribiltze errorea trunkatze erroreari nagusitzen zaion; $k = 2^{10}$, non bi erroreak tamaina berekoak diren; eta $k = 2^{12}$, non trunkatze errorea biribiltze erroreari nagusitzen zaion. Biribiltze errorearen

konparaketa sendoago izan dadin ([55] lanean bezala), azterketa estatistikoa egin dugu. Problema bakoitzarentzat, hasierako balioak $\mathcal{O}(10^{-6})$ errore tamainako auzaz perturbatutako $P = 1000$ integrazio konputatu ditugu.

6.1. irudian, zenbakizko integrazioek gure implementazio berriaren biribiltze errorearen propagazio ona erakusten dute. Alde batetik, $k = 0$ eta $k = 2^{10}$ balioetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioak energiaren grapenaren batezbestekoak, drift lineala agertzen du eta Newton iterazioan oinarritutako implementazioak, ordea ez du energia driftarik agertzen. Beste alde batetik, bi implementazioetan, energiaren desbideratze estandarrak antzekoak dira eta $t^{1/2}$ espresioaren proportzionalak dira.

Puntu-finkoa versus Newton iterazioa

6.2. taulan, k parametroaren lau balioetarako, bi implementazioen eraginkortasunaren adierazle nagusienak laburtu ditugu.

6.2. Taula:

k	0	2^3	2^6	2^8
E_0	-14.39	-5.75	-5.64	-5.64

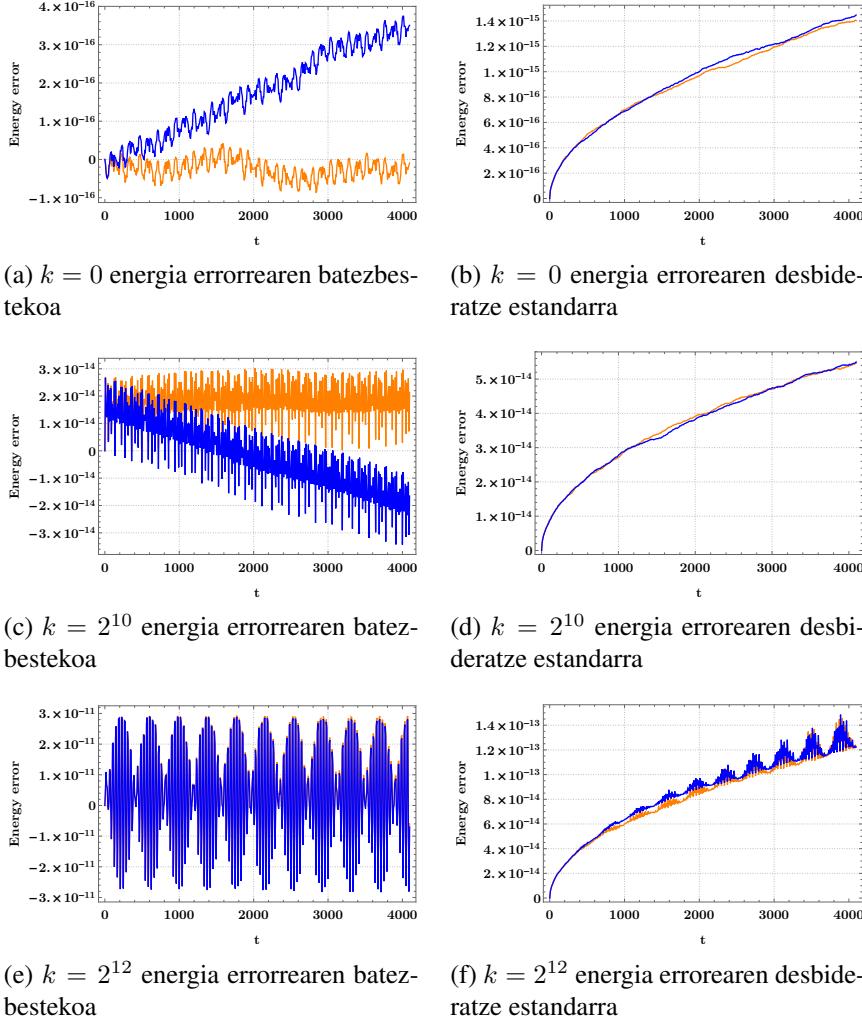
Fixed-points it.

Elapsed-time (sec.)	10	12	19	51
It. per step	8.58	11.1	22.	64.2
Energy	2.96×10^{-15}	1.81×10^{-14}	2.94×10^{-11}	6.33×10^{-5}

Newton it.

Elapsed-time (sec.)	18	20	19	18
It. per step	5.09	5.53	5.58	5.01
L. solves per step	11.37	12.92	12.72	11.04
Energy	1.6×10^{-15}	1.74×10^{-14}	2.94×10^{-11}	6.33×10^{-5}

Eraginkortasuna neurtzeko, bi implementazioen exekuzio sekuentzialen CPU-denborak konparatu ditugu. Horrez gain, bi implementazioen urratseko iterazioen batezbestekoak (It. per step) alderatu ditugu eta Newton implementazioan, urratseko sistema linealen ebazpenen batezbestekoa (L.solves per step) eman dugu.



6.1. Irudia: Energia errorearen batezbestekoaren (ezkerrean) eta desbideratze estandarraren eboluzioa (eskuinean), puntu-finkoaren implementazioa (urdinez), eta Newton implementazioa (laranjaz). $k = 0$ problema ez-zurruna (a,b), $k = 2^{10}$ lehen problema zurruna (c,d) eta $k = 2^{12}$ bigarren problema zurruna (e,f)

Zenbakizko soluzioaren doitasuna neurtzeko, energiaren errore erlatiboaren maximoa eman dugu,

$$\max \left| \frac{E(t_n) - E(t_0)}{E(t_0)} \right|, \quad t_n = t_0 + nh, \quad n = 1, 2, \dots$$

k balio txikienetarako, puntu-finkoaren implementazioa Newton implementazioa baino eraginkorragoa da. Baina, pendulu bikoitzaren zurruntasun maila han-

ditzen dugunean, puntu-finkoaren iterazio kopurua gero eta handiagoa den bittarlean, Newton implemantazioaren iterazio kopurua mantendu egiten den, eta k handietan txikitu ere bai. Beraz, zurruntasuna handitzen dugunean, Newton implementazioa gero eta eraginkorragoa bilakatzen da. $k = 2^{18}$ baliotik aurrera, puntu-finkoak ez du konbergitzen eta Newton implemantazioak, antzeko iterazio kopuruarekin konbergitzen du.

6.8. Laburpena.

IRK metodoen Newton simplifikatuaren iterazioen ekuazio-sistema, modu eraginkorrean askatzeko implemantazioa proposatu dugu. Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implemantazio berria aurkeztu dugu eta implemantazio honen biribiltze errorearen hedapena egokia dela baiezta dugu. Problema zurruñetarako, Newton simplifikatuaren iterazioa, puntu-finkoaren iterazioa baino eraginkorragoa dela ikusi dugu.

Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoen implemantazioen inguruko lan hauek [22, 54] gomendatuko ditugu .

Azkenik, aipatu nahi dugu, atal honen edukiak [Numerical Algorithms](#) aldizkarian publikatutako [6] artikuluan aurki daitezkeela eta implemantazioaren kodea, helbide honetan <https://github.com/mikelehu/IRK-Newton> eskuragarri jarri dugula.

7. Kapitulua

IRK metodo simplektikoen bidezko eguzki-sistemaren integrazioa

Mikel Antonana Otano.

7.1. Sarrera.

Kapitulu honen jatorrizko helburua, aurreko bi kapituluetan landutako IRK metodo simplektikoen implementazioak (**5.** kapituluan puntu-finkoaren iterazioan oinarritutakoa eta **6.** kapituluan Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutakoa) eguzki sistemaren zenbakizko integratorako aplikatzea da. Zenbait proba egin ondoren, ondorioztatu dugu Newton-en iterazio sinplifikatuaren oinarritutako implementazioa baino eraginkorragoa dela kasu honetan puntu finko partizionatuan oinarritutako implementazioa. Bestalde, eguzki-sistemaren simulaziorako ekuazio differentzialen sistemak ekuazio Kepleriarren perturbazio gisa har daitezkeenez, honetaz baliatzen saiatzea erabaki dugu IRK metodo simplektikoen bidezko zenbakizko integrazio eraginkorrak lortze aldera.

Helburu horrekin, kapitulu honetan ekuazio differentzial Kepleriarren perturbazio gisa har daitezkeen ekuazio differentzialen sistemaren zenbakizko integratorako metodo berri bat proposatuko dugu. Gure metodo berria ondorengo ideian oinarritzen da: fluxu Kepleriarrean oinarritutako aldagai aldaketa bat aplikatuz, aldagai berriean idatzitako ekuazio differentzialetatik alde Kepleriarra desagerraz, eta dagokien ekuazio sistemari IRK metodo simplektiko bat aplikatzea.

Proposatuko dugun metodoa, Runge-Kutta implizitu konposatua (RKIK), simplektikoa eta denborarekiko simetrikoa da, neurri batean, splitting metodoen antzekoa. Aldagai berriekiko ekuazio differentzialak, magnitude txikiko balioak hartzen dituzte eta honek, hainbat abantaila izango ditu. Lehenik, eguzki-sistemaren problemaren trunkatze errore nagusiena ezabatzen dugunez, urrats luzera handia-

goak erabili ahal izango ditugu. Bigarrenik, aldagai berriekiko ekuazio diferenzialen zenbakizko ebazpenean, biribiltze erroreen eragina txikiagoa izango da (batura konpentsatuaren algoritmoan bit gutxiago galduko ditugu). Hirugarrenik, puntu-finkoaren iterazioek konbergentzia azkarragoa izango dute (aldagai berri-tako ekuazioen espresioen deribatu partzialak tamaina txikikoak direlako).

Lehenengo, problema perturbuetarako oinarritzko metodoa azalduko dugu, perturbatu gabeko zatiaren fluxuaren bidezko aldagai aldaketan oinarritutako integracio metodoaren zehaztapenak emango ditugularik. Ondoren, aipatutako integracio eskema orokorra hainbat ekuazio Kepleriarren perturbazio gisa har daitezkeen sistemetarako aplikatzeko zenbait xehetasun emango ditugu. Azkenik, metodo berri hau eguzki-sistemaren eredu simplifikatu baterako aplikatuko dugu, eta ezagutzen diren hainbat metodo esplizitu simplektikorekin (doitasun altutara-ko splitting eta konposizio metodoekin) konparatuko dugu. Aipatutako eguzki-sistemaren eredu simplifikatua, eguzkia, zortzi planetak, eta Pluton hartzen dituen 10 gorputzeko eredu Newtoniarra da, koordenatu Heliozentriko kanonikotan adierazia (ikus [B.2.](#) eranskina).

7.2. Sistema perturbuetarako integracio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta implizitu konposatua (RKIK)

Demagun honako ekuazio diferenzialen sistema dugula,

$$\frac{du}{dt} = k(u) + g(u, t), \quad u(t_0) = u_0 \in \mathbb{R}^D \quad (7.1)$$

non $g(u, t)$ perturbazio gisa hartzen dugun. Demagun gainera pertubatu gabeko zatia,

$$\frac{du}{dt}u = k(u), \quad (7.2)$$

edozein hasierako baliotarako zehazki ebazteko gai garela, alegia, bere t -fluxua $\varphi_t : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^D$ zehazki ebazteko gai garela. Gogora dezagun fluxuaren definizioz,

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi_t(u) \equiv k(\varphi_t(u)) \quad (7.3)$$

identitatea daukagula.

Esate baterako, [\(7.2\)](#) sistema Kepleriarra izan liteke, hau da,

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{\mu}{\|q\|}, \quad (7.4)$$

7.2. Sistema perturbuetarako integrazio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta implizitu konposatuaren h luzerako urrezko eredu

funtzio Hamiltondarri dagokion EDA sistema, non $u = (q, p) \in \mathbb{R}^6$, eta m eta μ parametro konstanteak diren. (Ikus xehetasun gehiagorako [B.1.](#) eranskina.) Eguzki-sistemaren simulaziorako aplikatzerakoan, perturbatu gabeko [\(7.2\)](#) sistema hainbat ekuazio Kepleriar independentez osatuta egongo da, eta $g(u, t)$ perturbazioan, ekuazio Kepleriar horien arteko interakzioa biltzen dituen gaiak izango ditugu. (Xehetasun gehiagorekin azalduko dugu kasu hau [7.3.](#) atalean).

Runge-Kutta implizitu konposatuaren h luzerako urrats bat definitzeko, u_0 hasierako balioa ezaguturik [\(7.1\)](#) problemaren $u(t)$ soluzioaren $t = t_0 + h$ uneko balioa hurbiltzeko prozedura zehaztu behar dugu. Horretarako, [\(7.1\)](#) sistemari aldagai aldaketa bat aplikatuko diogu, eta aldagai berriean idatzitako problema ebatziko dugu IRK metodo simplektiko baten bidez. Aplikatuko dugun aldagai aldaketa honakoa da

$$u = \varphi_{t-t_0-h/2}(U) \quad \rightarrow \quad U = \varphi_{-t+t_0+h/2}(u).$$

Aldagai berriean idatzitako ekuazio diferenzialen sistema lortzeko, honakoa egingo dugu,

$$\frac{d}{dt}u(t) = \frac{d}{dt}(\varphi_{t-\tau}(U(t))), \quad (7.5)$$

non $\tau = t_0 + h/2$ den. Eskuin aldeari katearen erregela aplikatuz, eta ezker alderako [\(7.1\)](#) eta aldagai aldaketa kontutan hartuz, eta $U(t)$ idatzi ordez U jarriz,

$$k(\varphi_{t-\tau}(U)) + g(\varphi_{t-\tau}(U), t) = \frac{\partial}{\partial t}\varphi_{t-\tau}(U) + \varphi'_{t-\tau}(U)\frac{d}{dt}U, \quad (7.6)$$

non $\varphi'_{t-\tau}(U)$ espresioak fluxuaren U aldagaien Jacobiarrak adierazten duen. Ondoren, [\(7.3\)](#) identitatea aplikatuz, honakoa lortzen dugu

$$g(\varphi_{t-\tau}(U), t) = \varphi'_{t-\tau}(U)\frac{d}{dt}U, \quad (7.7)$$

eta beraz, jatorrizko [\(7.1\)](#) ekuazio diferenzialen problema U aldagai berriean idaztea lortu dugu, hau da,

$$\frac{d}{dt}U = (\varphi'_{t-\tau}(U))^{-1}g(\varphi_{t-\tau}(U), t), \quad U(t_0) = U_0, \quad (7.8)$$

non

$$U_0 = \varphi_{h/2}(u_0)$$

den. Hortaz, [\(7.8\)](#) problemarako $t = t_0$ unetik $t = t_1 := t_0 + h$ unera IRK metodoarekin integratuz, $U_1 \approx U(t_1)$ lortuko dugu, eta aldagai aldaketari buelta emanez $u(t_1) = \varphi_{h/2}(U(t_1))$ lortzen dugunez, $u_1 \approx u(t_1)$ kalkulatzeko,

$$u_1 = \varphi_{h/2}(U_1)$$

egingo dugu.

Orain arte, RKIK metodoaren lehen urratsa nola eman deskribatu dugu, baina $t = t_0$ uneko $u(t_0)$ egoeratik $t = t_1$ uneko $u(t_1)$ egoeraren u_1 hurbilpena lortzeko prozedura berbera erabil dezakegu, $j = 1, 2, 3, \dots$ indizetarako, $t = t_j$ uneko $u(t_j)$ egoeraren u_j hurbilpenetik $t = t_{j+1} := t_j + h$ uneko $u(t_{j+1})$ egoeraren u_{j+1} hurbilpena lortzeko. Kontutan hartu behar da urrats bakoitzean aplikatu beharreko aldagai aldaketa desberdina dela, alegia, $(j+1)$. urratsean, U aldagai berriak jatorrizko u aldagaietik $u = \varphi_{t-\tau_j}(U)$ moduan erlazionaturik izango ditugula, non $\tau_j = t_j + \frac{h}{2}$ den. Urrats bakoitzean aplikatutako aldagai aldaketa bereizteko, $(j+1)$. urratseko aldagai berria $U_j^{j+1/2}$ gisa adieraziko dugu.

Horrela, $(j+1)$. urratsean, $u_j \approx u(t_j)$ emanik, lehenik dagokion aldagai berriaren balioa kalkulatuko dugu,

$$U_j^{j+1/2} = \varphi_{h/2}(u_j)$$

ondoren, aukeratu dugun IRK metodoaren h luzerako urrats bat aplikatuko dugu ondorengo problemarako,

$$\frac{d}{dt} U_j^{j+1/2} = \left(\varphi'_{t-\tau_j}(U_j^{j+1/2}) \right)^{-1} g(\varphi_{t-\tau_j}(U_j^{j+1/2}), t), \quad U_j^{j+1/2}(t_j) = U_j^{j+1/2}, \quad (7.9)$$

$U_{j+1}^{j+1/2} \approx U_j^{j+1/2}(t_{j+1})$ hurbilpena lortuz, eta azkenik, RKIK metodoaren urratsa bukatzekeo,

$$u_{j+1} = \varphi_{h/2}(U_{j+1}^{j+1/2})$$

kalkulatuko dugu. Laburbilduz:

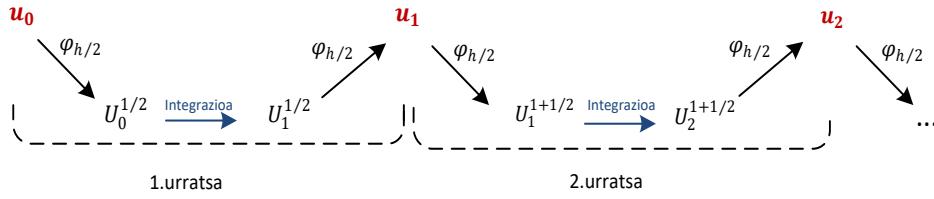
$$\begin{array}{ccc} U_j^{j+1/2} & \xrightarrow{\text{IRK(7.9)}} & U_{j+1}^{j+1/2} \\ \nearrow \varphi_{\frac{h}{2}}(u_j) & & \searrow \varphi_{\frac{h}{2}}(U_{j+1}^{j+1/2}) \\ u_j & & u_{j+1} \end{array}$$

Urrats bakoitzerako aldagai aldaketa definitzeko erabiltzen dugun erreferentzialako $\tau_j = t_j + h/2$ unea t_j eta t_{j+1} balioen erdigunea aukeratu dugu. Hori horrela egiteak badu arrazoi bat: urratsa bere osotasunean denborarekiko simetrikoa da, aplikatutako IRK metodoa ere denborarekiko simetrikoa da: Kasu horretan, ikus daiteke aurrera h luzerako urratsa ematea $-h$ luzerako urratsa ematearekin desegiten dela.

RKIK metodoaren integrazio eskema orokorra 7.1. irudian laburtu dugu.

Nolabait, proposatutako RKIK metodoa splitting metodoen antzekoa da, bereziki, bigarren ordenako (2.21) Strang-en splitting metodoaren antzekoa. Gogora dezagun Strang-en metodoa era honetan aplikatzen dela: $\varphi_{h/2}$ fluxua aplikatu,

7.2. Sistema perturbuetarako integrazio metodo simetriko mota orokor bat: Runge-Kutta implizitu konposatua



7.1. Irudia: RKIK metodoaren integrazio eskema orokorra

perturbazioari soilik dagokion ekuazioaren soluzioa kalkulatu h urrats luzerarako, eta berriz $\varphi_{h/2}$ fluxua aplikatu. Fluxuaren aldagai aldaketarekin, gauza bera egiten ari gara, baina $\varphi_{h/2}$ fluxuaren bi aplikazioen artean egiten duguna konplexuagoa izatearen truke, bigarren ordenako metodoa lortu beharrean, aldagai berrieta rako aplikatzen dugun IRK metodoaren ordena bereko metodoa lortzen dugu.

Implementazioaren eraginkortasunaren aldetik, integrazioaren urrats guztieta n ez baditugu emaitzak itzuli behar, bi urratsen arteko, $\varphi_{h/2}$ fluxuaren bi konputazioak, φ_h fluxuaren konputazio bakarrarekin konputatuko dugu. Esate baterako, 7.1. irudian, u_1 behar ez bada, zuzenean kalkula daiteke $U_1^{3/2} = \varphi_h(U_1^{1/2})$, fluxua kalkulatzen duen funtzioari dei bakarra eginez, bi dei egin beharrean.

Azpimarratu beharra dago RKIK metodoaren urrats bakoitzaz simplektikoa dela (7.1) sistema perturbatua eta perturbatu gabeko (7.2) sistema biak Hamiltondarra baldin badira, eta aldi berean, (7.9) problemaren zenbakizko ebazpenerako IRK simplektikoa erabiltzen bada. Hain zuzen, kasu horretan $\varphi_{h/2}$ simplektikoa da, eta horren ondorioz (7.9) problema Hamiltonarra denez, IRK simplektikoaren urrats bakoitzaz simplektikoa izango da, eta beraz, RKIK metodoaren $u_j \rightarrow u_{j+1}$ urrats bakoitzaz ere simplektikoa izango da.

Azkenik, bai (7.1) sistema perturbatuak eta bai perturbatu gabeko (7.2) sistematikoa $I(u)$ invariante bera onartzen badute, antzera ondoriozta daiteke (7.8) problemarako ere $I(U)$ invariantea dela, eta beraz invariante hori koadratikoa baldin bada, eta IRK metodoa simplektikoa baldin bada, RKIK metodoak invariante hori konstante mantenduko duela.

Urrats bakoitzari dagokion aldagai berrieta idatzitako (7.8) sistemaren eskualde balioztatzeari dagokionean, sistema perturbatu gabea Hamiltonarra baldin bada, Jacobiaren alderantzizkoa kalkulatzea ekidin daiteke. Hain zuzen, bere t -fluxua simplektikoa denez, $(\varphi'_t(U))^t J \varphi'_t(U) = J$ propietatea betetzen du fluxuak $\forall (t, U) \in \mathbb{R}^{D+1}$, non

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$

den, eta ondorioz, $G \in \mathbb{R}^D$ emanik

$$(\varphi'_{t-\tau}(U))^{-1}G = J^{-1}(\varphi'_{t-\tau}(U))^T JG. \quad (7.10)$$

Beraz, (7.8) sistemaren eskuinaldeko F espresioa balioztatzeko, hurrengo moduan egin daiteke:

- $u = \varphi_{t-\tau}(U),$
- $G = g(u, t)$ balioztatu, eta ondoren $\widehat{G} = JG,$
- $\widehat{F} = \varphi'_{t-\tau}(U)^T \widehat{G},$
- $F = J^{-1}\widehat{F}.$

Goiko algoritmo horretan, hirugarren atala modu eraginkorrean egin daiteke deribazio automatikoko teknikak erabiliz, lehen ataleko kalkuluan erabilitako zenbait tarteko aldagai berrerabiliz gero.

Azkenik, aplikazioetan ohikoa izango da perturbazioari dagokion espresioak balio txikiak hartzea. Kasu horretan biribiltze erroreen eragina txikitzeko komengarria da, doitasun mistoa erabiltzea: Oinarritzko doitasunean aplikatzea (batura konpentsatuarekin) IRK metodoa (7.9) problemari, baina doitasun altuagoan aplikatzea 7.1. irudian azaltzen diren $\varphi_{h/2}$ fluxuak (edo φ_h fluxua, irteerarik behar ez den kasuan).

7.3. Sistema Kepleriarren perturbaziotarako aplikazioa

Goian aipatu bezala, eguzki-sistemaren simulaziorako aplikatzerakoan, mugimenduaren ekuazioak hainbat ekuazio Kepleriar independenteren perturbazio gisa har daitezke. Horretan oinarritzen dira hain zuzen, eguzki-sistemaren simulaziorako aplikatzen diren splitting metodoak ((2.4. atala). Era berean, 7.2. atalean garatutako RKIK metodoak aplika daitezke kasu horretan.

Demagun problemaren alde Kepleriarren kopurua n dela, eta

$$u = (q_1, v_1, \dots, q_n, v_n, w) \in \mathbb{R}^D,$$

non $w \in \mathbb{R}^{D-6n}$, eta (7.1) moduko sistemaren zenbakizko integrazioa burutu nahi dugula RKIK metodoarekin, perturbatu gabeko (7.2) sistema $(q_i, v_i) \in \mathbb{R}^6$ aldagaietarako sistema Kepleriar independentez osatuta dagoelarik. Zehazkiago,

demagun

$$k(u) = \begin{pmatrix} -\frac{v_1}{\mu_1 q_1} \\ -\frac{v_2}{\|q_1\|^3} \\ -\frac{v_2}{\mu_2 q_2} \\ \vdots \\ -\frac{v_n}{\mu_n q_n} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.11)$$

non $\mu_j > 0$ ($j = 1, \dots, n$) diren.

Kasu horretan, (7.2) sistemaren t -fluxua $u = (q_1, v_1, \dots, q_n, v_n, w)$ punturako aplikatzeko, (q_j, v_j) bakoitzeko dagokion fluxu Kepleriarra aplikatu beharko dugu, eta w bere horretan utzi. Zehazkiago, $u = \varphi_{t-\tau}(U)$ moduko aldagai aldaketa, $U = (Q_1, V_1, \dots, Q_n, V_n, W)$ izanik, horrela definiturik egongo da,

$$u_j = \varphi_{t-\tau}^{[\mu_j]}(U_j), \quad j = 1, \dots, n, \quad w = W, \quad (7.12)$$

non, $j \in \{1, \dots, n\}$ bakoitzeko, $\varphi_{t-\tau}^{[\mu_j]} : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^6$ dagokion sistema Kepleriarren $(t - \tau)$ -fluxua den. (Ikus ? eranskina hau praktikan kalkulatzearen inguruko xehetasunetarako.)

Bestalde, aldagai berriean idatzitako (7.8) ekuazio diferentzialen sistemaren eskuin aldeko espresioa balioztatzeko, 7.2. atalaren amaieran azaltzen den algoritmoa aplikatzeko, $\widehat{G} \in \mathbb{R}^D$ emanik, $\widehat{F} = \varphi'_{t-\tau}(U)^T \widehat{G}$ kalkulatu behar dugu. Hori egiteko, demagun $\widehat{G} = (\widehat{G}_1, \dots, \widehat{G}_n, \widehat{G}_{n+1})$ eta $\widehat{F} = (\widehat{F}_1, \dots, \widehat{F}_n, \widehat{F}_{n+1})$ direla. Notazio horrekin,

$$\widehat{F} = \varphi'_{t-\tau}(U)^T \widehat{G}$$

kalkulatzeko, nahikoa izango da honakoa egitea,

$$\widehat{F}_j = \varphi_{t-\tau}^{[\mu_j]'}(U_j)^T \widehat{G}_j, \quad j = 1, \dots, n, \quad \widehat{F}_{n+1} = \widehat{G}_{n+1}.$$

7.4. Zenbakizko esperimentuak

Zenbakizko esperimentuetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodo simplektikoen implementazioa (5. kapitulua) erabili dugu. Lehenengo, IRK metodo implizituetan oinarritutako bi metodo konparatu ditugu: aldagai aldaketa-rik gabeko IRK simplektiko arrunta eta RKIK metodoa. Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketan oinarritutako RKIK metodoaren abantaila argia denez,

hurrengo esperimentuetarako aldagai aldaketa aplikatutako integrazioa bakarrik hartu dugu kontutan.

Hasteko, $s = 6, 8, 9, 16$ atalako RKIK arteko metodo eraginkorrena aukeratu dugu, *CO1035* konposizio eta *ABAH1064* splitting metodoekin konparatzeko.

RKIK konputaziorako, 64-biteko (*double*) eta 80-biteko (*long double*) doitasunak nahasi ditugu. Konputazioaren zati nagusiena, 64-biteko doitasunean egin dugu eta $u_j = \varphi_{h/2}(U_j^{j-1/2})$ eta $U_j^{j+1/2} = \varphi_{h/2}(u_j)$ eta fluxuak kalkulatzeko 80-biteko doitasuna aplikatu dugu. Era honetan, modu merkean soluzioaren doitasuna hobetzea lortu dugu.

RKIK metodoaren exekuzio sekuentziala eta paraleloak egin ditugu. s atalen funtzioen balioztapenak,

$$F_{n,i} = f(Y_{n,i}), \quad i = 1, \dots, s,$$

independenteak dira eta paraleloan kalkula daitezke. $s = 8$ metodoaren integrazio paraleloak egin ditugu eta hari kopurua 2 aplikatu dugu.

Test problema

Test problema gisa 9-planeten problema ([3.4.](#) atala) erabili dugu integrazioetarako. Hasierako balioak *DE-430* efemerideen artikulutik hartu ditugu: planeten masak [3.4.](#) taulan laburtu ditugu; eta hasierako kokapen eta abiadurak [3.5.](#) taulan aurki daitezke.

Koordenatu heliozentrikoei dagokien Hamiltondar sistema ([B.6](#)),

$$H(q, p) = H_K(q, p) + H_I(q, p),$$

integratu dugu. $H_K(q, p)$ mugimendu Keplerrirari dagokion Hamiltondarraren aldea da eta $H_I(q, p)$, perturbazioei dagokien Hamiltondarraren aldea da.

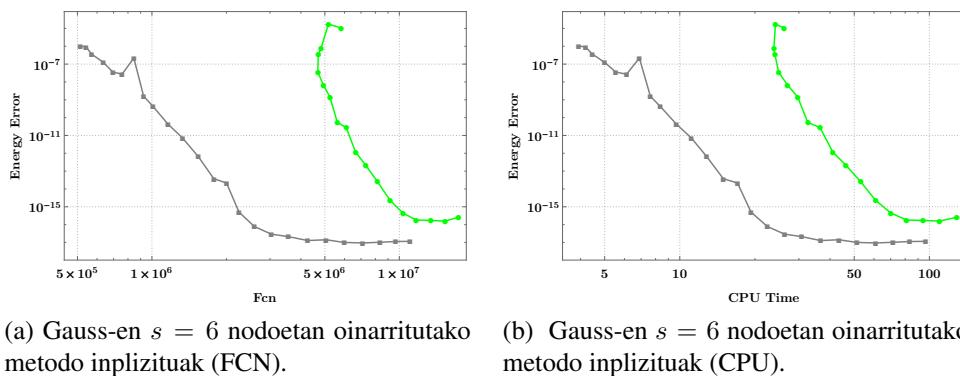
Integrazioen tarteak, $t_{end} = 10^6$ egunetako da eta zenbakizko integrazioetan, h -ren balio ezberdinak erabili ditugu. $s = 6$ metodoarentzat urrats luzerak aukeratu ditugu eta gainontzeko metodoentzat, s -atalen araberako urrats luzera proporzionalak finkatu ditugu:

$$\begin{aligned} s = 6 : \quad h &= 2^{k/4}, \quad k = 4, \dots, 28, \\ s = 8 : \quad h &= (8/6)h, \\ s = 9 : \quad h &= (9/6)h, \\ s = 16 : \quad h &= (16/6)h. \end{aligned}$$

Zenbakizko esperimentuetarako, aldagai aldaketa planeta guziei aplikatzea erabaki dugu. 9-planeten probleman, gorputz kopurua txikia denez, Kepler fluxuaren gainkarga esanguratsua da eta barne-planetei bakarrik aplikatzea, eraginkorragoa izan daiteke. Baino, gorputz gehiago konsideratzen baditugu (esaterako ilargia eta asteroide nagusienak) edo eguzki-sistemaren eredu konplexuagoetan (esaterako erlatibilitate efektua gehitzerakoan), perturbazio aldearen konputazioa nagusituko da eta Kepler fluxuaren kalkuluak pisua galduko luke.

IRK eta RKIK metodoen arteko eraginkortasun konparazioak

Hasteko, RKIK integrazio metodo berriak, aldagai aldaketarik aplikatu gabeko IRK metodo simplektiko arruntekiko suposatzen duen hobekuntza nabarmenzeko, $s = 6$ ataleko (12 ordenako) Gauss-en nodoetan oinarritutako kolokazio metoda hartuko dugu. Alde batetik, aldagai aldaketarik gabeko implementazioaren, eta bestetik, IRK metodo berean oinarritutako RKIK metodo berriaren eraginkortasuna konparatuko ditugu. Aldagai aldaketarik gabeko implementazioari dagokionean, eraginkorrena puntu finko partizionatuaren implementazioa dela ikusi dugu, hasieraketetarako aurreko ataleko datuekiko interpolazioa erabiltzen duena. Beraz, implementazio hori erabili dugu 7.3. irudian azaldutako eraginkortasun konparazioa egiteko. Ekuazio diferentzialen balioztapen kopuruarekiko konparaketan, RKIK metoda nabarmen eraginkorragoa da. Exekuzio denboren konparaketan aldea txikiagoa da, baina zenbat eta eredu konplexuagoa izan abantaila handituz joatea espero liteke.

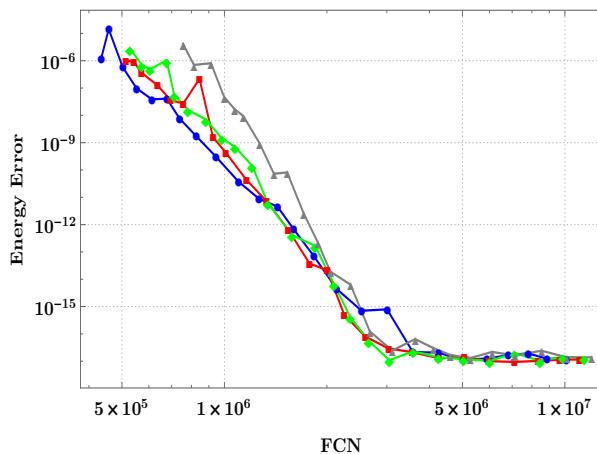


(a) Gauss-en $s = 6$ nodoetan oinarritutako metodo implizituak (FCN).

(b) Gauss-en $s = 6$ nodoetan oinarritutako metodo implizituak (CPU).

7.2. Irudia: Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu. (a) irudian, ekuazio diferentzialen ebaluazio kopuruarekiko (FCN) eraginkortasuna neurtu dugu. (b) irudian, CPU denborarekiko eraginkortasuna neurtu dugu. Irudi bakoitzean, Gauss-en nodoetan oinarritutako $s = 6$ ataletako bi bertsio konparatu ditugu: IRK berdez eta RKIK grisez.

Jarraian, $s = 6, 8, 9, 16$ ataletako RKIK metodoen eraginkortasuna konparatuko dugu. 7.3. irudian, ekuazio differentzialen sistema zehazten duen funtziaren balioztapen kopuruarekiko (FCN) eta 7.4. irudian, CPU-denborarekiko (exekuzio paraleloetan *Wall time*) erakutsi dugu. Funtziaren balioztapen kopuruarekiko eraginkortasunak, metodoak problemaren eredu konplexuagoan nola jokatuko lukeen erakusten digu eta CPU-rekiko eraginkortasunak, eredu simple honetarako gertatzen dena azaltzen digu.

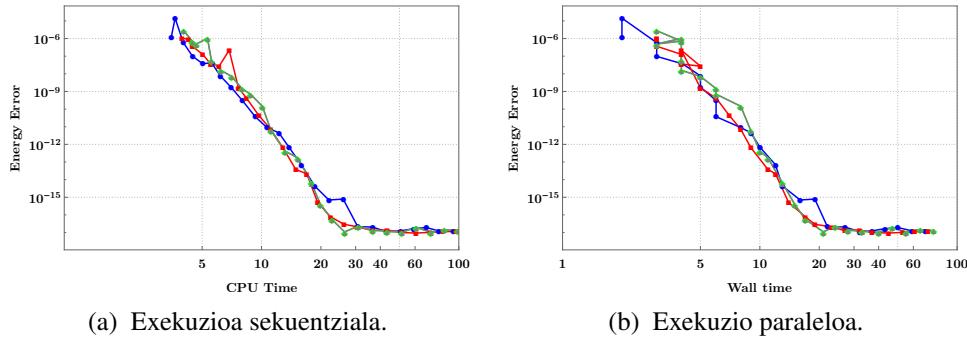


7.3. Irudia: Eraginkortasun grafikoa eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu dugu. Ardatz bertikalean, energiarene errore erlatiboa maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, ekuazio differentzialen ebaluazio kopurua (FCN). Gaussen nodoetan oinarritutako s ataletako RKIK metodo sinplektikoen lau integrazio konparatu ditugu: $s = 6$ urdinez, $s = 8$ gorriz, $s = 9$ berdez, eta $s = 16$ grisez

Exekuzio sekuentzialak eta exekuzio paraleloak aztertuz, RKIK metodo eraginkorrena aukeratu nahi dugu. Horretarako, biribiltze errorea nagusitzen hasten den inguruko unean gertatutakoa aztertu dugu: $s = 8, 9, 16$ atal kopuruei dagozkien metodoak, $s = 6$ metodoa baino eraginkorragoak azaldu zaizkigu. Bestalde, $s = 8, 9, 16$ atal kopuruei dagozkien metodoak beraien artean oso antzekoak izanik, $s = 8$ ataleko RKIK aukeratu dugu. Bestalde, exekuzio paraleloa, sekuentziala baino eraginkorragoa da. Aipatzeko da eguzki-sistemaren eredu oso sinplearekin ari garela lan egiten. Eedu konplexuagotarako, parallelizazioaren gainkarga erlatiboa nabarmen txikitza espero liteke.

Azkenik, $s = 8$ ataletako RKIK metodoak aipatutako eguzki-sistemaren eredu sinplifikaturako aplika daitezkeen bi metodo esplizitu eraginkorrekin konparatuko dugu (biak sinplektikoak eta denborarekiko simetrikoak):

- CO1035 gisa adieraziko duguna: Sofroniu eta Spalettaren 10 ordenako eta



(a) Exekuzioa sekuentziala.

(b) Exekuzio paraleloa.

7.4. Irudia: Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, CPU denbora (exekuzio paraleloan Wall-Time). (a) konputazioa modu sekuentzialean egin dugu eta (b) modu paraleloan hari kopurua 2 izanik. Irudi bakoitzean, Gaussen nodoetan oinarritutako s ataletako RKIK metodo simplektikoen lau integrazio konparatu ditugu: $s = 6$ urdinez, $s = 8$ gorriz, $s = 9$ berdez, eta $s = 16$ grisez.

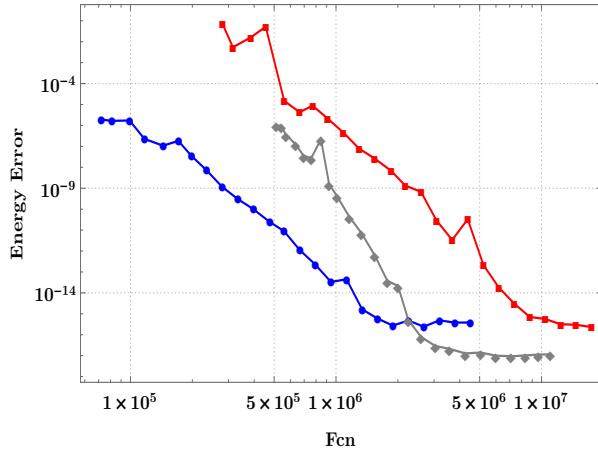
35 ataleko konposizio metodoa da, oinarrizko integratziale gisa Störmer-Verlet integratzialea hartuta (ikus 2.4. azpiatala).

- ABAH1064 gisa adieraziko duguna, koordenatu Heliozentrikoetarako egokitutako splitting metodoa da, ekuazio differentzialen sistema hiru zatitan banatuta hartzen dituena: alde Kepleriarra, kokapenen araberako perturbazioa, eta momentuen araberako perturbazioa. Perturbazioa nahikoa txikia denean, 10 ordenako metodo gisa har daiteke (ikus 2.4. azpiatala).

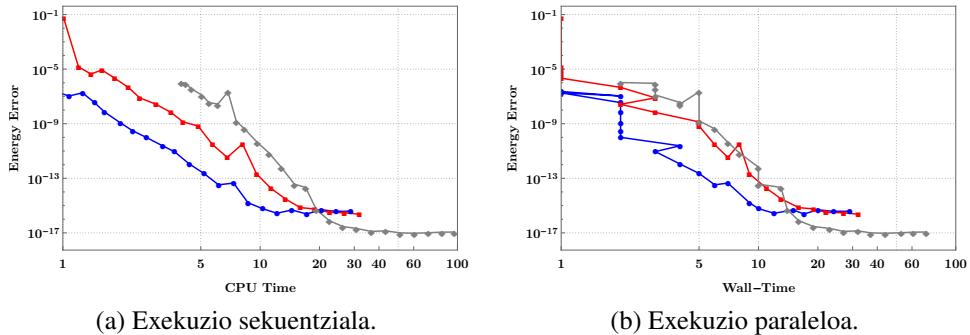
Ekuazio differentzialen sistema zehazten duen funtzioaren balioztapen kopuruaren araberako eraginkortasun konparazioa 7.5. irudian ikus daiteke. Ikusten denez, RKIK metodoak doitasun hobea lor dezake urrats luzera txikiatarako, birlitzte erroreen eragina txikiago baita. Dena den, urrats luzeagotarako ABAH1064 splitting metodoa eraginkorragoa da.

Bestalde, exekuzio denboraren araberako eraginkortasun konparazioa 7.6. irudian ikus daiteke. RKIK metodoari dagokionez, $s = 8$ ataleko metodoa modu sekuentzialean eta modu paraleloan konparatu dugu beste metodoekin. Eguzki-sistemaren eredu simplearen integratziorako, splitting metodoak oso eraginkorrik azaldu zaizkigu. RKIK metodoaren exekuzioa paralelizatzeko abantaila erakusten du baina hala ere, splitting metodoak eraginkorragoa izaten jarraitzen du gure test problema simplerako.

Dena den, eredu errealistagoak (gorputz kopurua handitzen delako, erlatibilitate efektua kontutan hartzen delako ...) integratzeko, RKIK metodoak eraginkorragoak bilakatzea espero liteke. Splitting metodoen konputazioak, modu trinkoan



7.5. Irudia: Eraginkortasun grafikoa, eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu dugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, ekuazio differentzialen ebaluazio kopurua (FCN). Hiru integrazio metodo konparatu ditugu: $s = 8$ ataleko RKIK metodoa grisez, ABAH1064 urdinez eta CO1035 gorriz



7.6. Irudia: Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, CPU denbora (exekuzio paralelotan Wall-Time) erakutsi dugu. (a) konputazioa modu sekuentzialean egin dugu eta (b) modu paraleloan, hari kopurua 2 izanik. Irudi bakotzean, hiru integrazio metodo konparatu ditugu: $s = 8$ RKIK grisez, ABAH1064 urdinez eta CO1035 gorriz

kalkulatu behar dira, hau da, atalen konputazioak sekuentzialki exekutatzen dira eta ez du konputazio aldaerarik onartzen. IRK ekuazio implizituak ebatteko, ordea, teknika ezberdinak konbina daitezke eta eraginkortasuna hobetzeko aukera asko eskaintzen dizkigu. Adibidez [13], iterazio gehienak problemaren eredu simple batekin, doitasun baxuan kalkula daitezke eta bukaerako iterazio pare bat

eredu osoarekin, doitasun altuan. IRK metodoaren s -ataletako funtzioen balioz-tapenak modu paraleloan exekutatu daitezke eta eguzki-sistemaren eredu konple-xuagoa aplikatzen den neurrian, paralelizazioak abantaila handiagoa izatea espero da.

Energia errorea eta errore globalak.

Hiru errore mota ezberdin aztertu ditugu: energia errorea; kokapen eta abiaduren erroreen estimazioak; orbita eliptikoaren erdi-ardatz nagusiaren (*semi-major axis*) eta eszentrikotasunaren erroreen estimazioak. RKIK metodoa $h = 10.63$ urrats luzerarekin integratu dugu eta *CO1035*, *ABAH1064* metodoak $h = 4.76$ urrats luzerarekin.

Energiaren eboluzioa

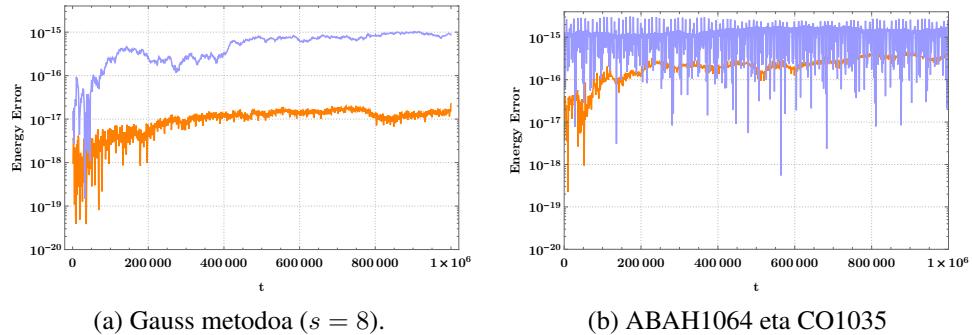
Lau integrazioen energiaren errore erlatiboaren eboluzioak [7.7.](#) irudian erakutsi ditugu. Batetik, RKIK metodoaren doitasun mistoko implementazioaren abantaila erakusteko, bi implementazioen erroreen eboluzioak konparatu ditugu: alde bate-tik kalkulu guztiarako 64-biteko (*double*) doitasuna erabiltzen duen implemen-tazioa, eta bestetik 64-biteko eta 80-biteko (*long double*) implementazio mistoa erabiltzen duena. Horrez gain, *CO1035* konposizio eta *ABAH1064* splitting me-tooen energia erroreen eboluzioak konpara daitezke aurrekoekin, eskala berean bait daude bi azpi-irudiak. Aipagarria da RKIK metodoaren implementazio mis-toak *ABAH1064* splitting metodoarekin alderatuz, energia errore txikiagoak lor-tzen dituela.

Kokapen eta abiadura erroreen estimazioak

RKIK ($s = 8$) eta *ABAH1064* metodoen kokapen eta abiaduraren erroreen es-timazioak ikus daitezke [7.8.](#) irudian. Erroreen estimazioa, urrats txikiagoko in-tegrazioaren soluzioarekiko differentzia gisa kalkulatu dugu. RKIK metodoaren integrazioan, urrats luzera handiagoa erabili arren, barne-planeten kokapen eta abiaduren errore estimazioak, *ABAH1064* splitting metodoaren integrazioan bai-no txikiagoak izan dira.

Eszentrikotasun eta erdi-ardatz nagusiaren erroreen estimazioak

Planeten mugimendu orbitala eliptikoa da. Orbitaren propietateak finkatzen di-tuzten orbita Kepleriarraren bi inbariante hauen erroreen estimazioa kalkulatuko dugu:



7.7. Irudia: Energia errorearen eboluzioa lau integrazio metodoetarako erakutsi dugu. Ezkerreko irudian, $s = 8$ ataleako RKIK metodoaren $h = 10,667$ urrats luzerarekin egindako integrazioak erakutsi ditugu: kalkulu guztietarako 64-biteko (*double*) doitasunarekin (urdinez) eta bestetik, 64-biteko eta 80-biteko (*long double*) implementazio mistoa erabiltzen duena (laranjaz). Eskuineko irudian, splitting/konposizio metodoak erakutsi ditugu: ABAH1064 (laranjaz) eta CO1035(urdinez)

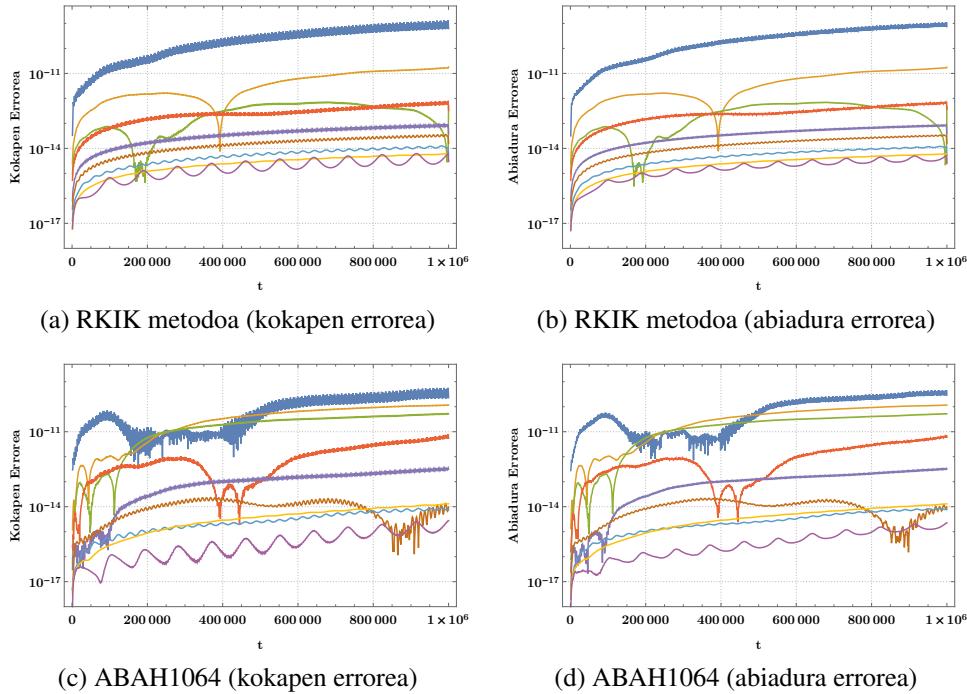
1. a erdi-ardatz nagusia (*semi-major axis*) izeneko inbariantea, orbita eliptikoaren tamaina definitzen duena.
2. e eszentrikotasuna, orbita eliptikoaren forma finkatzen duena.

Bi inbarianteen erroreen eboluzioak 7.9. irudian ikus daitezke. Bai RKIK metodorako, eta bai ABAH1064 splitting metodorako, a erdi-ardatz nagusiaren eta e eszentrikotasunaren erroreak, kokapen eta abiaduren erroreak baino txikiagoak dira. Honek esan nahi du, integrazioaren orbitaren tamaina eta forma hobeto mantentzen direla eta errorea, orbitaren fasean nagusitzen dela.

Biribiltze errorea.

Hirugarren experimentu honetan, biribiltze errorea ilustratzeko esperimentua egin dugu eta horretarako, momentu angeluarraren errore erlatiboaren eboluzioan oinarritu gara. Lau faktore hartu behar dira kontutan. Kepler-en fluxuak momentu angeluarra zehazki mantentzen du eta jatorrizko ekuazio diferenzialen inbariante koadratikoa da. Hori dela-eta, Kepler-en fluxuan oinarritutako aldaketa-rekin lortutako ekuazio diferenzialen inbariante koadratikoa ere bada. Integratzeko Runge-Kutta metodo simplektikoa aplikatu dugunez, inbariante koadratikoa zehazki mantentzen ditu eta beraz, ikusten duguna biribiltze errorea da.

7.10. irudian, $s = 8$ ataleko RKIK metodoarekin, $h = 9.0$ eta $h = 10.63$ urrats luzerarekin integrazioen soluzioen momentu angeluarraren errorea erakutsi dugu eta espero bezala, biribiltze errorea zein den erakusten dute.

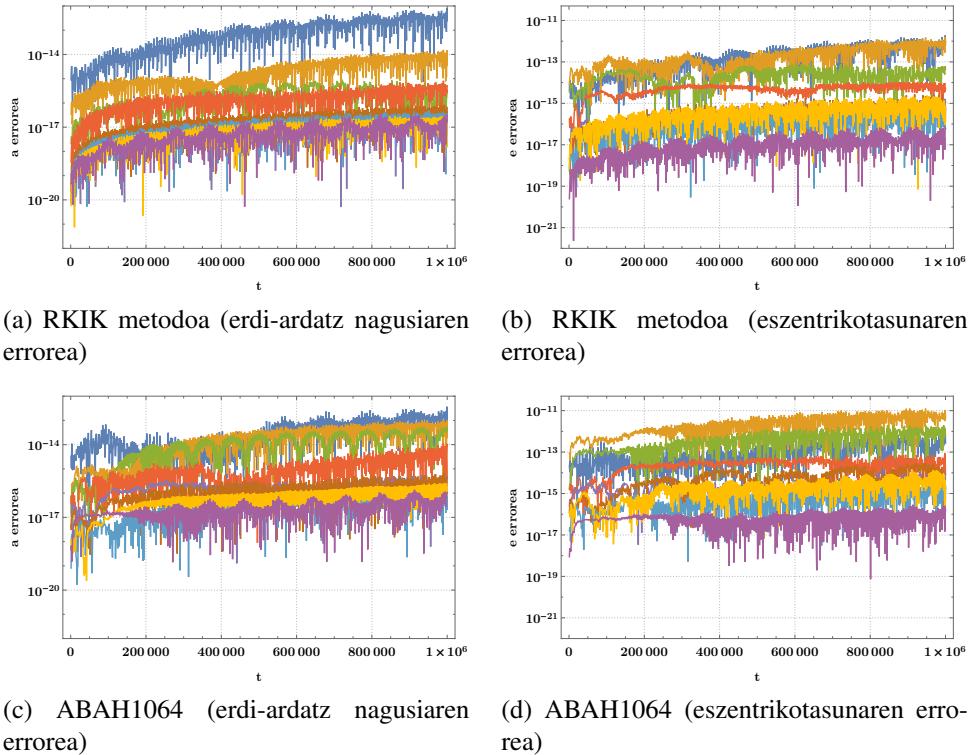


7.8. Irudia: Kokapen eta abiaduraren errorearen estimazioak erakutsi ditugu. (a) eta (b) irudietan, $s = 8$ ataleko RKIK metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 10,667$ urrats luzera aplikatutako integrazioarentzat. (c) eta (d) irudietan, *ABAH1064* splitting metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 4.76$ urrats luzerako integrazioarentzat. Kolore bakoitzan planeta bakoitzari dagokion errorea da: Merkurio (urdin ilunez), Artizarra (marroi argiz), Lurra (berdez), Marte (gorriz), Jupiter (more argiz), Saturno (marroi ilunez), Urano (urdin argiz), Neptuno (laranja argiz), Pluto (morez)

7.5. Laburpena

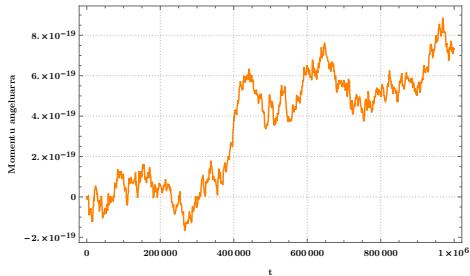
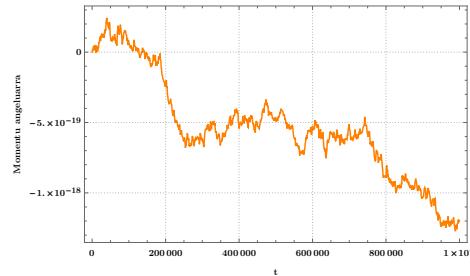
Kapitulu honetan, eguzki-sistemaren integrazioarako implementazio berri bat aurkeztu dugu. Inplementazio berria, egungo metodo simplektiko eraginkorrenekin alderatu dugu eta emaitzak, baikorrak izateko modukoak iruditu zaizkigu. Oinarritzko azterketa egin badugu ere, agerian geratu da, metodoak etorkizunean izan dezakeen potentziala. Dudarik gabe, etorkizun hurbilean azterketa sakonagoa egin beharko litzateke, metodoaren propietate onak baiezatzeko. Horien artean, honako ideiak aipatuko ditugu:

1. 80-bitako doitasuneko (*long double*) integrazioaren konputazioa: kasu honetan, $\varphi_{h/2}$ fluxuaren aplikazioa 128-bitako doitasunean egitea komeniko litzateke.



7.9. Irudia: Orbita eliptikoaren a erdi-ardatz nagusiaren eta e eszentrikotasunaren errorean estimazioak erakutsi ditugu. (a) eta (b) irudietan, $s = 8$ ataletako RKIK metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 10,667$ urrats luzerarekin integratuz. (c) eta (d) irudietan, ABAH1064 Splitting metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 4.76$ urrats luzerarekin integratuz. Kolore bakoitzaz planeta bakoitzari dagokion errorea da: Merkurio (urdin ilunez), Artizarra (marroi argiz), Lurra (berdez), Marte (gorriz), Jupiter (more argiz), Saturno (marroi ilunez), Urano (urdin argiz), Neptuno (laranja argiz), Pluton (morez)

2. Kepler-en fluxuaren implementazioaren hobekuntzak: oraingo implementazioaren iterazio guztietan ez dugu aurreko iterazioen informazio erabilten. Iterazio berri baten kalkuluan, aurreko iterazioren egoeretatik abiatuta, nahikoa izango litzateke Newton-en iterazio bakarra egitea.
3. Eguzki sistemaren eredu konplexuagoarekin (ilargia eta zenbait asteroide, erlatibilitate efektua, eguzkiaren atxamatendua, ...), RKIK metodoak eraginkorragoak bilakatzea espero da. Eguzki-sistemaren eredu konplexuagoa aplikatzen den neurrian paralelizazioak abantaila handiagoa suposatuko du. Era berean, iterazio gehienak problemaren eredu simple batekin, doitasun baxuan kalkula daitezke eta bukaerako iterazio pare bat eredu osoarekin,

(a) Momentu angeluarra $h = 9.0$.(b) Momentu angeluarra $h = 10.63$

7.10. Irudia: Momentu angeluarren errore erlatiboaren eboluzioa erakutsi dugu. RKIK ($s = 8$) metodoa integratu dugu $h = 9.0$ eta $h = 10.63$ urrats luzerarekin.

doitasun altuan.

4. Eraginkortasuna hobetzeko, Jacobiarraren hurbilpen simple baten erabilera (puntu finkoaren eta Newton-en arteko algoritmo eraginkorra).

IV. Atala

Eztabaida eta ondorioak.

8. Kapitulua

Eztabaida

Kapitulu honetan, ikerketan zehar garrantzi berezia izan duten gaiak bildu ditugu. Eguzki-sistemaren simulazioetarako eta efemerideen kalkulutarako erabiltzen diren implementazioen laburpena eman dugu. Ikerketaren lehen urratsean eta gero baztertu genuen planteamenduaren azalpenak eman ditugu. IRK implementazioaren oinarriak erabakitzeko, aztertutako aukerak deskribatu ditugu. Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa, atalen hasieraketan aplikatzeko aukera deskribatu dugu. Zenbakizko integrazioetan, paralelizazioa aplikatzeko zaitasunak azpimarratu ditugu. Azkenik, implementazioa N -gorputzen beste integrazio batzuetan aplika daitekeen aztertu dugu.

8.1. Eguzki-sistemaren integrazio luzeak

Gure helburua eguzki-sistemaren epe luzeko eta doitasun handiko implementazio eraginkorra proposatzea da. Atal honetan, egungo eguzki-sistemaren simulazioetarako erabiltzen diren metodo eta implementazioen laburpena egingo dugu.

Implementazioen garapena

Astronomi arloaren ikerketetan, eguzki-sistemaren eredu errealisten integrazio luzeak konputatzen dituzte. A. Morbidellik [90], eguzki-sistemaren zenbakizko integraziotarako implementazioen azterketa egin zuen: urteak aurrera joan ahala, eguzki-sistemaren ereduak gero eta konplexuagoak bilakatzen dira, eta integrazio tartea handiago da. Garai hauek bereizten ditu:

1. Garai klasikoa

90. hamarkada artekoa, urrats luzera aldakorreko integratzaileak erabiltzen dira: Runge-Kutta (Dormand et al. 1987), Bulirsch and Stoer (1966), Radau

(Everharht, 1985), eta Störmer (1990). Garai honetan, integrazio tarteak ($10^4 - 10^6$) urte artekoak dira.

2. Garai simplektikoa

Wisdom eta Holman-en [108, 1991] lanarekin, eguzki-sistemaren azterketarako integratzaile sinpletikoen erabilera zabaldu zen. Garai honetan, ($10^8 - 10^9$) urte arteko eguzki-sistemaren integrazioak egin ziren.

3. Garai estatistikoa

Planeten, eta asteroideen edota meteoritoen moduko gorputz txikien arteko kolisiotik gertuko egoerak kalkulatzen dituzten algoritmoak garatu ziren. Implementazio berri hauetan, milaka gorputzen integrazio azkarra egin daiteke. Asteroide eta meteoritoen orbiten distribuzio azterketa estatistikoak egin zitzuten.

4. Planeten sorrera garaiko azterketak

Garai honetan, eguzki-sistemaren sorrerari buruzko simulazioak nagusi dira; masa handiko gorputzen arteko kolisiotik gertuko egoerak gertatzen diren problemak konputatzen dira.

Astronomi arloko eguzki-sistemaren integrazioetarako, nagusiki bi integratzaile famili bereiz daitezke [64]; metodo simetrikoak eta simplektikoak. Bestalde, integrazio metodo orokorrak, efemerideen konputazioetarako aplikatzen dira.

1. Metodo simetrikoak

Metodo simetrikoen artean nagusiena, 4 ordenako *Hermite* integratzailea [3] dugu. Urrats luzera tamaina aldakorreko integratzaile da. *Hermite* integratzailea konputazionalki garestia da eta gorputz kopuru handia duten eta kolisiotik gertuko egoerak maiz gertatzen diren problemetan aplikatzen da; esate baterako, eguzki-sistemaren sorreraren azterketarako.

2. Metodo simplektikoak

Egungo eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioetarako, integratzaile sinpletikoak nagusitu dira.

3. Metodo orokorrak

Efemerideen doitasun altuko integrazioetarako, metodo orokorrak erabilten dituzte: *Multistep Adams* metodoa (NASA), *Adams-Cowell* metodoa (IMCCE, Paris Observatory) eta *Radau* metodoa (IAA, St. Petersburg).

Metodo simplektikoak

Wisdom eta Holman-en [108, 1991] eguzki-sistemaren epe luzeko simulazioetarako integratzaile simplektikoak (*WH*) arrakasta izan zuen. Eguzki-sistema, mugimendu perturbatua duen sistema dinamikoa da eta ezaugarri honi egokitutako integratzaile eraginkorra garatu zuten. Jacobi koordenatuak aplikatuz, N-gorputzen problemaren Hamiltondarra, bi zatitan banatu zuten,

$$H(q, p) = H_K(p) + H_I(q), \quad H_K \gg H_I,$$

non H_K , Hamiltondarraren alde Kepleriarra (planeten eguzkiarekiko mugimendu Kleperiarra) eta H_I , Hamiltondarraren perturbazioa (planeten arteko interakzioak) diren. Integrazioaren urrats bakoitzean, Hamiltondar bakoitzaren soluzioa tartekatuz, problema osoaren soluzioa lortzen da.

WH implementazioaren erabilgarritasuna mugatua da. Batetik, izar anitzeko planeten sistemak edo planeta-ilargiak sistemak integratzeko ez da egokia. Bestetik, *WH* metodo simplektikoa denez, urrats luzera finkoa aplikatu behar da eta hau, gorputzen arteko kolisiotik gertuko egoerak dituzten problemak modu eraginkorrean integratzeko eragozpen bat da. Arazo hauek gainditzeko, hurrengo urteetan algoritmo honen aldaerak proposatu dira.

Levinson eta Duncan-ek [84, 1994], *WH* implementazioa, integratzaile ez simplektiko batekin konbinatu zuten, kolisiotik gertuko egoeren kalkulua hobetzeko. *SWIFT* paketean, *RMVS3* izeneko integratzailea implementatu zuten. Duncan, Levinson eta Lee-k [34, 1998], koordenatu heliozentrikoak erabiliz, Hamiltondarra beste modu honetan banatu zuten,

$$H(q, p) = H_K(p) + (H_C(p) + H_I(q))$$

eta kolisiotik gertuko egoerei, urrats luzera txikituz aurre egin zioten. Implementazio honek, *SYMBA* izena du. Chambers [25], koordenatu heliozentrikoetan oinarritu zen eta kolisiotik gertuko egoerak gertatzen diren uneetan, *WH* implementazioa, beste integrazio metodo batekin (Bulirsch-Stoer metodoa) konbinatu zuen. Implementazio honek, *MERCURY* izena du. Kvaerno eta Leimkuhler [76] eta beste autore batzuk ere, antzeko ideiak landu dituzte.

Wisdom eta Holmanek proposatutako Hamiltondarraren banaketa, (2.21) *Leapfrog* metodoaren bidez integratzen da eta beraz, $p = 2$ ordenako da. Ordena altuagoko ($p > 2$) metodo simplektikoak definitzeko, koefiziente negatiboak erabili behar zirela uste zen [116, 82] eta modu honetan definitutako metodoak, ez dira *Leapfrog* metodoa baino eraginkorragoak.

McLachlan-ek [88, 1995] eta Laskar-ek [82, 2001] koefiziente negatiboen arazoa gainditu zuten eta koefiziente positiboekin definitutako ordena altuko splitting eskemak aurkitu zituzten. Berriki, Blanes-ek [16, 2012] ordena altuko splitting eskema eraginkorrak aurkitu ditu.

Hernandez eta Bertschinger-ek [57, 2015] N -gorputzen problema grabitazionala eta kolisiotik gertuko egoerak integratzeko, 2 ordenako metodo simplektiko berri bat proposatu dute. Hernandez eta Bertschinger-ek [57] koordenatu cartesiarretan oinarrituz, N -gorputzen problema 2-gorputzen azpiproblemetan banatzen dute.

Konposizio eta splitting metodoak

Konposizio metodoak, era honetako Hamiltondar sistemak integratzeko aplika daitezke,

$$H(q, p) = T(p) + Uq.$$

Konposizio metodoa, eguzki-sistemaren eredu grabitazionalari aplikatzerakoan oso eraginkorra da, baina eredu konplexuagoetarako bere abantaila galtzen du. Batetik, gorputzen kopurua handitzen bada bere eraginkortasuna gutxitzen da eta bestetik, beste indar ez grabitazionalak (erlatibilitate efektua,...) ezin daitezke aplikatu.

Splitting metodoak, era honetako Hamiltondar sistemak integratzeko aplika daitezke,

$$H = H_A + \epsilon H_B, \quad (8.1)$$

non H_A eta H_B independenteki integratu daitezkeen.

Eguzki-sistemaren eredu errealistetan, hainbat indar ez grabitazional modu honetan gehitzeko, zaitasunak izan ditzakegu. Laskar-ek [80, 2011], epe luzeko zenbakizko integratziorako, eguzkiaren erlatibilitate efektua ($1/c^2$ ordenakoa) kontsideratu zuen, Saha eta Tremaine-ek [101] finkatutako teknika aplikatuz. Teknika honen bidez, Hamiltondar banagarriei egokitzen zaien erlatibilitate efektuaren espresioa lortzen da eta gainera modu eraginkorrean kalkulatzen da. Baino splitting metodoetan, beste planeten erlatibilitate efektuak ezin daitezke erabili. Adibidez, bi planeta handienen (Jupiter eta Saturno) erlatibilitate efektua ere kontutan hartuko balira, ekuazioak ez dira gehiegi konplikatzen eta integrazio hobea lor daiteke, errorea txikituz.

Eguzki-sistemaren integrazioetarako, (8.1) Hamiltondarraren banaketa, Jacobi koordenatuak edo heliozentrikoak aplikatuz lortzen da. Koordenatu cartesiarrak, ezin daitezke erabili.

IRK metodoekin lan egiteko ordea, ez daukagu halako mugarik. Ekuazio difrentzial orokorreai aplika dakizkienez, askatasun osoa dugu behar diren ekuazioak erabiltzeko eta interesatzen zaigun koordenatu sistema aplikatzeko.

8.2. Eredu deskonposaketa

IRK metodoen implementazioen azterketaren hasieran, eredu deskonposaketan oinarritutako ideia ikertu dugu. Atal honen bukaeran emango ditugun arrazoien-gatik, beste bide batzuk ikertzea zuzenago dela ikusi dugu eta planteamendu hau alde batera utzi dugu. Dena den, planteamendu honen laburpen bat emango dugu eta implementazio bide honetan sortutako hainbat ideia interesgarri jasoko ditugu.

Eguzki-sistemaren eredua bi zatitan bana daiteke: problema simplea (konputazionalki merkea) eta problema konplexua (konputazionalki garestia). Newton sinplifikatuaren iterazio berezi bat aplikatu dugu, problema konplexuaren baliozatzen kopurua txikitzeo eta era honetan, implementazio eraginkorra lortzeko. Newton sinplifikatuaren iterazio berezi honetan, ekuazio-sistema lineala LU deskonposaketaren bidez askatu beharrean, puntu-finkoaren bidez ebatziko dugu.

Implementazioa

Eguzki-sistema, perturbatutako mugimendu Kepleriar gisa har daiteke,

$$f(y) = k(y) + \epsilon g(y), \quad g \ll k. \quad (8.2)$$

$k(y)$ sistema dinamikoaren alde sinplifikatua da eta konputazio kostu txikia du. $g(y)$, ordea, sistemaren alde konplexua da eta konputazio kostu handia du. (8.2) ekuazio diferenzialak IRK metodoen bidez integratzeko, atalen ekuazio-sistema implizitua ebatzi behar da:

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j).$$

Ekuazio implizituaren sistema hau, honako iterazioaren bidez ebatza proposatuko dugu:

$$\begin{aligned} k &= 1, 2, \dots \\ Y_i^{[k]} &= y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} (k(Y_j^{[k]}) + g(Y_j^{[k-1]})) \end{aligned} \quad (8.3)$$

Iterazio hau aplikatzea, Jacobiaren hurbilpentzat, $J_i = \partial k / \partial y(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$ hartzen duen Newton sinplifikatua aplikatzearen baliokidea da. 27 algoritmoa.

ritmoan, iterazioa aplikatzeko zehaztasun gehiago emango ditugu,

```

for  $n \leftarrow 1$  to endstep do
    Hasieraketa  $Y_i^{[0]}, W_i^{[0]}$ ;
    k=1;
    Askatu  $Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + W_i^{[k-1]}$  ;
    while (konbergentzia ez lortu) do
        k++;
         $W_i^{[k-1]} = h \sum_{j=1}^s a_{ij} g(Y_j^{[k-1]})$ ;
        Askatu  $Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + W_i^{[k-1]}$  ;
    end
     $y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_i f(Y_j^{[k]})$  ;
end

```

Algoritmoa 27: Meta-algoritmoa

Urrats bakoitzean, hainbat aldiz $k = 2, 3, \dots$ balioentzat ekuazio-sistema inplizitua askatu behar da eta horretarako, metodo egokiena aplikatzeko askatasuna dugu. Pentsa liteke, problema zurruna ez bada puntu-finkoaren bidez askatzea eta problema zurruna bada, berriz, Newton sinplifikatuaren iterazioaren bidez.

Barne ekuazio-sistema,

$$Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + W_i^{[k-1]},$$

puntu-finkoaren iterazioaren bidez askatzeko, 28 algoritmoaren barne-iterazioa era honetan aplikatuko dugu:

```

 $l = 0;$ 
 $Y_i^{[k,0]} = Y_i^{[k-1]}$ ;
while (konbergentzia ez lortu) do
     $l = l + 1$ ;
     $K_i^{[k,l]} = k(Y_i^{[k,l-1]})$ ;
     $Y_i^{[k,l]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j^{[k,l]} + W_i^{[k-1]}$ ;
end

```

Algoritmoa 28: Barne-iterazioa: puntu-finkoaren iterazioa

Orokorpenea

Eredu konplexuak

Aurreko atalean, maila bakarreko eredu deskonposaketa aztertu dugu. Ideia orokortuz, eredu deskonposaketa maila ezberdinetan aplika daiteke. $\dot{y} = f(y)$

problema emanik,

$$\begin{aligned}
 1. \text{ maila} \quad & \left\{ \begin{array}{l} \text{Eredu osoa. } f(y) \\ \text{Eredu simplea. } \tilde{f}(y) \end{array} \right. \Rightarrow f = \tilde{f} + (f - \tilde{f}) \\
 2. \text{ maila} \quad & \left\{ \begin{array}{l} \text{Eredu osoa. } \tilde{f}(y) \\ \text{Eredu simplea. } \tilde{\tilde{f}}(y) \end{array} \right. \Rightarrow \tilde{f} = \tilde{\tilde{f}} + (\tilde{f} - \tilde{\tilde{f}}) \\
 & \dots
 \end{aligned}$$

Adibidea. Eguzki-sistemaren eredu konplexuaren ekuazio-sisteman, alde Kepleriarra eta perturbazio maila ezberdinak bereiz daitezke. Algoritmoa, deskonposaketaren maila bakoitzari modu errekurtsiboan aplika daiteke. Demagun, eguzki-sistemaren problemaren ekuazio diferentzial hauek ditugula,

$$\dot{y} = f(y), \quad f(y) = k(y) + g(y) + r(y),$$

non

$k(y)$: kepleriarra.

$g(y)$: planeten arteko grabitazio interakzioak.

$r(y)$: planeten eguzkiarekiko erlatibilitate efektua.

Meta-algoritmoa modu honetan aplika daiteke,

1. maila

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j).$$

2. maila, $k = 1, 2, \dots$

$$Y_i^{[k]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k(Y_j^{[k]}) + \delta_1^{[k-1]},$$

$$\text{non } \delta_1^{[k-1]} = h \sum_{j=1}^s a_{ij} (g(Y_j^{[k-1]}) + r(Y_j^{[k-1]})).$$

3. maila, $, l = 1, 2, \dots$

$$Y_i^{[k,l]} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \left(k(Y_j^{[k,l]}) + g(Y_j^{[k-1,l]}) \right) + \delta_2^{[l-1]},$$

$$\text{non } \delta_2^{[l-1]} = h \sum_{j=1}^s a_{ij} r(Y_j^{[k-1,l-1]}).$$

Problema independenteak

Batzuetan, problemaren eredu sinplifikatua, azpiproblema independentetan bana daiteke,

$$f \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1(y_1) \\ k_2(y_2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1(y_1, y_2) \\ g_2(y_1, y_2) \end{pmatrix}.$$

Azpiproblema bakoitzari dagokion barne-iterazioak independenteak dira eta paraleloan kalkula daitezke. Eguzki-sistema eredu grabitacionala, azaldutakoaren adibide argia da; planeta bakoitzaren $k_i(y)$ eguzkiarekiko interakzioa, azpiproblema independentea da. Zenbakizko esperimentuetarako aukera eraginkorrena, eredu sinplifikatua bi azpiproblemetan banatzea dela konprobatu dugu: alde batean, barne-planeten eredu sinplifikatuak osatutako azpiproblema eta beste aldetik, kanpo-planeten eredu sinplifikatuak osatutakoa.

Tolerantzia aldakorra

Kanpo eta barne-iterazioetarako geratze irizpide berdinak definitu ditugu. Kanpo-iterazioetarako, tolerantzia finkoa erabili dugu eta barne-iterazioetarako, ordea, tolerantzia aldakorra. Tolerantzia aldakorra, kanpo-iterazio (konputazionalki garrestia) bakoitzarentzat, barne-iterazio (konputazionalki merkea) kopuru nahikoak eta beharrezkoak eman daitezen, definitu dugu.

Eragozpenak

Esan dugunez, planteamendu honetan Newton sinplifikatua aplikatu dugu eta ekuazio-sistema lineala LU deskonposaketaren bidez askatu beharrean, puntu-finkoaren iterazioaren bidez askatu dugu. Planteamendu honi IRK-Newton sinplifikatuaren implementazio estandarrarekiko, hiru desabantaila aurkitu dizkiogu:

1. Barne kalkuluen doitasuna.

Planteamendu honen barne-iterazioak, implementazioaren oinarrizko doitasunean kalkulatu behar dira. IRK-Newton sinplifikatuaren implementazioaren eragiketa konplexuenak, doitasun txikiagoan kalkula daitezke [9].

2. Jacobiarraren balioztapena.

Planteamendu honetan, Jacobiarra iterazio bakoitzean aldatzen denez, iterazio guztietai balioztatu behar da. IRK-Newton sinplifikatu estandarrean, Jacobiarra urrats bakoitzean behin bakarrik kalkulatu behar da.

3. Ereduen deskonposaketa.

Ereduen deskonposaketak, nolabaiteko konplexutasuna gehitzen du. Hiru eredu ezberdin bereizi behar ditugu: eredu osoa $f(y)$, eredu simplifikatua $\tilde{f}(y)$ eta perturbazioa $g = f(y) - \tilde{f}(y)$.

8.3. IRK implementazioaren oinarriak

IRK implementazioan, ekuazio-sistema iterazio metodo bat aplikatuz askatu behar da. Funtsezkoa da, iterazioaren atalen hasieraketa eta geratze irizpide sendoak aplikatzea. Laburki, gure lanean aztertutako aukera ezberdinak deskribatuko ditugu.

Atalen hasieraketa

Iterazio metodoetan atalen hasieraketa kalkulatzeko teknika ezberdinak ikertu ditugu.

1. Metodo esplizituak.

Atalen hasieraketa metodo esplizitu bat aplikatuz lor daiteke. Hurbilpen merkea lortze aldera, ordena txikiko metodoak aplikatu ditugu: Euler $\mathcal{O}(h)$ eta Euler hobetuaren $\mathcal{O}(h^2)$ metodoa. Atalen hasieraketa metodo hauetan, ekuazio diferencialaren balioztapena beharrezkoa da eta era honetan aplikatu ditugu:

Euler :

$$Y_i = Y_{i-1} + h(c_i - c_{i-1})f(Y_{i-1}).$$

Euler hobetua :

$$Y_i = Y_{i-1} + h(c_i - c_{i-1})f(k_i),$$

$$\text{non } k_i = Y_{i-1} + \frac{h}{2}(c_i - c_{i-1})f(Y_{i-1}).$$

2. Kepler-en fluxua.

Eguzki-sistema, perturbatutako sistema Keplériarra denez, atalak Kepler fluxuaren bidez hasieratu daitezke. Kepler fluxuaren funtazioak, $y(t_n)$ une bateko kokapen eta abiadurak emanik, Δt_n denbora igarotakoan kokapen eta abiadura zehatzak itzultzen ditu,

$$\text{Keplerflow}(\Delta t_n, y(t_n)) \rightarrow y(t_n + \Delta t_n).$$

Beraz, y_n egoeratik abiatuta, atal bakoitzari dagokion hasieraketa,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y(t_n + hc_i), \quad i = 1, \dots, s,$$

Kepler fluxua $\Delta t_n = hc_i$ denbora aurrera eginez lortuko dugu.

3. Interpolazio polinomioak.

Aurreko urratseko ataletako informazioa erabiliz, urrats berriaren atalen hasieraketa lortzen dugu. Problema ez-zurrunetarako interesgarria da. Era honetako hasieraketa merkea da, ez baita funtziō balioztapen berririk egiten. Era honetan aplikatzen da,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y_n + h \sum_{j=1}^s \lambda_{ij} f(Y_{n-1,j}),$$

non λ_{ij} aurre-kalkulatutako interpolazio koefizienteak diren. Interpolazio metodo estandarrarekin, urrutien dagoen ataletarako hasieraketa txarra lortzen da eta atal askotako metodoentzat, arazo hau, eragozpen handia izan daiteke.

Bide honetatik, teknika aurreratuagoak ere aztertu ditugu (maila txikiko polinomioen bidezko hasieraketak, ...). Era berean, B-Serieak izeneko teknikan [26] oinarrituz, interpolazio estandarra [77] hobetzeko saiakera egin dugu baina ez dugu arrakastarik izan.

Problema ez-zurrunetarako, interpolazio polinomioen bidezko hasieraketa ona eta merkea lortzen da. Problema zurrunetarako, ordea, atalak aurreko urratseko soluzioarekin hasieratuko ditugu,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y_n, \quad i = 1, \dots, s.$$

Geratze irizpidea

Iterazio metodo bat aplikatzeko, geratze irizpide sendoa finkatzea funtsezkoa da. Iterazioak, biribiltze errorearen eragina azaltzen denean geratu behar dira. Batez, iterazioak beranduegi geratzen baditugu, alferrikako iterazioak emango ditugu, eraginkortasunaren kalterako. Bestetik, iterazioak goizegi geratzen baditugu, biribiltze errorea handitu edota trunkatze errorea eragin dezake.

Geratze irizpide estandarrak aplikatzerakoan, hainbat arazo aurkitu ditugu eta ondorioz, geratze irizpide berri bat definitzeko beharra ikusi dugu. Geratze irizpide berria definitzeko, aukera ezberdinak aztertu ditugu eta eskuartean ibili ditugun bertsio nagusienak azalduko ditugu.

Norma

Iterazio bakotzaren hobekuntza ($\Delta^{[k]}$) neurtzeko, norma ezberdinak aplikatu daitezke. Honakoa da, Hairer-ek bere IRK implemenazioaren geratze irizpidean aplikatzen duen norma,

$$\Delta^{[k]} = \max_{i=1,\dots,s} \|Y_i^{[k]} - Y_i^{[k-1]}\|_\infty.$$

Norma hau zalantzan jarri dugu eta iterazioaren hobekuntza hobeto neurtzen duen norma finkatzen saiatu gara. Honako aukerak aztertu ditugu:

1. Lehen bertsioa

Diferentziak, modu erlatiboan neurtzeko beharrak bultzatuta, norma era honetan definitu dugu,

$$\Delta = \max_{1 \leq j \leq d} \frac{\max_{1 \leq i \leq s} |\Delta Y_i^j|}{(\max_{1 \leq i \leq s} |Y_i^j|) + \delta},$$

non $\delta \approx 10^{-20}$, zatitzalea zero ez izateko finkatzen dugun balio txikia eta $y = (y^1, \dots, y^d)$ den.

2. Bigarren bertsioa

Kokapenen ($Q_i \in \mathbb{R}^d$) eta abiaduren ($V_i \in \mathbb{R}^d$) izaera ezberdina dela jabetuta, norman bi kontzeptu hauek banatu ditugu. $Y = Y^{[k]}$, eta $\tilde{Y} = Y^{[k-1]}$ notazioa finkatuta,

$$\Delta =$$

$$\max \left(\max_{1 \leq j \leq d} \frac{\max_{1 \leq i \leq s} \|Q_i^j - \tilde{Q}_i^j\|^2}{\max_{1 \leq i \leq s} \|Q_i^j\|^2}, \max_{1 \leq j \leq d} \frac{\max_{1 \leq i \leq s} \|V_i^j - \tilde{V}_i^j\|^2}{\max_{1 \leq i \leq s} \|V_i^j\|^2} \right),$$

non,

$$Y = \begin{pmatrix} Q_1^1 & \dots & Q_1^d & V_1^1 & \dots & V_1^d \\ Q_2^1 & \dots & Q_2^d & V_2^1 & \dots & V_2^d \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_s^1 & \dots & Q_s^d & V_s^1 & \dots & V_s^d \end{pmatrix} \quad \tilde{Y} = \begin{pmatrix} \tilde{Q}_1^1 & \dots & \tilde{Q}_1^d & \tilde{V}_1^1 & \dots & \tilde{V}_1^d \\ \tilde{Q}_2^1 & \dots & \tilde{Q}_2^d & \tilde{V}_2^1 & \dots & \tilde{V}_2^d \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{Q}_s^1 & \dots & \tilde{Q}_s^d & \tilde{V}_s^1 & \dots & \tilde{V}_s^d \end{pmatrix}.$$

3. Hirugarren bertsioa

Iterazioaren hobekuntza, norma jakin bat aplikatuz zenbaki eskalar bakarra-rekin neurtu beharrean,

$$\Delta^{[k]} = |Y^{[k]} - Y^{[k-1]}| \in \mathbb{R}^{sd} \tag{8.4}$$

matrizea erabiliko dugu. Modu honetan, geratze irizpidea normaren independentea izango da eta gainera, geratze irizpide segurua eraikitzeo aukera emango digu.

Gure geratze irizpidea

Geratze irizpidearen abiapuntua Hairer-en geratze irizpidea izan da,

$$\Delta^{[k]} = 0 \text{ edo } \Delta^{[k]} \geq \Delta^{[k-1]}.$$

Geratze irizpide hau hobetzeko proposamen batzuk garatu ditugu,

1. Lehen bertsioa

Hairer-ek definitutako geratze irizpidea, batzuetan goizegi geratzen da eta ziurtasuna handitu beharra dago. Horregatik, geratze irizpidean, $k - 2$. iterazioaren informazioa erabiltzea aztertu dugu,

$$(\Delta^{[k]} = 0) \text{ edo } (\Delta^{[k]} \geq \Delta^{[k-1]} \text{ eta } \Delta^{[k]} \geq 0.81 * \Delta^{[k-2]}).$$

2. Bigarren bertsioa

Bertsio honetan, $k - 3$. iterazioaren informazioa ere erabiliz saiakera berria proposatu dugu:

$$(\Delta^{[k]} \leq tol) \text{ edo } (zat^{[k]} \geq koeff * \max(zat^{[k-1]}, zat^{[k-2]})),$$

non $zat^{[k]} = \Delta^{[k]} / \Delta^{[k-1]}$, $tol \approx 10^{-16}$ eta $koeff = 10$ den.

3. Hirugarren bertsioa

$$(\Delta^{[k]} \leq tol) \text{ edo } \left(\frac{zat^2}{(1 - zat)} \Delta^{[k-1]} \leq tol \right) \text{ edo } \left(\frac{zat}{(1 - zat)} \Delta^{[k-2]} \leq tol \right),$$

non $zat = \max(zat^{[k-1]}, zat^{[k-2]})$, $tol \approx 10^{-16}$ den.

Geratze irizpide honetan, iteraziotik irteten denean, $z \geq 1$ betetzen bada,

- (1). $\Delta^{[k]} > c tol \rightarrow$ konbergentzia arazoak (exekuzioa geratu),
- (2). $\Delta^{[k]} \leq c tol \rightarrow$ birbiltze errorea (exekuzioa jarraitu),

non $c \approx 10^4$ konbergentzia koefizientea den.

4. Laugarren bertsioa

Azkenik, honakoa proposatu dugu: (8.4) $\Delta^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ izanik, iterazioak $k = 1, 2, \dots$ jarraitzea, $\Delta^{[k]} = 0$ bete arte edo honako baldintza bi iterazio jarrietan betetzen den artean,

$$\forall j \in \{1, \dots, sd\}, \quad \min \left(\{|\Delta_j^{[1]}|, \dots, |\Delta_j^{[k-1]}|\} / \{0\} \right) \leq |\Delta_j^{[k]}|.$$

Geratze irizpide honetan, iterazioak bukatu ondoren $\exists j, \Delta_j^{[K]} \neq 0$ betetzen bada, orduan urratsa onargarria den ala ez erabaki behar dugu.

8.4. Doitasun altuko konputazioak

Konputazio zientzian, nagusiki doitasun bikoitzeko aritmetika (64-bit) aplikatzen da baina eguzki-sistemaren epe luzeko integratorako, doitasun bikoitza ez da nahikoa. Jarraian, zenbakizko integracio hauetan [79], doitasuna hobetzeko bi bide azalduko ditugu.

80-biteko doitasuna

Egungo IEEE-754 (2008) estandarrak, koma-higikorreko hiru formatu definitzen ditu: arrunta (32-bit), bikoitza (64-bit) eta laukoitza (128-bit). IEEE-754 (1985) estandar zaharrak, 80-biteko formatuaren (*double-extended* izenekoa) implementazioa aholkatzen zuen [94] baina egungo estandarretik kanpo utzi dute. 80-biteko doitasunak, 19 zifra hamartarreko doitasuna eskaintzen du.

C lengoaiaren *long double* datu motak, 80-biteko koma-higikorreko aritmetika sustatzen du. IA-32 koma-higikorreko eragiketa multzoak [91], 80-biteko zenbaki formatua onartzen du; 64-biteko mantisa eta 15-biteko esponentearekin. IA-64 eragiketa multzoak, 82-biteko formatu onartzen du; 64-biteko mantisa eta 17-biteko esponentearekin.

Intel x86 prozesadoreek, esaterako Intel Xeon Phi [27] doitasun arrunta eta bikoitza hardwarez implementatzen dute; laukoitza, softwarez; eta 80-biteko doitasuna ere hardwarez.

Laskar-ek [80, 79], eguzki-sistemaren epe luzeko zenbakizko integratorako, batura konpentsatua eta 80-biteko koma-higikorra erabili zituen. Integratzaille simplektikoa C lengoiaian berridatzi zuen, Intel-en 80-biteko aritmetika erabili ahal izateko. Era berean, efemerideen kalkuluetarako antzekoa gertatu da: EPM [96] (aplikazioa berridatzi zuten) eta INPOP [40] efemerideen kalkulutarako, 80-biteko aritmetika erabiltzen dute.

Honek, astronomoentzat, soluzioen doitasuna hobetzeak duen garrantzia era-kusten digu. 128-biteko aritmetikaren implementazioa software bidezkoa da eta

erabiltzeko garestiegia. 80-biteko aritmetikarekin eta batura konpentsatuarekin, zifra hamartar batzuk irabazten dituzte, konputazio kostu nahiko txikiarekin.

80-biteko doitasuna abantailak ditu baina doitasun hau erabiltzeak, hainbat errezero sortzen ditu. *IEEE-754* estandarretik kanpo dago eta hardwarearen menpekoa da. Gainera, Laskar-en [80] zenbakizko integracioen arabera, konputazioak $x2$ garestitu zaizkio.

Doitasun nahasia

Azken urteetan, beharrezko doitasuna lortzeko, koma-higikorreko doitasun ezberdinak nahasteko joera dago.

Doitasun arrunteko aritmetikak (32-bit), doitasun bikoitzarekiko (64-bit) $x2$ aldeko eraginkortasun erratioa du [32]. Aplikazio batuetarako, doitasun arrunteko doitasuna nahikoa da eta beste batuetarako, konputazioaren funtsa doitasun arruntean egin daiteke eta galdu tako digituak modu merkean berreskuratu.

Doitasun laukoitza (128-bit), software bidez modu errazean implementatu daiteke. Doitasun laukoitzeko zenbaki bat, doitasun bikoitzeko bi zenbakiren bidez adieraz daiteke. Ideia da, konputazioa doitasun bikoitzean egitea eta doitasun laukoitzean integrazioaren kalkulu zehatz batzuk egitea. Zenbakizko integracioetarako batura konpentsatua, era honetan interpreta daiteke.

Batura konpentsatua merkea da. Eguzki-sistemaren gure implementazioan batura konpentsatua aplikatzeak abantaila berezia dakar: urrats bakoitzean gehitzen dugun balioa txikia denez, batura konpentsatuarekin zifra hamartar asko mantentzen ditugu.

8.5. Aldagai aldaketa

Atalen hasieraketa

Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa, atalen hasieraketa lortzeko aploka daiteke. Honako ekuazio diferentziala badugu,

$$\dot{y} = k(y) + \epsilon g(y, t),$$

non $k(y)$ alde Kepleriarri dagokion eta $g(y, t)$ perturbazioari. Alde Kepleriarren fluxua ezaguna dugu,

$$\begin{aligned}\varphi_{\Delta t}^k : \mathbb{R}^d &\longrightarrow \mathbb{R}^d \\ y_0 &\rightsquigarrow y_1.\end{aligned}$$

Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa aplikatzen badugu,

$$\begin{aligned} y(t_0 + \Delta t) &= \varphi_{\Delta t}^k(z(t_0 + \Delta t)), \quad y(t_0) = z(t_0), \\ z(t_0 + \Delta t) &= \varphi_{-\Delta t}^k(y(t_0 + \Delta t)), \end{aligned}$$

aldagai berriarekiko ekuazio diferenziala mantso aldatzen den funtzioa da,

$$\dot{z} = \epsilon r(z, t).$$

z aldagai berria erabiliz, atalen hasieraketa era honetan egin daiteke (8.1. irudia):

1. Y_{n-1} atalei, Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa aplikatu. Z_{n-1} aldagai berriarekiko atalak lortuko ditugu.

$$Z_{n-1,i} = \varphi_{-\Delta t}^k(Y_{n-1,i}), \quad i = 1, \dots, s.$$

2. Z_{n-1} atalak interpolatzuz, $Z_n^{[0]}$ hasieraketak lortuko ditugu.

$$Z_n^{[0]} = G(Z_{n-1}, h)$$

3. $Z_n^{[0]}$ ataletatik abiatuta aldagai aldaketa deseginez, $Y_n^{[0]}$ hasieraketak lortuko ditugu.

$$Y_{n,i}^{[0]} = \varphi_{\Delta t}^k(Z_{n,i}^{[0]}), \quad i = 1, \dots, s.$$

Ohiko polinomio interpolatzailaren bidez hasieraketa ona izateko, urratsa txikia izan behar du. Teknika hau erabiliz, interpolazioaren errorea $\mathcal{O}(\epsilon)$ mailakoa izango da eta urratsa handia erabili arren, hasieraketa ona izango dugu.

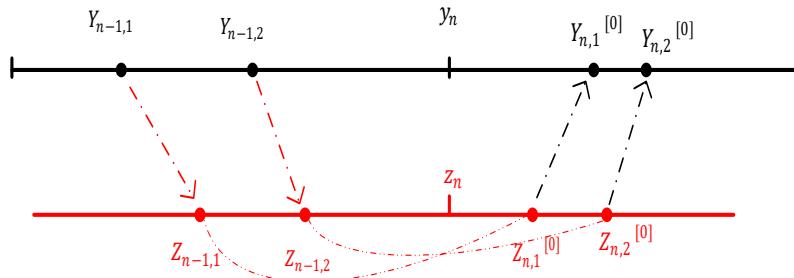
8.6. Paralelizazioa

Hasierako baliodun problemen integrazioetan

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \quad f : \mathbb{R}^{d+1} \longrightarrow \mathbb{R}^d, \quad y(t_0) = y_0, \quad (8.5)$$

denboran zehar zenbakizko soluzioa sekuentzialki lortzen goaz eta beraz, ez dago paralelizazioa modu zuzenean aplikatzerik. Hala ere, hainbat teknika proposatu dira [21], eta etorkizunean paralelizazio garapen berriak espero dira.

Saha eta Tremaineek [99], eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioetarako, metodo paraleloa proposatu zuten. Konputazio paraleloa lortzeko, integrazio tarteen



8.1. Irudia: Atalen hasieraketarako, Kepler fluxuan oinarritutako aldagai aldaketaren aplikazioa

(1-astea, 2-astea,...) integracioak prozesadoreen artean banatzen dituzte. On-doren, teknika hau garatuz, Laskar-ek [66] bere proposamen berria egin zuen. Hairer-ek [46], Hamiltdor sistematan implementazio hauen analisia egin zuen eta aplikatzeko hainbat eragozpen zeudela ondorioztatu zuen.

Ebatzi nahi den problemaren ekuazio diferenzialen balioztapena, konputazio-nalki garestia bada edota dimentsio handikoa, paralelizazioa beste maila batean aplika daiteke. Paralelizazioa aplikatzeko bide bat, dimentsio handiko ekuazio-sistemaren balioztapena, osagai independentetan banatzea eta hauen konputazioa, prozesadore batzuen artean modu paraleloan kalkulatzea da. Problema zurruna denean, metodo implizituak aplikatzen direnez, urrats bakoitzean, dimentso handiko ekuazio-sistemak ebatzi behar dira eta horretarako, paralelizazioan oinarritutako implementazio (*LAPACK*) eraginkorrik ditugu. Era berean, N-gorputzeko problemetan, N handia denean, gorputzen arteko interakzioak ($\mathcal{O}(N^2)$) kalkulatzeko paralelizazioan oinarritutako hainbat implementazio [11, 24, 33] aplika daitezke.

IRK metodoei dagokienez, $f(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$ ataletako funtzioko balioztapena paraleloan exekuta daiteke. Eguzki-sistemaren eredu errealistetan, f funtzioa konplexua izango da eta beraz, paralelizazioa aplikatzeak abantaila izango du. Bestalde, doitasun bikoitzeko integracioetarako, Gauss metodoaren implementazio estandar eraginkorrena, $s = 6$ atalekoa kontsideratzen da [54]. Eguzki-sistemaren integrazioarako gure implementazioa, ordea, $s = 8$ ataletako metodoa eraginkorra da eta honek, paralelizazioak abantaila handiago suposatzen du.

8.7. Implementazioaren erabilgarritasuna

Implementazioa, eguzki-sistemaren doitasun altuko epe luzeko integrazioetan aplikatzeaz gain, beste N-gorputzeko problema batzuetan aplikatzea eraginkorra izan daitekeen hausnartuko dugu.

Efemerideak

Eguzki-sistemaren efemerideek, eguzki-sistemaren eredu konplexuak eta epe tarte txikietarako (ehunka urtekoak) integrazioak konputatzen dituzte. Konputagailuen erabilera hasi aurretik, efemerideak teoria analitikoetan oinarritutako serie funtzioen bidez kalkulatzen ziren. Soluzio hauetan, Fourier-en serie trigonometriko luzeen ebaluazioa egin behar zen. 1960. hamarkadan, eguzki-sistemaren ezagutza hobetu zenean (espazio bidaia eta behatoki astronomikoen aurrerapenak medio), serie oso luzeak kalkulatu behar zituzten, eta orduan zenbakizko integrazioen metodoak, eraginkorragoak bilakatu ziren [70].

Eguzki-sistemaren gorputzen efemeride modernoak, aldaketa adierazten duten (3.5) ekuazio differentzialen zenbakizko integrazioaren bidez kalkulatzen dira. Integrazioaren hasierako balioak eta ereduaren parametroak, sateliteen bidez jasotako datuekin alderatzen dira.

Efemerideen soluzioak *Chebyshev* polinomio moduan adierazten dira. Zenbakizko integrazio hauetan, biribiltze errorea gai garrantzitsua da. 128-biteko aritmetikaren aukera baztertzen da, konputazioa oso garestia delako eta 64-biteko doitasuneko aritmetika hobetzen dituzten konputazionalki teknika merkeak, aplikatzen dira.

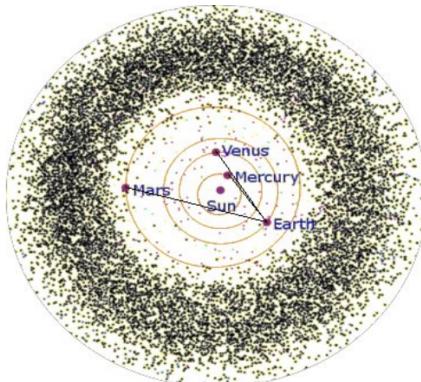
Efemerideetarako, eguzki-sistemaren eredu konplexua aplikatzen da. Gorputz nagusien arteko indar gravitacionalez gain, erlatibilitatea, asteroideek era gindako gravitazio indarrak, gorputzen formen eragina eta beste hainbat indar ez gravitacional kontutan hartzen dituzte. Mugimenduaren ekuazio differentzialak, era honetakoak izaten dira [39],

$$\ddot{x}_{\text{Planet}} = \sum_{A \neq B} \mu_B \frac{r_{AB}}{\|r_{AB}\|^3} + \ddot{x}_{GR}(\beta, \gamma, c^{-4}) + \ddot{x}_{AST,300} + \ddot{x}_{J_2}.$$

Hauek dira, ekuazio hauen konplexutasuna erakusten duten ezaugarri batzuk:

- Gorputz kopurua: 8 planetak, Ilargia, Pluton eta 300 asteroide. Asteroideek, bereziki Marte planetaren mugimenduarengan dute eragina (8.2. irudia) eta kontutan hartzekoak dira, barne-planeten mugimenduaren doitasun handiko emaitzak behar ditugunean. Bost asteroide nagusiren masak (Ceres, Pallas, Vesta, Iris eta Bamberga) Merkurio eta Pluton planeten mailakoak direnez, integrazioetan gehitzen dira. Gainontzeko asteroide txikien talde handiak, estimazioen bidez simulatzen dira.

- Erlatibilitatea efektua (GR): Einstein-Imfeld-Hoffmann, c^{-4} PPN hurbilketa.
- J_2 : eguzkia esferikoa ez izatearen eragina.
- Integrazioaren urrats luzera, $h = 0.055$ egunekoa da.



8.2. Irudia: Marte eta Jupiter planeten artean kokatzen dira asteroide kopuru handi bat.

Hiru efemerideak

Gaur-egun, eguzki-sistemaren planeten hiru efemeride kalkulatzen dira.

1. Jet Propulsion Laboratory (*EEBB*) NASA-ko erakundeak DE (Development Ephemerides) izeneko efemerideak konputatzen ditu.
1984.urtean kalkulatu zen lehen efemeridea (DE-200) eta 2.014.urteko *DE-430* [41] efemeridea publikatutako azkena da. Azken efemeride honen integrazio tartea, 1550 – 2650 artekoa izan da.
Zenbakizko integrazio metodoa, urrats luzera eta ordena aldakorreko *Multistep Adams* metodoa [75] (*DIVA/QIVA*) da. *QIVA* doitasun laukoitzeko (128-bit) bertsioari deitzen zaio: mugimenduaren ekuazioen Newton zatia, doitasun laukoitzean kalkulatzen da eta ekuazioaren gainontzeko zatia, doitasun bikoitzean.
2. Institut de Mécanique Céleste et de Calcul des Ephémérides (IMCCE, Paris Observatory) INPOP (Intégrateur Numerique Planétaire de l'Observatoire de Paris) izeneko efemerideak.
2.000.urteraino, efemerideen kalkulua teori analitikoetan oinarritzen zituzten. 2.003.urtean, zenbakizko integrazioaren bidezko lehen efemeridea kalkulatu zuten eta *INPOP13c* efemeridea [40, 2.014] publikatutako azkena da.

Zenbakizko integrazio metodoa: 12 ordenako *Adams-Cowell* metodoa da eta urrats finkoa aplikatzen dute.

Doitasuna: C lengoain implementatuta dago eta *Intel* makinetako 80-biteko doitasuna erabiltzen du [40].

3. Institute of Applied Astronomy (*IAA*, St. Petersburg), EPM (Ephemerides Planets-Moon) izeneko efemerideak.

1.980. urtetik aurrera, zenbakizko integrazioen bidezko efemerideak kalkulatu dituzte eta *EPM2013* efemeridea [96, 2.014] publikatutako azkena da.

Zenbakizko integrazio metodoa, *Everhart* izeneko *IRK* metodoa (Gauss-Radau) da. 23 ordenako metodoa eta urrats luzera finkoa aplikatzen dute.

Doitasuna. Implementazioak (ERA izeneko softwarea), *Intel* makinetako 80-biteko doitasuna erabiltzen du.

Satelite artifizialen problemak

Satelite artifizialen problemak, gure implementazioaren erabilgarritasunaren adibide argiak dira. Problema hauetan, eredu matematiko konplexuak erabiltzen dira, konputazionalki garestiak, eta sateliteen kokapenaren eboluzioa, zehaztasun handiarekin ezagutu behar da. Ondorioz, integrazio metodo eraginkorrik eta ordena altuko metodoak aplikatu behar dira [13].

Exoplanetak

Eguzki-sistemari egokitutako splitting metodo simplektikoak [113, 82], eguzki-sistemaren problemaren bi ezaugarriei abantaila atereaz diseinatzen dira. Lehenik, planeten eguzkiarekiko orbitak ia Kepleriarak dira. Bigarrenik, N-gorputzen problemaren formulazio Hamiltondarrean oinarritzen dira eta simplektikoak direnez, Hamiltondarra zehazki mantentzen dute.

Exoplaneta sistemak integratzeko metodo berriak behar dira [36]. Exoplaneten planeta-sistemen mugimenduak ez dira eguzki-sistemarenak bezain egonkorrik. Exoplaneta sistematan, eszentrikotasun handiko orbitak, periodo txikikoak, eta izar anitzeko planeta-sistemak aurkituko ditugu. Splitting metodo simplektikoak, ez dira ondo egokitzen era honetako sistemak integratzeko. IRK Gauss metodoa, edozein sistema integratzeko aplika daiteke. Eguzki-sistemaren ekuazioei aldagai aldaketa modu egokian aplikatuz, metodoa lehiakorra da eta exoplanetasistemak integratzeko ere, baliagarria izan daitekeela pentsatzen dugu. Dena den, exoplaneta sistemen datuen doitasuna txikia da eta beraz, ez du zentzu handirik doitasun handiko integrazioak egitea.

Molekulen sistema dinamikoak

Molekulen dinamikaren problema Hamiltondarra da eta ekuazio diferentzialak era honetan idatzi daitezke,

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= v_i, \\ \dot{v}_i &= g(q_i), \quad i = 1, \dots, N,\end{aligned}$$

non N partikulen kopurua eta $q_i, v_i \in \mathbb{R}^3$ diren.

Molekulen sistema dinamikoen integrazioak konputazionalki garestiak dira, N balioa handia delako, g funtziaren konplexutasunagatik eta integrazio epea luzea izaten delako. Molekulen sistema dinamikoen integrazioetarako, *Störmer-Verlet* (2.21) metodoa da erabilienetakoa. Sanz Sernak [86], molekulen sistema dinamikoen integratorako Gauss metodoen eraginkortasuna aztertu zuen, eta *Störmer-Verlet* metodoa eraginkorragoa zela ondorioztatu zuen. Molekulen sistema dinamikoen integrazioetarako gure planteamenduak, aplika ote daitekeen ez dago argi: aztertu egin beharko litzateke.

9. Kapitulua

Ondorioak.

Sarrera

Gure helburua, alde batetik, sistema Hamiltondarren doitasun altuko eta epe luzeko integratziorako, Gauss-en IRK metodo simplektiko inplizituen implementazio eraginkorra lortzea izan da, eta bestetik, garatutako implementazio eta ideiak eguzki-sistemaren simulazio eraginkorra lortzeko aplikatzea. Helburuak lortu ote diren eztabaidatuko dugu ondoren.

Batetik, lortutako implementazioen aldeko argumentuak azalduz, sistema Hamiltondarretako implementazio eraginkorrak lortu ditugula defenditzen dugu, eta epe luzerako doitasun altuko integratiotarako egokiak direla, biribiltze-erroreen hedapenari dagokionean optimotik gertu dagoela erakutsi baitugu, bai puntu finkoaren implementazioari dagokionean (5. kapitulua), eta baita era problema stiff-estarako Newton-en iterazioan oinarritutako implementazioari dagokionean (6. kapitulua).

Bestetik, eguzki-sistemaren simulazioen aplikazioari dagokionean, 7. kapituluan aurkeztutako lana, helmuga baino gehiago, etorkizunean egin beharreko ikerketa lan sakonagoaren abiapuntu gisa jotzen dugu. Gakoetako bat, integratu nahi den eguzki-sistemaren ereduaren konplexutasuna da. Eguzki-sistemaren ezagutza gero eta zehatzagoa denez [70], eredu gero eta konplexuagoak integratu nahi izango direla suposa daiteke. Zentzu honetan, integrazio metodoak problema konplexuen simulaziorako eraginkorra izan beharko luke. Edozein kasutan, RKIK metodoek ez dute mugatzen aplikatu nahi den problemaren formulazio matematikoa, ekuazioetan nahi diren efektuak gehitzeko aukera ematen dutelarik. Ezagutzen diren metodo simplektiko esplizituen (splitting eta konposizio metodoen) kasuan ez bezala.

Azkenik, algoritmo baten eraginkortasuna, konputagailu hardware ingurune bati lotuta dago eta urteekin alda daiteke. Hau da, hardware jakin batean eragin-

korra den algoritmoa, hardware berriagotan zaharkitura gera daiteke. Ezaguna da, egungo konputagailuen ahalmena konputazio paraleloan oinarritzen dela eta horregatik, ideia berritzairek aplikatu behar direla algoritmo eraginkorrik garatzeko [32]. Gure RKIK metodoak, metodo implizituak izanik, implementazio aukera asko eskaintzen dituenez, paralelizazio gaitasuna barne, zenbakizko integracioen arloan ideia berriak garatzeko metodo egokiak direla uste dugu.

Eguzki-sistemaren integrazorako implementazioa

Atal honetan, eguzki-sistemaren integracioen inguruko lanari buruz arituko gara. Azpimarratu behar dugu, RKIK metodoak implementatzerakoan, 5. kapituluan garatutako Runge-Kutta metodoa implizituena (IRK) implementazioaz baliatu garela. Epe luzeko integrazioetarako, metodoa simplektikoa izatea garrantzitsua da. Baina, IRK metodoaren formulazio estandarrak, koefizienteen adierazpen finitura dela eta, simplektikotasuna ez duenez ziurtatzen, IRK metodoa aplikatzeko formulazio berria proposatu dugu. Bestalde, implementazio estandarraren geratze irizpidea hobetu dugu. Guzti hau, 5. kapituluan garatu duguna, funtsezko da gure RKIK metodoaren implementazioaren eraginkortasun eta fidagarritasunerako.

Kepler-en fluxuan oinarritutako aldagai aldaketa, Runge-Kutta Implizitu Konposatua (RKIK) definitzeko aplikatu duguna, ebatzi nahi dugun problemari lotuta dago. Aldagai aldaketa hau, teknika orokor baten aplikazioa da; hau da, ekuazio differentzialetatik zati bat desagerrazteko helburuarekin definitutako aldagai aldaketa aplikatzearena. Aldagai aldaketa honekin, ekuazio differentzialetatik zehazki kalkula daitekeen zatia (alde Kepleriarrak) desagertzen da eta mantso aldatzen diren ekuazio differentzialak lortzen ditugu. Aldagai berriekiko ekuazio differentialek, hiru abantaila dituzte:

- Lehenik, trunkatze errore nagusiena ezabatu dugunez (alde Kepleriarrari dagokiona), integrazioan urrats luzera handiagoak erabil daitezke.
- Bigarrenik, aldagai aldaketa aplikatu ondorengo ekuazioen urratsaren gehikuntza

$$U_{j+1}^{j+1/2} = U_j^{j+1/2} + \delta_j$$

egiterakoan, δ_j doitasun arruntean kalkulatu arren, batura konpentsatua eraobiliz gero, $U_j^{j+1/2}$ balioen doitasun erlatiboa handiago izatea lortzen dugu, eta beraz, ondoren eta aurretik aplikatu beharreko $\varphi_{h/2}$ fluxuak doitasun altuagoan aplikatuz gero, azken emaitzen biribiltze-erroreen eragina txikitzea lor daitekeela erakutsi dugu.

- Hirugarrenik, puntu-finkoaren konbergentzia azkarragoa da aldagai berriei dagokien ekuazioetan, jatorrizko ekuazioetan baino.

Gure esperimentuetan konsideratu dugun eguzki-sistemaren eredu simplearen integrazioen esperimentuek splitting metodoak oso eraginkorrik direla erakutsi digute. Baino gorputz gehiago eta hainbat efektu (erlatibitate efektuak, gorputzak masa puntuak ez direla, mareen eragina, eguzkiaren erradiazioaren eragina...) kontutan hartzen dituen eredu errealistagotarako, RKIK metodoak splitting metodoekiko abantaila hauek izan ditzaketela azpimarratu nahi dugu:

1. Ordena altuko metodoak

Konposizio eta splitting metodoak, 10 ordenakoak dira gehienez. Gauss-en nodoetan oinarritutako IRK metodoei dagokienez, edozein ordenako metodoak eraiki daitezke. Doitasun bikoitzeko konputazioetarako, $s = 6$ ataleko ($2s = 12$ ordenako) metodoa konsideratzen da eraginkorrena [55], baina doitasun altuagoko konputazioetarako (64 baino bit gehiagoko koma higikorreko aritmetikekin lan egiten den kasurako), ordena altuagoko metodoak aplikatzea gomendagarria dela esan ohi da. Gauss-en nodoetan oinarritutako RKIK metodoei dagokienez, doitasun mistoko (64-bit/80-bit) implementazioaren kasuan, $s = 8$ ataleko metodoa $s = 6$ atalekoa baino eraginkorragoa izan daitekeela ikusi dugu. Espero liteke 80 biteko eta 128 biteko doitasunak konbinatzen dituen RKIK metodoen doitasun mistoko implementazioen kasuan, oraindik ordena altuagoko metodoak gailentzea RKIK metodoen artean, eta hauek, ordena baxuagokoak diren konposizio eta splitting metodoekiko abantaila hartzea.

2. Paralelizagarria

RKIK metodoen s -ataletako funtzioen ebaluazioak independenteak dira eta modu paraleloan exekuta daitezke. Eguzki-sistemaren eredu konplexuagoa kontutan hartzen den neurrian, paralelizazioak abantaila handiagoa suposatuko du, paralelizazioaren gainkarga erlatiboa txikiagotu egingo delako.

3. Hamiltondar orokorragoak RKIK metodoak, edozein sistema Hamiltondar perturbaturi aplika dakizkioke. Splitting metodoak, ordea, sistema Hamiltondar banagarrietan aplikatu ohi dira, eta perturbazio orokorragotarako aplikatzekotan metodoaren konplexutasuna areagotzearen truke lor liteke, eraginkortasunaren kaltetan.

4. Malgutasuna

Splitting metodoen konputazioak modu sekuentzialean exekutatzen dira eta konputazioak ez ditu aldaerak onartzen. RKIK metodoaren ekuazio inplizituak ebazteko, ordea, teknika ezberdinak konbina daitezke eta eraginkortasuna hobetzeko asko eskaintzen dizkigu. Adibidez, iterazio gehienak problemaren eredu simple batekin, doitasun baxuan kalkula daitezke [13] eta bukaerako iterazio pare bat eredu osoarekin, doitasun altuan.

5. Birparametrizazioa

Denbora birparametrizazioa, planetaren baten eszentrikotasuna handitzen denean edo bi gorputzen arteko gerturatzeak suerta daitezkeen eguzki-sistemaren simulaziotarako tresna baliagarria dela frogatu da [45, 97]. RKIK metodoetan denbora birparametrizazioa aplikagarria da. Splitting metodoetan, ordea, denbora birparametrizazioa aplikatzeko teknika bereziak aplikatu behar dira, metodoaren sinpletasunaren eta eraginkortasunaren kalterako.

Etorkizuneko lanak

Eguzki-sistemaren integrazio rako implementazioa garatzeko aukerak zehaztuko ditugu. Lehengo eginbeharra, eguzki-sistemaren eredu konplexuagoak integratzea da eta, zehazki, arlo honetan aplikatzen den eguzki-sistemaren ereduekin [80] gure implementazioaren jokabidea aztertzea. Eedu simplearekin lortutako emaitzakin baikorrak izateko arrazoia baditugu eta eredu konplexuagoekin gure implementazioaren abantaila areagotu daitekeela pentsatzen dugu. Etorkizuneko lanak bi taldeetan banatu ditugu: etorkizun hurbilekoak eta aurreragoko lanak.

Etorkizun hurbileko lanak

1. Biribiltze erroreen hedapenaren azterketa estatistiko, puntu-finkoaren eta Newton simplifikatuaren implementazioetan egin genuen moduan.
2. Aurreko azterketan, ikusten bada errore hedapenean gehikuntza sistematiko bat dagoela, hori ekiditeko aztertu beharko litzateke puntu-finkoaren eta Newton simplifikatuaren iterazioen arteko algoritmo eraginkorra. Horretarako, Jacobiarren hurbilpen simple bat erabili ahal izango litzateke. Errore hedapenik ez balego ere, bide hau jorratzea interesgarria izan daitekeela iruditzten zaigu.
3. Doitasun nahasia.

Eguzki-sistemaren integrazioetan, soluzioaren doitasuna hobetzeko ahalegin berezia egiten da [79]: 80-biteko doitasuneko aritmetika eta batura konpentsatua erabiltzen dira. Gure implementazioarekin, 80-biteko doitasuneko integrazioa, 128-biteko doitasuneko konputazio batzuekin konbinatzu, emaitza onak lortuko ditugulakoan gaude.

4. Eedu deskonposaketan oinarritutako teknikak.

Implementazioa eraginkorragoa egiteko lehenengo iterazioak eredu simpleagoarekin kalkula daitezke eta bukaerako iterazioak, eredu konplexuagoarekin.

Aurreragoko lanak

1. Denbora birparametrizazioa. Gorputzen gerturatzeen tratamendurako, denbora birparametrizazio funtzioa egokiak garatzea, birparametrizaio teknikak RKIK metodoetara egokitzea, eta hainbat test problemetarako probatzea.
2. Problema oszilakorren teknikak.

Problema oszilakorren tratamendu aljebraikoan oinarritutako hobekuntza teknikak (metodo prozesatuak, promediatuen teknikak) aplika daitezke. Wisdom-ek [111] bere integrazio metodoen doitasuna hobetzeko teknikekin (*symplectic correctors*) erlazionatutakoak dira hauek.

3. Paralelizazio eta bektorizazio teknika aurreratuak.

Kodeen eraginkortasuna hobetzeko, konputagailuen paralelizazio eta bektorizazio gaitasunak ondo erabili behar dira. RKIK metodoak azkartzeko, oinarrizko paralelizazioa aplikatu dugu eta honek, nolabaiteko abantaila erautsi du. Teknikak hauek modu aurreratuagoan aplikatzeko, paralelizazio eta bektorizazio gaietan sakondu beharra ikusten dugu.

V. Atala

Eranskinak

A. Eranskina

Konputazio zientzia.

A.1. Sarrera.

Azken hamarkadetan, konputazio zientziaren hazkunde oso handia izan da eta bere erabilera ia zientzia arlo guztieta zabaldu da [48]. Zientzialariek ahalmen handiko tresna berria (zenbakizko simulazioa) eskuragarri dute, neurri handi batean konputagailuen teknologiaren garapen handiari esker. Egungo oinarrizko konputagailuek, orain urte gutxitako superordenagailuen ahalmen berdina dute eta superordenagailuen konputazio gaitasuna ere, maila berdinean hazi da. Zenbakizko algoritmoek ere, garapen handia izan dute; algoritmo eraginkorragoak, idei berriak sortuz eta konputagailuen gaitasunei egokituz, garatu dira.

Konputazioaren alde garestiena, memoria eta prozesadorearen arteko datu mugimendua da. Prozesadoreak gero eta azkarragoak dira, baina memori atzipenaren abiaduraren hobekuntza mugatuagoa dago. Horregatik algoritmo eraginkorrapak, prozesadorearen konputazio arik eta handiena, memoria komunikazio arik eta txikiarenarekin, diseinatu behar dira.

Implementazio baten eraginkortasuna ez da exekuzio denboraren arabera bakanrik neurtu behar. Hori bezain garrantzitsua da kode ona idaztea [110] eta zentzu honetan hiru ezaugarri hauek bereziki zaindu behar dira:

1. Errorerik gabeko kodea.
2. Kode argia idaztea.
3. Etorkizunean erraz aldatu daitekeen kodea.

Kapitulu honetan, konputazio zientziaren funtsezko osagaia azalduko ditugu. Lehenengo, konputazioaren eraginkortasuna aztertzeko eta exekuzioak neurtzeko tresnen zehaztapenak emango ditugu. Ondoren, konputagailu hardware berriak

eta paralelizazio gaitasunak laburtu dugu. Jarraian software ikuspegitik, programazio lengoaiak eta aljebra linealerako (LAPACK) liburutegia landu dugu. Azkenik, konpiladoreari buruzko argibide batzuk eman ditugu.

A.2. Eraginkortasuna

Konputazio zientziaren implementazio berri baten eraginkortasuna neurtzeko, koma-higikorreko eragiketa kopurua (*flops*) erabili ohi da. Problema handia denean, datuen mugimendua koma-higikorreko eragiketak baino garestiagoa da eta eraginkortasuna, eragiketa kopuruaren arabera neurtzea okerra izan daiteke.

Prozesadoreen maiztasun-abiadura hertzetan neurten da, hau da, *makina zi-klo segundoko* kopuruaren arabera. Une honetako prozesadoreak gigahertz (Giga = 10^9) mailakoak dira. Koma-higikorreko oinarrizko eragiketa bat ($\oplus, \ominus, \otimes, \oslash$) exekutatzeko ziklo gutxi batzuk behar dira eta beraz, 1 GHz-ko prozesadore batek $> 10^8$ koma-higikorreko eragiketa segundoko exekutatzen ditu (> 100 megaflops) [95].

Adibidea. Demagun A , B eta C ($n \times n$) dimentsioko matrizeak ditugula eta $C = AB$ matrize arteko biderketa egiteko behar dugun denbora jakin nahi dugula.

$$c_{ij} = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} * b_{ji}.$$

- c_{ij} gai bakoitzak kalkulatzeko n biderketa eta $(n-1)$ batura egin behar ditugu.
- C matrizeak n^2 osagaia ditu $\Rightarrow \mathcal{O}(n^3)$ koma-higikorreko ariketak exekutatu behar dira.

Matrizearen tamaina $n = 100$ bada, orduan $\mathcal{O}(n^3) = 10^6$ eragiketa egin behar ditugu. 1-GHz prozesadore batean exekutatzeko, 10^{-2} segundo baino gehiago beharko genituzke. Baino matrize honek, 3.9 MB memoria beharrezkoa du eta konputagailuaren Cache memoria baino handiagoa dela suposatuz, exekuzio denboran datuen mugimenduaren eragina nabarmena izango da.

Konputazio gaitasuna (*peak*), hardwareak fisikoki exekutatu dezakeen eragiketa kopuru maximoa bada, aplikazio gehienak, konputagailuaren konputazio gaitasunaren %10 baino gutxiagorekin exekutatzen dira. Eraginkortasun horren txikia, memoria irakurketa/idazketetan galtzen da. Azpimarratu nahi dugu, t_f eragiketa aritmetiko bat egiteko denbora bada eta t_m , datu bat memoria nagusitik cache memoriara mugitzeko denbora bada,

$$t_f \ll t_m,$$

eta etorkizunean, differentzia hau handituz joango dela. Beraz, kodearen exekuzioa azkartzeko derrigorrezkoa da konputagailuan memorien arteko datuen mugimendua minimizatzea.

Exekuzio denboren neurketa.

Unix-eko *time* agindua, konputazioen denborak ezagutzeko erabili daiteke [95]:

```
S time ./a.out
<kodearen irteera >

real 0m38.856 s
user 0m38.789 s
sys 0m0.004 s
```

Agindu honek, *./a.out* C programa exekutatuko da eta ondoren, programa exekutatzeko behar izan duen denboraren informazioa pantilaratuko du:

- *real*: hasi eta bukatu arteko denbora (*wall-time* edo *elapsed-time*).
- *user*: prozesadoreak gure programa exekutatzen erabili duen denbora (*CPU-time*).
- *sys*: programa exekutatu ahal izateko, sistema eragile lanetan emandako denbora.

Programa osoaren konputazio denborak ezagutu beharrean, kodearen zati bat neurtu nahi dugunean, C lengoaiaren bi funtzio hauek erabilgarriak ditugu:

1. *clock()*.

Funtzioaren bi deien arteko CPU denbora neurtzeko erabiliko dugu (**CPU time**).

```
#include <time.h>

clock_t clock0, clock1;
double elapsed_cpu_time;

clock0= clock();

<neurtu nahi den kodea>

clock1=clock();

elapsed_cpu_time=(clock1 - clock0)/CLOCKS_PER_SEC;
```

2. `time()`.

Funtzioaren bi deien artean igarotako denbora neurtzeko erabiliko dugu (**elapsed-time**).

```
#include <time.h>

time_t time0, time1;
double elapsed_time;

time(&time0);

<neurtu nahi den kodea>

time(&time0);

elapsed_time=difftime(time1, time0);
```

CPU denborari buruzko argibide bat ematea komeni da. Neurtzen ari garen kodea sekuentzialki exekutatzen bada, hau da, hari (*thread*) bakarrekoa, orduan kode zati hori exekutatzeko erabili duen CPU denbora itzuliko du. Aldiz, kodea paraleloan exekutatzen bada, orduan , hari guztien CPU denboren batura itzuliko ditu.

Adibidea. Argiago azaltzeko, $C = AB$ matrize biderketaren kodearen bi exekuzioen denboren neurketak zehaztuko ditugu:

1. 200×200 tamainako, bi matrizeen biderketa sekuentzialaren denborak hauek izan dira:

```
elapsed-time=2.1 s
elapsed-cpu-time=2.07 s
```

2. 200×200 tamainako, bi matrizeen biderketa paraleloaren (hariak=2) denborak hauek izan dira:

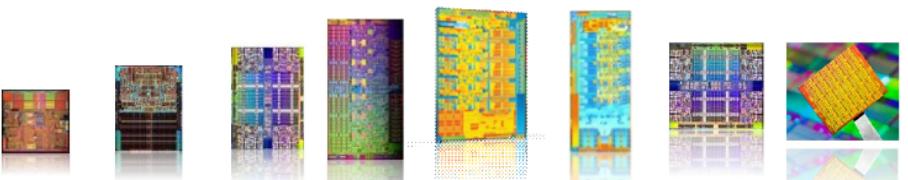
```
elapsed-time=1.0 s
elapsed-cpu-time=2.35 s
```

Elapsed-time deiturikoa, kode paraleloen denborak neurtzeko irizpidea da. Programazio paraleloan, algoritmoen exekuzio denborak egokien neurtzen duen aldagaia da baina, une berean programa bakarra exekutatzea behartuta gaude.

A.3. Hardwarea.

Orokorrean, gaur-egungo konputagailuak (super-konputagailu, eramangarri,...) paraleloak dira. 1986 – 2002 urteen artean, txip barruko transistore dentsitatea handitzen zen heinean, prozesadore bakarreko konputagailuen eraginkortasuna hobetuz joan zen. Baino teknologi honen garapena muga fisikoetara iritsi zenean, bide honetatik konputagailuen abiadura hobetzea ezinezkoa bilakatu zen. Horrela, 2005.urtetik aurrera fabrikatzaleek konputagailuen gaitasuna hobetzeko, txipan prozesadore bat baino gehiago erabiltzaileek erabaki zuten.

Konputagailuen eredu aldaketa honen ondorioz, algoritmo azkarrak garatzeko kodearen paralelizazio gaitasunari heldu behar zaio. Programazio paralelo teknikak implementatzeko, beharrezko da prozesadore berrien hardware arkitektura berriak ulertzeari. Gaia nahiko konplexua izanik, ikuspegi orokor bat ematera mugatuko gara. A.1. irudian ikusi daitekeenez, Intel Xeon konputagailu familiaren paralelizazio eta bektorizazio gaitasuna gero eta handiagoak dira.



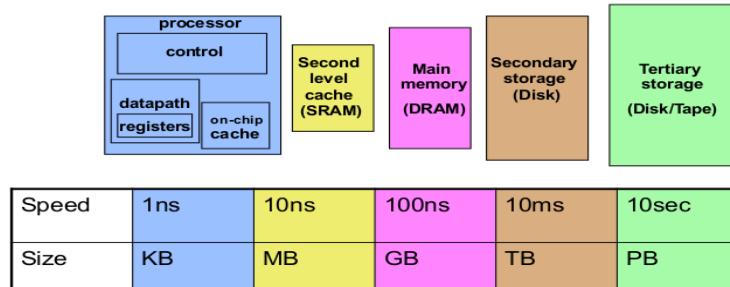
	Intel® Xeon® processor 64-bit	Intel® Xeon® processor 5100 series	Intel® Xeon® processor 5500 series	Intel® Xeon® processor 5600 series	Intel® Xeon® processor code-named Sandy Bridge EP	Intel® Xeon® processor code-named Ivy Bridge EP	Intel® Xeon® processor code-named Haswell EP	Intel® Xeon Processor codenamed Skylake EP
Core(s)	1	2	4	6	8	12	18	28
Threads	2	2	8	12	16	24	36	56
SIMD Width	128	128	128	128	256	256	256	512

A.1. Irudia: Intel Xeon konputagailu familiaren eboluzioa: gero eta prozesadore gehiago eta bektore erregistro zabalagoak.

Memori hierarkia.

Memorien arteko datuen komunikazioak, algoritmoaren eraginkortasuna baldintzatuko du eta zentzu honetan, konputagailuaren memoria hierarkiaren kudeaketa egokia egitea funtsezkoa da. Konputagailuaren memoria mota ezberdinaren hierarkia (A.2.irudia) eta funtzionamendua deskribatuko dugu.

CPU-k, koma-higikorreko eragiketak exekutatzen ditu: erregistroetatik datuak irakurri, eragiketak kalkulatu eta emaitza erregistroetan idazten ditu. Memoria



A.2. Irudia: Memoria hierarkia.

nagusia eta erregistroen artean, 2 edo 3 mailako cache memoria dugu: lehen cache memoria (L_1) txikiena eta azkarrena da, eta beste mailak (L_2, L_3, \dots), handiagoak eta motelagoak dira. Memoria nagusian, exekutatzen diren programak eta datuak gordetzen dira (1 – 4 GB artekoa). Azkenik, disko gogorrean konputagailuko datu (argazki, bideo,...) eta erabilgarri ditugun programa guztiak gordetzen dira.

CPU-k datu bat behar duenean, memoria hierarkian zehar bilatuko du: lehenik L_1 cachean, ondoren L_2 cachean,...eta hauetan ez badago, memoria nagusira joko du. Memoria nagusi eta cache memoria arteko irakurketa eta idatzketa guzti hauetan, informazio kontsistentea mantentzeko hainbat arau aurrera ematen dira.

Cache memoria lerroka egituratuta dago eta lerro bakoitza 64 edo 128 bytez (8 edo 16 doitasun bikoitzeko zenbaki) osatuta dago. Programa batek datu bat behar duenean, memoria nagusitik lerro tamainako datu taldea (memorian jarraian gordetako datuak) irakurriko du eta cachean idatziko du. Programatzailak, algoritmo eraginkorrak implementatzeko memorien arteko komunikazio hau minimizatzen saiatu behar du eta horretarako, implementazioaren diseinua datuen memoria atzipen jarraian oinarritu behar du. Ezaugarri hau, *spatial/data locality* izenaz ezaguna da eta helburua, cachera ekartzen diren datuak, memoria nagusian idatzi aurretik gutxienez behin erabiltzea da.

Adibidea. Adibide honetan, $A = (a_{ij})_{i,j}^{n,m}$ matrize baten osagaien batura ($\text{sum} = \sum_{i,j=0}^{n,m} a_{ij}$) kalkulatzeko bi inplementazio aztertuko ditugu. C lengoian matrizeak lerroka gordetzen dira ($n = m = 100$),

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & 100 \\ 101 & 102 & 103 & \dots & 200 \\ 201 & 202 & 203 & \dots & 300 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 9.901 & 9.902 & 9.903 & \dots & 10.000 \end{pmatrix}.$$

eta horregatik, lehen aukera bigarrena baino eraginkorragoa izango da. Lehen implementazioan, kanpo iterazioa lerroka (Algoritmoa 29): matrizearen lehen osagaia $a(1, 1)$ behar dugunean, memoria nagusitik Cachera osagai honetaz gain, jarraino 16 osagaia ekarriko dira ($a(1, 1), a(1, 2), \dots, a(1, 16)$). Honela, hurrengo 15 batura egiteko behar ditugun datuak Cachean eskura izango ditugu memoria irakurketa berririk egin gabe. Bigarren implementazioan, kanpo iterazioa zutabeka (Algoritmoa 30): bigarren osagaia ($a(2, 1)$) gehitzeko memoria irakurketa berri bat egin behar dugu.

```

int n;
double a[n][m];
sum = 0;
for i ← 1 to n do
    for j ← 1 to m do
        sum+ = a(i, j);
    end
end

```

Algoritmoa 29: Memoria atzipena eraginkorra.

```

int n;
double a[n][m];
sum = 0;
for j ← 1 to m do
    for i ← 1 to n do
        sum+ = a(i, j);
    end
end

```

Algoritmoa 30: Memoria atzipena ez-eraginkorra.

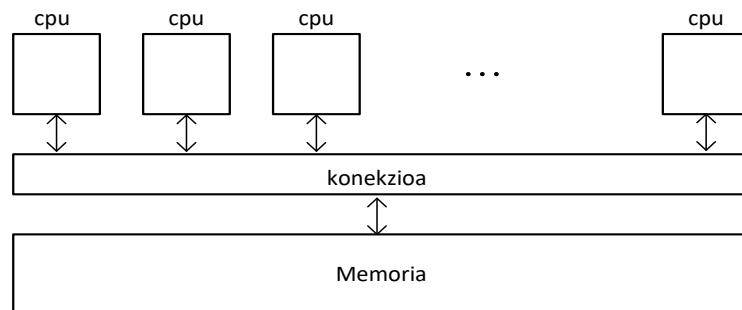
Arkitektura motak.

Prozesadore anitzeko konputagailu hardware berriak, konplexuak eta heterogeneoak dira. Egoera honetan, programatzaleak zaitasun handiak ditu arkitektura berrieik eskaintzen dituzten gaitasunak ondo kudeatzeko [87].

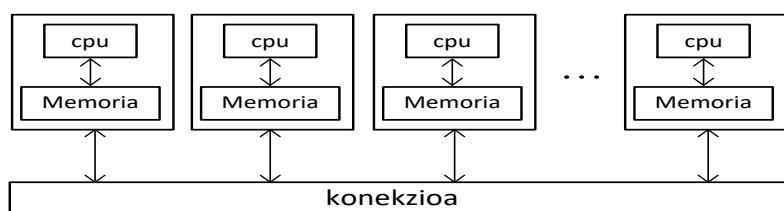
Lehen hurbilpen modura bi sistema nagusi bereiziko ditugu: memoria konpartitutako eta memoria banatutako sistemak. Memoria konpartitutako sistemetan, prozesadore guztiak memoria osoa konpartitzen dute eta inplizituki konpartitutako datuen atzipenaren bidez komunikatzen dira (A.3. irudia). Memoria banatutako sistemetan aldiz, prozesadore bakoitzak bere memoria pribatua du eta

esplizituki bidalitako mezuen bidez komunikatzen dira ([A.4. irudia](#)). Aipatzekoada, sistema handietan bi memoria motak nahasten direla, hau da, batetik goiko mailan memoria banatuta alde bat eta bestetik, konputazio unitate bakoitzak memoria konpartitutako aldea.

Hirugarren sistema osagarria ere aipatuko dugu, GPU (Graphical Processor Unit) unitateetan oinarritutako konputazioa. Jokoenean eta animazio industriean, grafiko oso azkarra beharrak bultzatuta sortutako teknologia da. Oinarrian, imajinak pantailaratzeko prozesagailu asko paraleloan lan egiten dute eta azken hamarkadan, *GPU* unitate hauek konputazio zientziara zabaldu dira.



A.3. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak



A.4. Irudia: Memoria banatutako sistemak

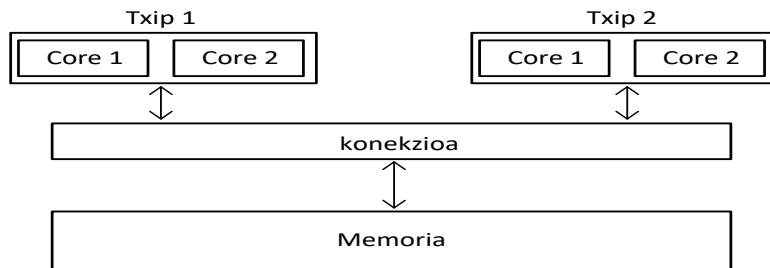
Oinarrizko konputagailu paraleloa.

Gure lanerako, oinarrizko konputagailu paraleloak konsideratuko ditugu: memoria konpartitutako eta prozesadore anitzeko unitate bat edo gehiagoz osatutako

sistemak. Prozesadore anitzeko unitate bakoitzak txipean CPU bat baino gehiago ditu. Normalean CPU bakoitzak $L1$ bere cache memoria du. Aipatzeko da, era honetako sistemeten prozesadore kopurua mugatua dela (normalean ≤ 32) [95, 109].

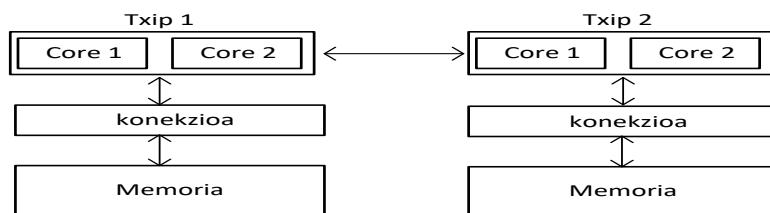
Memoria konpartitutako sistemen artean bi mota bereiziko ditugu:

1. UMA sistemak (uniform memory access). Txip prozesadore guztiak zuzean memoria konektatuta daude eta guztiak atzipen denbora berdina dute ([A.5..irudia](#)).



A.5. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak (UMA).

2. NUMA sistemak (nonuniform memory access). Txip prozesadore bakotza, hardware berezi baten bidez zuzenean memoria bloke bati konektatuta dago. Zuzenean konektatuta dagoen memori blokearen atzipen denbora, beste txipan zehar konektatutako memoriaren atzipena baina azkarragoa da ([A.6..irudia](#)).



A.6. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak (NUMA).

Bektorizazioa (SIMD).

Prozesadore berriei hardware bektore unitateak gehitu zaizkie, eta (AVX) bektore instrukzioetan oinarritutako paralelizazioa eskaintzen dute [91, 5]. CPU-ak bektore erregistroan gorde diren zenbaki multzo bati, eragiketa berdina aplikatzen die (*Single Instruction Multiple Data*, SIMD). Bektore erregistro hauek 512-biteko tamainakoak ($512/64 = 8$ doitasun bikoitzeko zenbaki) izan daitezke eta oro har, oinarrizko eragiketa aritmetikoak (batuketa, kenketa, biderketa eta zatiketa) aplikatzen daitezke. Zentzu honetan ulertu behar da hardware bidezko bektorizazioak, doitasun bikoitzeko konputazioen eraginkortasuna $x8$ hobetzen duela eta doitasun arrunteko konputazioetan, berriz, $x16$.

Adibide moduan, hurrengo adibidearen bidez, iterazio bakoitzean 8 osagaien bektore baten batura erakutsiko nahi dugu,

```
for  $i = 0; i < n ; i+ = 8$  do
     $A[i : (i + 8)] = A[i : (i + 8)] + B[i : (i + 8)];$ 
end
```

Algoritmoa 31: SIMD (bektorizazioa).

A.4. Programazio lengoaiak (Paralelizazioa).

Fortran eta C, aplikazio zientifikoetan gehien erabiltzen diren programazio lengoaiak dira [60]. Fortran (formula translation) 1950 hamarkadan garatutako goi-mailako lehen lengoiaia izan zen eta oraindik ere, oso zabaldua da. Fortran estandarraren hainbat bertsio sortu dira: Fortran 66, 77, 90, 95, 2003 eta 2008. Hauetako bertsio bakoitzean funtzionalitate berriak eta C lengoaiarekin lan egiteko bateragarritasuna gehitu zaizkio. C lengoiaia, 1970 hamarkadan jaio zen eta hardwarearekiko hurbiltasun "ezaugarri nagusiak, konpiladoreari kode eraginkorra sortzeko aukera ematen dio. C lengoiaia *UNIX* sistema eragileari lotuta jaio zen eta hurrengo garapenetan bere izaera askea mantendu du. C lengoaiaren estandarrak 1989, 1999 eta 2011 dira.

Fortran eta C lengoaietik, ez dituzte kodea paraleloan exekutatzeko tresnarik, hau da, ez dago konputazio banatu, eta prozesadore ezberdinaren artean aldi berean exekuzioak zehazteko modurik. Konputazioa paraleloa implementatzeko, bi dira interfaze aplikazio programa (*API*) moduan implementatuta dauden sistema nagusiak [95]:

1. *MPI* (Message Passing Interface). Erabiliena da, memoria banatutako sistemetarako pentsatua baina memoria konpartitutako sistematan ere aplikatzen daitekeena.

2. *OpenMP* (Open Specifications for MultiProcessing). Erabiltzeko errazagoa eta memoria konpartitutako sistemetan bakarrik aplika daitekeena.

Errendimendu altuko konputazioaren (*high performance computing*) programazioa konplexua da: espezializazio handikoa eta konputagailuen hardware jakin baterako egokitutakoa. Zaitasun hauek, proiektu zientifikoak aurrera ateratzeko eta mantentzeko arazo asko eragiten ditu. Azken urteotan, eragozpen hau gainditzeko, programazio lengoia interesgarriak sortu dira (adibidez, Julia [14] edo Chapel [10]) baina oraindik, hauen arrakasta ikustekoa da.

Azkenik, konputazio zientzian *problemak ebazteko inguruneak* (Problem Solving Enviroments) deituriko softwareak aipatuko ditugu. Ingurune hauek, programazio leihoko interaktibo batean, goi-mailako lengoai batean implementazioen garapena eta emaitzen azterketa egiteko aukera eskaintzen dute. Matlab eta Mathematica [114] programazio ingurune nagusienak dira. Guk Mathematica bi modutara erabili dugu. Lehenik, prototipoak garatzeko tresna gisa: idei berriak garatu eta probatu, implementazioa C lengoian egin aurretik. Bigarrenik, gure C implementazioen esperimentuak Mathematica ingurunetik exekutatu eta emaitzak grafikoki aztertu ditugu. Era honetan, irakurleari Mathematicako dokumentuetan esperimentuen zehaztasun guztiak eta esperimentu berdina errepikatzeko aukera ematen diogu.

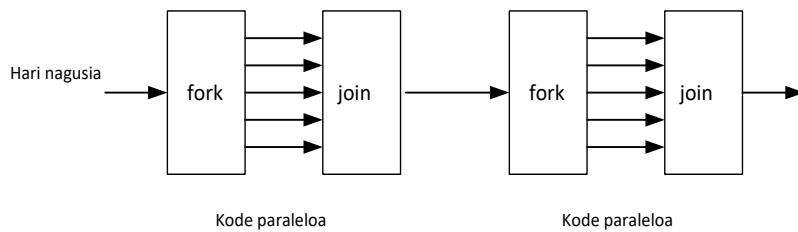
OpenMP

OpenMP [2] memoria konpartitutako sistemetan programazio paraleloa exekutatzeko interfaze aplikazio programa (*API*) da. *OpenMP* programazioan, memoria osoaren atzipena duten prozesadore multzo batek osatzen du konputazio sistema.

Hasieran programaren hari bakarra prozesadore batean exekutatuko da, kode-paraleloko unera iritsi arte. Orduan, hari multzo independenteak exekutatuko dira une paraleloa bukaera iritsi arte. Exekuzio kontrolari, *fork-join* eredua deitzen zaio eta grafikoki (A.7. irudian) adierazi dugu.

- OpenMP programen hasieran prozesu bakarra dago, hari (thread) nagusia.
- FORK: hari nagusiak, hari talde paraleloa sortzen du.
- JOIN: kode-paraleloko hari guztiak bukatzen dutenean (sinkronizazioa), hari nagusiak soilik jarraitzen du.

Paralelizazioan hari kopurua zehaztu behar da, eta ohikoa izaten da hari bat prozesadore bakoitzeko sortzea. Konpilazio direktiben bidez (C kodean *pragma* izeneko preprozesadore aginduak), paralelizazioa nola exekutatu behar den zehazten da.



A.7. Irudia: OpenMp programazio eredu

- Kode paralelizagarria adierazi.
- Hariaren datu pribatuak zehaztu.
- Harien arteko sinkronizazioa.

Adibidea1. C lengoainan, *OpenMP* konpilazio direktibak adierazteko *pragma* hitza lerroaren hasieran idatziko dugu. Adibide honetan, programaren *for-iterazioa* paraleloan exekutatu daitekeela eta hari kopurua bi dela zehaztu dugu.

```

# include <omp.h>

int thread_count=2;

#pragma omp parallel for num_threads(thread_count)
for (i = 0; i<n; i++)
{
    ! Aginduak
}

```

Konpilazioan, *-fopenmp* aukera zehaztu behar dugu,

```
$ gcc -g -Wall -fopenmp adibidea.c -o adibidea.o.
```

Orokorrean, defektuz aldagaia guztiak harien artean konpartituta daude eta alda-gaiak pribatuak direla zehazteko, esplizituki adierazi behar da. Goiko adibidea salbuespena da; *for* iterazioaren kontagailua (adibideko *i* aldagaia) pribatua da.

Algoritmo batean, kodearen zati bat da paralelizagarria [95]. Suposa dezan gun, konputazioaren %50 sekuentziala dela eta beste %50 paraleloan exekutatu daitekeela. Zati sekuentzialak, lortu daitekeen konputazio optimoena (zati paralelizagarriaren exekuzio denbora zero dela konsideratzea) mugatuko du eta beraz, gehienez exekuzio sekuentziala baino bi aldiz azkarrago izango da. Kontzep-tu hau orokortzen badugu, konputazioaren $(1/S)$ sekuentziala eta gainontzekoa,

$(1 - 1/S)$ paralizagarria konsideratuz, orduan kode optimoena prozesadore kopurua edozein delarik, S faktorea hobea izango da. T_s makina sekuentzial batean exekuzio denbora izendatzen badugu, P prozesadore kopurua erabiliz lortuko den konputazio denbora T_p ,

$$T_p = (1/S)T_s + (1 - 1/S)T_s/P,$$

eta prozesadore kopuru oso handia konsideratuko bagenu,

$$T_p \rightarrow (1/S)T_s, \quad P \rightarrow \infty.$$

Konputazio paraleloan, T_p denborari parallelizazioak duen gainkarga gehitu behar zaio. Gainkarga hau, kontzeptu ezberdinez osatuta dago eta milisegundoko mailako eragiketak izan daitezke.

- Prozesuak edo hariak sortzeko denbora.
- Sinkronizazio denbora.
- Datu konpartitutako komunikazioa.

A.5. Aljebra lineal dentsorako liburutegiak.

Zenbakizko integrazioen aljebra lineala, konputazioaren alde konplexua da. Aljebra linealeko eragiketak implementatzen dituzten kalitate handiko liburutegiak daude eta implementazio berriak, liburutegi hauetan oinarritzea gomendarria da [61]. Liburutegi hauek, ondo probatutako softwareak dira, konplexutasun handikoak, modu seguruan eta azkarrean exekutatzeko diseinatu dira.

Hauek dira, aljebra linealerako liburutegi aipagarrienak:

1. BLAS (Basic Linear Algebra Subroutines): matrize eta bektoreen arteko eragiketa aritmetikoak biltzen dituen liburutegia.
2. LAPACK (Linear Algebra Package): aljebra linealaren problemak ebazteko liburutegia.

Implementazio hauen funtzioak *Fortran* lengoaiaren garatuta daude eta ezaugarri hauek dituzte:

1. Datu-mota hauetarako aplika daitezke:
 - (a) S: doitasun arrunta (*float*, 32-bit).
 - (b) D: doitasun bikotza (*double*, 64-bit).

- (c) C: zenbaki konplexua doitasun arruntean (complex).
- (d) Z: zenbaki konplexua doitasun bikoitzean (complex double).
2. Matrize dentsoetarako liburutegiak dira. Matrize egitura hauek zehaztu daitezke.
- (a) Matrize orokorrak.
GE=General; GB=General Band.
- (b) Matrize simetrikoak.
SY=SYmmetric ; SB=Symmetric Band; SP=Symmetric Packed.
- (c) Hermitiar matrizeak.
HE=HERmitian ; HB=Hermitian Band; HP=Hermitian Packed.
- (d) Matrize triangularrak.
TR=TRiangular ; TB=TRiangular Band; TP=Triangular Packed.

BLAS.

BLAS liburutegiak [1], bektore eta matrizeen arteko funtziotako estandarrak biltzen ditu. Liburutegia, 142 errutinaz osatuta dago eta hauek, hiru taldeetan sailkatzen dira:

1. BLAS-1: $\mathcal{O}(n)$ bektore-bektore eragiketak.

Adibidea. $y = \alpha * x + y$, non $\alpha \in \mathbb{R}$, eta $x, y \in \mathbb{R}^n$.
 $2n$ eragiketa aritmetiko eta $3n$ irakurketa/idazketa.

Konputazio intentsitatea: $2n/3n = 2/3$.

2. BLAS-2: $\mathcal{O}(n^2)$ matrize-bektore eragiketak.

Adibidea. $y = \alpha * A * x + \beta * y$, non $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $x, y \in \mathbb{R}^n$ eta $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.
 $\mathcal{O}(n^2)$ eragiketa aritmetiko eta $\mathcal{O}(n^2)$ irakurketa/idazketa.

Konputazio intentsitatea: $\approx 2n^2/n^2 = 2$.

3. BLAS-3: $\mathcal{O}(n^3)$ matrize-matrize eragiketak.

Adibidea. $C = \alpha * A * B + \beta * C$, non $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ eta $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$.
 $\mathcal{O}(n^3)$ eragiketa aritmetiko eta $\mathcal{O}(n^2)$ irakurketa/idazketa.

Konputazio intentsitatea: $\approx 2n^3/4n^2 = n/2$.

BLAS-1 eta BLAS-2 funtzioen konputazio intentsitatea txikia da eta beraz, talde hauetako funtzioetan, datuen komunikazioa nagusia da. BLAS-3 funtzioetan aldiz, konputazio intentsitatea handiagoa da eta ezaugarri honi esker, tamaina handiko matrizeen kalkuluetan, konputagailuaren konputazio gaitasuna ondo aprobetxatu ahal izango da

Aljebra linealeko aplikazioen exekuzio denboraren zati garrantzitsuena, behe-mailako eragiketa hauen konputazioak ematen du. Behe-mailako eragiketen hauen optimizazioak, konputagailu bakoitzaren araberakoak dira eta espezializazio han-dia eskatzen du. Fabrikatzaile bakoitzak optimizatutako bere BLAS liburutegia du (AMD-ACML,Intel-MKL). Bestalde, optimizatutako BLAS instalazioa, ATLAS (Automatically Tuned Linear Algebra Software) izeneko aplikazioaren bidez ere egin daiteke.

Implementazio guztiak, interfaze berdina erabiltzen dute eta beraz, BLAS-en oinarritutako garapena edozein konputagailuan erabili daiteke (portabilitatea). *BLAS* liburutegia, Fortran lengoaiian implementatuta dago eta C lengoaiatik *BLAS* funtzioen erabilpena errazteko, *cblas* interfazea erabiltzea gomendagarria da.

Adibidea. *BLAS* liburutegiaren eraginkortasuna, *cblas_dgemm()* matrizeen biderkadura funtzioaren bidez aztertu dugu eta gure implementazio arrunta baino $10 \times$ azkarragoa dela baiezttatu dugu (Taula A.1.).

LAPACK.

LAPACK, 1992. urtean garatu zen [4, 59] eta aljebra linealaren problemak ebazteko funtzioen liburutegia da. Jatorrizko bertsioa *Fortran* 77 lengoaiian implementatuta dago eta liburutegiaren dokumentazioa nahiz kodea *Netlib* software bilgunean eskuratu daiteke. Matrize dentsoetarako garatuta dago eta problema hauetarako errutinak biltzen ditu:

1. Ekuazio-sistema linealen ebazena: $AX = b$.
2. Linear least square problems: $\|Ax - b\|$ minimizatzen duen x balioa bilatu.
3. Eigenvalues problems.
4. Balio singularren deskonposaketa (SVD).

LAPACK liburutegia, konputagailu sekuentzial eta memoria konpartitutako konputagailuetan erabilgarria izateko diseinatuta dago. Eraginkortasuna *BLAS* funtzio optimizatuen menpe dago eta funtzioen implementazioa, gehien bat BLAS-3 taldeko funtzioetan oinarritzen da.

LAPACKE liburutegia C-lengoaiatik LAPACK funtzioei deitzeko interfazea da. LAPACK liburutegiaren funtzioak, hiru taldeetan banatzen dira [4, 1]:

A.1. Taula: BLAS liburutegiaren eraginkortasuna. C lengoaiako gure garapena (C-arrunta) eta BLAS liburutegiaren cblas_dgemm() implementazioak konparatu ditugu. n tamainako ezberdineko matrizetan biderketa ditugu, eta biderketa bakoitzan n_{test} alditan errepikatu dugu, kasu guztiak eragiketa aritmetiko kopuru berdina izan ditzaten

n	ntests	C-Arrunta		cblas_dgemm	
		Wall T.	CPU T.	Wall T.	CPU T.
10	5.00×10^8	478.	478.	205.	206.
20	6.25×10^7	491.	491.	92.	91.
30	1.85×10^7	474.	474.	78.	78.
40	7.81×10^6	523.	523.	66.	66.
50	4.00×10^6	493.	493.	64.	64.
60	2.31×10^6	479.	479.	58.	58.
70	1.45×10^6	475.	475.	43.	170.
80	9.76×10^5	469.	469.	45.	177.
90	6.85×10^5	491.	491.	47.	186.
100	5.00×10^5	466.	466.	39.	156.
200	6.25×10^4	504.	504.	34.	138.
400	7.81×10^3	657.	657.	35.	140.

1. Problema osoa ebatzen dituzten errutinak (drivers). Talde honetan funtzio arruntak eta funtzio espezializatuak daude.

Adibidea.

LAPACKE-dgelsv (LAPACK-ROW-MAJOR, n, nrhs, A, lda, ipiv, B, ldb);
Matrize orokoren (GE), $A * X = B$ sistema lineala ebatzen du,

2. Konputazio errutinak. Lan zehatz bat exekutatzen duen errutinak.

Adibidea.

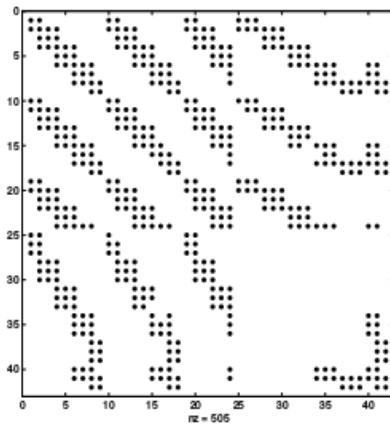
LAPACKE-dgetrf (LAPACK-ROW-MAJOR, n, m, A, lda, ipiv);
Errutina honek A ($n \times m$) tamainako matrizaren LU faktorizazioa kalkulatzen du, $A = P * L * U$.
LAPACKE-dgetrs (LAPACK-ROW-MAJOR,trans,n,nrhs,A,lda,ipiv,B,ldb);
Errutina honek $A * X = B$ ekuazio sistemaren X soluzioa kalkulatzen du.

3. Errutina laguntzaileak.

Matrize bakanak.

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrizeari bakanera esaten zaio, baldin abantaila atera daitekeen zero osagai kopuru adina baditu. Honek esan nahi du, matrizearen zero ez diren osagaien kopurua n_{nz} ,

$$n_{nz} \ll mn.$$



A.8. Irudia: Matrize bakanak.

Matrizearen bakantasuna, konputazioaren memoria eta exekuzio denbora guztitzeko erabil daiteke.

1. Doitasun bikoitzeko $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matriza,
 - (a) Dentsoa: $8mn$ byte.
 - (b) Bakana: $\approx 16n_{nz}$ (gordetzeko teknikaren arabera).
2. $y = y + Ax$, $y, x \in \mathbb{R}^n$ eta $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$,
 - (a) Dentsoa: $\mathcal{O}(mn)$, eragiketa aritmetikoak.
 - (b) Bakana: $\mathcal{O}(n_{nz})$, eragiketa aritmetikoak.

A.6. Konpiladorea.

Konpiladorearen zeregina konplexua da, goi mailan idatzitako programari dago-kion makina kodea sortzea (konputagailuaren errekurtoak modu eraginkorrean

erabiltzen dituenak) [109]. Konpiladoreak heuristikotan oinarritutako kode alda-ketak eragiten ditu, eraginkortasuna hobetzeko asmoarekin. Horregatik, programatzaleak konpiladorearen optimizazio automatiko hauek kontutan hartu behar ditu eta ahal duen neurrian, bere kodean konpiladorearen optimizazioak erraztu.

Konpiladoreak. Konpiladore ezberdinak daude:

1. *gcc* (GNU open source compiler).

```
$ gcc -v
$ gcc version 5.4.0 20160609 (Ubuntu 5.4.0-6ubuntu1~16.04.2)
```

2. Konpiladore komertzialak: Intel (*icc*),...

Optimizazioak. Konpiladoreek, optimizazio maila estandarrak eskaintzen dituzte. Orokorean, hurrengo kode optimizazioak izango ditugu:

1. *-O0*. Kode optimizazio nagusienak aplikatzeko aukera da. Kodea *debugger* moduan aztertzen ari garenean gomendatzen da.
2. *-O2*. Kode eraginkorra sortzeko aukera gomendarriena.

Maila altuagoko optimizazioak aplika daitezke, baina optimizazio hauek arriskutsuak izan daitezke. Kodearen exekuzio denboraren analisia egiteko tresnak (*gprof*) daude. Algoritmoaren funtzio bakoitzaren exekuzio denborari buruzko informazio erabilgarria lortuko dugu.

Konpilazio aginduak

1. Konpilazioa, esteka egin eta adibidea.exe exekutagarria sortzeko

```
$ gcc adibidea.c -o adibidea.exe
```

2. Konpilazio eta esteka urratsak banatuta.

```
$ gcc adibidea.c # creates adibidea.o
$ gcc adibidea.o -o adibidea.exe
```

Gure experimentuetarako era honetan burutu dugu konpilazioa,

```
gcc -O2 -Wall -std=c99 -fno-common adibidea.c
```

Makefile. Normalean, aplikazioaren kodea fitxategi ezberdinetan egituratzen da eta konpilazio prozesua konplexua izan daiteke. *Makefile* fitxategia, lengoia berezi bat erabiliz, konpilazio prozesua automatizatzeko programa moduko bat dugu [109].

A.7. Laburpena.

Algoritmo bat implementatzen dugunean kontutan hartu beharrekoa:

1. Lerro edo zutabe araberako iterazioak exekuzio denboran eragin handia du.
2. Kodea garbia eta ulergarria mantendu behar da.
3. LAPACK eta BLAS liburutegiak oso eraginkorrak dira, eta implementazio berriean erabiltzea komenigarria da.

Kapitulu honi dagokion gomendatutako bibliografia: [95, 109, 48, 61]. LAPACK eta BLAS liburutegiak erabiltzeko informazio interesgarria "Intel Math Kernel Library. Reference Manual"[1] dokumentuan aurki daiteke.

B. Eranskina

Ekuazioen garapenak.

B.1. Kepler-en fluxua.

Kepler problema bi gorputzen problemaren kasu partikularra da eta honako Hamiltondarra dagokio,

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{\mu}{\|q\|}, \quad (\text{B.1})$$

non m eta μ konstanteen balioak formulazioaren araberakoak diren.

Koordenatu sistema $q = q_2 - q_1$ duen formulazioa aukeratzen badugu, konsstanteen balioak hauek dira,

$$m = (1/m_1 + 1/m_2)^{-1}, \quad \mu = Gm_1m_2,$$

eta ekuazio diferenzialak era honetan definitzen dira,

$$\dot{q} = p, \quad \dot{p} = -\frac{k q}{\|q\|^3}, \quad (\text{B.2})$$

non $k = \mu/m$ eta $q, p \in \mathbb{R}^3$ diren.

Kepler problemaren soluzio zehatza kalkula daiteke: une bateko kokapen eta abiadurak emanik, Δt denbora tarte bat igarotakoan (positiboa ala negatiboa), kokapen eta abiadura zehatzak konputatu daitezke. Eguzki-sistemaren integracioetarako, Kepler problema doitasun handian eta era eraginkorrean kalkulatzea, funtsezkoa da. Kepler problemaren erreferentziazko implementazioak, Danby [29] eta J.Wisdom-enak [112] ditugu.

Kepler-en fluxua, era honetan kalkulatzen da. Lehenik, koordenatu cartesiarretatik ($q, p \in \mathbb{R}^3$), koordenatu eliptikoetara (a, e, i, Ω, E) itzulpena egingo dugu. Koordenatu eliptikoetan, E (*eccentric anomaly*) aldaagaia izan ezik, beste alda-gaiak konstante mantentzen dira: beraz, E_0 balioa emanda, Δt denbora tartea aurrrera egin eta E_1 balio berria kalkulatuko dugu. Horretarako, Kepler-en izeneko

ekuazioetan oinarrituko gara,

$$\begin{aligned} t_0 &= e \sin(E_0), \\ t_1 &= e \sin(E_1). \end{aligned} \tag{B.3}$$

Azkenik, koordenatu eliptikoetatik koordenatu cartesiarretara itzulpena eginnez, kokapen eta abiadura berriak eskuratuko ditugu.

$$\begin{aligned} (t_0, q_0, v_0) \in \mathbb{R}^6 &\longrightarrow (t_0, a, e, i, \Omega, E_0) \in \mathbb{R}^6 \\ &\downarrow \Delta t \\ (t_1, q_1, v_1) \in \mathbb{R}^6 &\longleftarrow (t_1, a, e, i, \Omega, E_1) \in \mathbb{R}^6 \end{aligned}$$

Gorputz baten orbita Kepleriarra hiru motakoa izan daiteke: $H(q_0, p_0) < 0$ denean orbita eliptikoa da, $H(q_0, p_0) > 0$ orbita hiperbolikoa eta $H(q_0, p_0) = 0$ orbita parabolikoa. Kepler fluxuaren C implementazioa, orbita eliptikoetarako garatu dugu eta zehaztasunak, [B.1.](#) eranskinean eman ditugu. [\(B.2\)](#) problemari dagokion fluxua, era honetan defini daiteke,

$$\begin{aligned} \varphi_{\Delta t}^k : \quad \mathbb{R}^6 &\longrightarrow \mathbb{R}^6, \\ u_0 &\rightsquigarrow u_1. \end{aligned}$$

non $u = (q, v) \in \mathbb{R}^6$ den.

Kepler fluxuaren implementazioa.

Keplerren ekuazioa, kokapen eta abiadura berriak kalkulatzeko oinarritzko da eta era honetan definitzen da,

$$E - e \sin E = M,$$

non $M = n(t - T)$ (*mean anomaly*), $n = k a^{-3/2}$ (*mean motion*) eta $T, M = 0$ deneko integracio konstantea da. E (*eccentric anomaly*) eta t -ren arteko erlazio hau erabiliz kalkulatzen da mugimendua. Mugimendu eliptikoaren kasura mugatuko gara ($0 \leq e < 1$) eta Keplerren ekuazioa transzendentala denez, zenbakizko metodo baten bidez ebatziko dugu.

Garapena.

Gure abiapuntua, honakoa da,

$$\begin{aligned} E_0 - e \sin E_0 &= n(t_0 - t_p), \\ E_1 - e \sin E_1 &= n(t_1 - t_p) \end{aligned}$$

non $n = 2\pi/P$ eta P periodoa diren.

Bi ekuazioen arteko kendura eginez,

$$E_1 - E_0 - e(\sin(E_1) - \sin(E_0)) = n\Delta t \longrightarrow \Delta E - e(\sin(E_0 + \Delta E) - \sin(E_0)) = n\Delta t$$

non $E_1 = E_0 + \Delta E$ den.

Honako notazioa erabiliz adieraziko dugu,

$$\Delta E - ce \sin(\Delta E) - se(\cos(\Delta E) - 1) = n\Delta t,$$

non $ce = e \cos(E_0)$ eta $se = e \sin(E_0)$ den.

Newton metodoa. Ekuazio ebatzeko, Newton metodoa aplikatuko dugu,

1. $f(\Delta E) = \Delta E - ce \sin(\Delta E) - se(\cos(\Delta E) - 1) - n\Delta t = 0.$
2. $f'(\Delta E) = 1 - ce \cos(\Delta E) + se \sin(\Delta E).$
3. $\Delta E^{[k+1]} = \Delta E^{[k]} - \frac{f(\Delta E^{[k]})}{f'(\Delta E^{[k]})}.$

Hasierako balioa. $\Delta E^{[0]}$ hasierako balioa, finkatzea da dugun zaitasun handiena. Horretarako honako garapena egingo dugu,

$$\begin{aligned} \Delta E - ce \sin(\Delta E - se(\cos(\Delta E) - 1)) &= n\Delta t, \\ x = \Delta E - n\Delta t, \end{aligned}$$

eta beraz,

$$x - ce \sin(n\Delta t + x) - se(\cos(n\Delta t + x) - 1) = 0.$$

Honako baliokidetasun trigonometrikoak ordezkatuz,

$$\begin{aligned} \cos(A + B) &= \cos(A)\cos(B) - \sin(A)\sin(B), \\ \sin(A + B) &= \cos(A)\sin(B) + \sin(A)\cos(B), \end{aligned}$$

berdintza hau lortzen dugu,

$$\begin{aligned} x - (se \cos(n\Delta t) + ce \sin(n\Delta t)) \cos(x) \\ + (se \sin(n\Delta t) - ce \cos(n\Delta t)) \sin(x) + se = 0. \end{aligned}$$

x txikia dela suposatuz, honako hurbilpenak ordezkatuko dugu,

$$x \approx \sin(x), \cos(x) \approx 1 - \frac{x^2}{2}$$

eta honako berdintza lortuko dugu,

$$\begin{aligned} & (se \cos(n\Delta t) + ce \sin(n\Delta t)) \frac{x^2}{2} \\ & + (1 + se \sin(n\Delta t) - ce \cos(n\Delta t))x - (se) = 0. \end{aligned}$$

Azkenik, goiko ekuazio hau askatuz ($Ax^2 + Bx + C = 0 \rightarrow x = -B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}/2A$) lortuko dugu,

$$\Delta E^{[0]} = x + n\Delta t.$$

Koordenatu barizentrikoen kalkulua ekuazio hauen bidez egingo dugu,

$$(q_1, v_1) = (q_0, v_0) + (q_0, v_0) \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} b_{11} &= (C - 1) \frac{a}{\|q\|}, \\ b_{21} &= \Delta t + (S - \Delta E) \frac{a^{\frac{3}{2}}}{\mu^{\frac{1}{2}}} \\ b_{12} &= \frac{s}{\|q\| \sqrt{a(1 - ce C + se S)}}, \\ b_{22} &= \frac{C - 1}{1 - ce C + se S}. \end{aligned}$$

Non osagai bakoitzaren definizioa,

$$\begin{aligned} C &= \cos(\Delta E), S = \sin(\Delta E), \\ ce &= e \cos(E_0) = \|q\| \|v\|^2 - 1, \\ se &= e \sin(E_0) = \frac{(q \cdot v)}{\sqrt{\mu a}}, \\ a &= \frac{\mu \|q\|}{2\mu - \|q\| \|v\|^2}, \\ n &= \frac{\mu^{\frac{1}{2}}}{a^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned}$$

Ezabapen arazoa. ΔE txikia denean, $\cos(\Delta E) - 1$ espresioaren kalkuluaren ezabapen arazoak biribiltze errore handia eragin dezake. Hori konpontzeko balio-kidetasun trigonometriko hau erabiliko dugu,

$$\cos(\Delta E) - 1 = -\frac{\sin^2(\Delta E)}{1 + \cos(\Delta E)}.$$

Eta beraz, Keplerren ekuazioak hauek izango dira,

$$f(\Delta E) = \Delta E - ce \sin(\Delta E) + se \left(\frac{\sin^2(\Delta E)}{1 + \cos(\Delta E)} \right) - n\Delta t = 0$$

Eta (q_1, v_1) balioak kalkulatzeko,

$$b_{11} = (C - 1) \frac{a}{\|q\|}, \rightarrow b_{11} = -\frac{\sin^2(\Delta E)}{1 + \cos(\Delta E)} \frac{a}{\|q\|}$$

B.2. Koordenatu sistemak.

Lehenik koordenatu barizentrikoei $q_i, p_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 0, \dots, N$ dagokien Hamilton-darra gogoratuko dugu,

$$H(q, p) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \frac{\|p_i\|^2}{m_i} - G \sum_{0 \leq i < j \leq N} \frac{m_i m_j}{\|q_i - q_j\|}. \quad (\text{B.4})$$

Koordenatu Heliozentrikoak.

Koordenatu barizentrikoetatik abiatuta eta aldagai aldaketa bat aplikatuz ekuazio koordenatu heliozentrikoen $Q_i, P_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 0, \dots, N$ arabera berridatziko ditugu.

Aldagai aldaketa.

Lehenik honako aldagai aldaketa aplikatuko dugu,

$$\begin{aligned} Q_0 &= q_0, \quad Q_i = q_i - q_0, \\ P_0 &= \sum_{i=0}^N p_i, \quad P_i = p_i, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Hamiltondarra era honetan deskonposatu daiteke,

$$H = H_K + (T_1 + U_1)$$

non

$$\begin{aligned} H_K &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|P_i\|^2}{2\mu_i} - \frac{Gm_0m_i}{\|Q_i\|} \right), \quad \mu_i = \frac{m_0m_i}{(m_0 + m_i)}, \\ T_1 &= \frac{1}{m_0} \left(\sum_{0 < i < j \leq N} P_i P_j \right), \\ U_1 &= - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}. \end{aligned} \tag{B.5}$$

Hamiltondarra abiaduraren arabera idazteko $V_i = P_i/\mu_i$ berdintza ordezkatzuko dugu,

$$\begin{aligned} H_K &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|V_i\|^2 \mu_i}{2} - \frac{Gm_0m_i}{\|Q_i\|} \right), \quad \mu_i = \frac{m_0m_i}{(m_0 + m_i)}, \\ T_1 &= m_0 \left(\sum_{0 < i < j \leq N} \frac{m_i m_j V_i V_j}{(m_0 + m_i)(m_0 + m_j)} \right), \\ U_1 &= - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}. \end{aligned} \tag{B.6}$$

Ekuazio differentzialak.

Hamiltondar bakoitzak independente kontsideratuta dagokio ekuazio differentzialak lortzen ditugu:

1. H_K .

$$\begin{aligned} \dot{Q}_i &= \nabla_p H_k \Rightarrow \dot{Q}_i = P_i \left(\frac{m_0 + m_i}{m_0 m_i} \right), \\ \dot{P}_i &= -\nabla_q H_k \Rightarrow \dot{P}_i = -\frac{Gm_0 m_i}{\|Q_i\|^3} Q_i, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

2. T_1 .

$$\begin{aligned} \dot{Q}_i &= \nabla_p T_1 \Rightarrow \dot{Q}_i = \sum_{j \neq i, j=1}^N \frac{P_j}{m_0}, \\ \dot{P}_i &= -\nabla_q T_1 \Rightarrow \dot{P}_i = 0, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

3. U_1 .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \nabla_p U_1 \Rightarrow \dot{Q}_i = 0, \\ \dot{P}_i &= -\nabla_q U_1 \Rightarrow \dot{P}_i = \sum_{j \neq i, j=1}^N \left(\frac{-Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|^3} (Q_i - Q_j) \right), \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

Azkenik, $V_i = P_i/\mu_i$ aplikatuta integrazioan erabiliko ditugun ekuazioak laburtuko ditugu.

1. H_k .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= V_i \\ \dot{V}_i &= -\frac{G(m_0 + m_i)}{\|Q_i\|^3} Q_i, \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

2. T_1 .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \sum_{j \neq i, j=1}^N \frac{V_j m_j}{(m_0 + m_j)}, \\ \dot{V}_i &= 0, \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

3. U_1 .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= 0, \\ \dot{V}_i &= -\frac{G(m_0 + m_i)}{m_0} \sum_{j \neq i, j=1}^N \left(\frac{m_j}{\|Q_i - Q_j\|^3} (Q_i - Q_j) \right), \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

Energia.

Koordenatu heliozentrikoetan integrazioak egiten ditugunean, sistemaren energia kalkulatzeko, soluzioa koordenatu sistema barizentrikoetara bihurtuko dugu. Hauek dira koordenatu heliozentrikoetatik abiatuta (Q_i, V_i) , koordenatu barizentrikoak (q_i, v_i) kalkulatzeko ekuazioak,

1. $q_i, \quad i = 0, \dots, N$.

$$\begin{aligned}q_0 &= -\sum_{i=1}^M \frac{m_i Q_i}{M}, \quad M = \sum_{i=0}^N m_i, \\ q_i &= q_0 + Q_i, \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

2. $v_i, i = 0, \dots, N$.

$$v_i = \frac{m_0}{m_0 + m_i} V_i, \quad i = 1, \dots, N$$

$$P_0 = \sum_{i=0}^N p_i = \sum_{i=0}^N m_i v_i = 0 \Rightarrow m_0 v_0 + \sum_{i=1}^N m_i v_i = 0 \Rightarrow v_0 = -\frac{1}{m_0} \sum_{i=1}^N m_i v_i.$$

Koordenatu Jacobiarrak.

Koordenatu barizentrikoetatik abiatuta eta aldagai aldaketa bat aplikatuz, ekuazioak koordenatu Jacobiaren $Q_i, P_i \in \mathbb{R}^3, i = 0, \dots, N$ arabera berridatziko ditugu.

Aldagai aldaketa.

Lehenik honako aldagai aldaketa aplikatuko dugu,

$$Q_0 = (m_0 q_0 + \dots + m_n q_n) / \eta_N, \quad Q_i = q_i - \left(\sum_{j=0}^{i-1} m_j q_j \right) / \eta_{i-1}$$

$$P_0 = \sum_{i=0}^N p_i, \quad P_i = \left(\eta_{i-1} p_i - m_i \sum_{j=0}^{i-1} p_j \right) / \eta_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

non $\eta_i = \sum_{j=0}^i m_j$ den.

Era berean, Jacobi masak $m'_i = (\eta_{i-1} m_i) / \eta_i$ eta $\mu'_i = m_i \eta_{i-1}$ ekuazioetan ordezkatuko ditugu. Hamiltondarra era honetan deskonposatu daiteke,

$$H = H_K + H_I,$$

non

$$H_K = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|P_i\|^2}{2m'_i} - \frac{\mu'_i}{\|Q_i\|} \right),$$

$$H_I = \left(\frac{\mu'_i}{Q_i} - \frac{Gm_0 m_i}{q_i} \right) - \sum_{0 < i < j \leq N}^N \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}.$$

B.3. Newton eraginkorraren garapena.

Formulazio estandarrean honako ekuazio sistema askatzeko metodoa proposatzen da,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r. \quad (\text{B.7})$$

Lehenengo modu orokorrean eta ondoren, metodoa simetrikoa dela kontutan harturik garapenaren zehaztasunak emango ditugu.

Kasu orokorra

Honako ekuazio sistemari,

$$(I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) \Delta Y - \frac{1}{2}(e_s \otimes I_d) \Delta z = r, \quad (\text{B.8})$$

$$(-h e_s^T B \otimes J) \Delta Y + \Delta z = 0, \quad (\text{B.9})$$

aldagai aldaketa hau, aplikatuko diogu.

$$\Delta Y = (Q \otimes I_d) W. \quad (\text{B.10})$$

1. Lehen urratsa.

Ekuazioa sistemaren lehen ekuazioari (B.8), aldagai aldaketa (B.10) aplikatu eta $(Q^{-1} \otimes I_d)$ gaia ezkerretik biderkatuz,

$$\begin{aligned} (Q^{-1} \otimes I_d) (I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) (Q \otimes I_d) W \\ - (Q^{-1} \otimes I_d) \left(\frac{1}{2} e_s \otimes I_d \right) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r. \end{aligned}$$

Eta garatuz,

$$(I_s \otimes I_d - h Q^{-1} \bar{A} Q \otimes J) W - \frac{1}{2} (Q^{-1} e_s \otimes I_d) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r.$$

2. Bigarren urratsa.

Metodoa simetrikoa bada,

$$Q^{-1} \bar{A} Q = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.11})$$

eta beraz,

$$(I_s \otimes I_d - h \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \otimes J) W - \frac{1}{2} (Q^{-1} e_s \otimes I_d) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r.$$

Eta $I_s \otimes I_d$ bloke moduan idatzia,

$$I_s \otimes I_d = \begin{pmatrix} I_m \otimes I_d & 0 \\ 0 & I_{s-m} \otimes I_d \end{pmatrix} \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{pmatrix} I_m \otimes I_d & -hD \otimes J \\ hD^T \otimes J & I_{s-m} \otimes I_d \end{pmatrix} W - \frac{1}{2}(Q^{-1}e_s \otimes I_d)\Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d)r.$$

3. Hirugarren urratsa.

Bigarren ekuazioari (B.8) aldagai aldaketa (B.10) aplikatuz,

$$(-he_s^T B \otimes J)(Q \otimes I_d)W + \Delta z = 0,$$

eta garatuz,

$$-h(e_s^T B Q \otimes J)W + \Delta z = 0.$$

Kasu simetrikoa

Kasu orokorraren emaitzan, kasu simetrikoa ordezkatuz

$$W = \begin{pmatrix} W' \\ W'' \end{pmatrix}, \quad Q = (Q_1 \quad Q_2)$$

dagokion ekuazioak lortuko ditugu ekuazioak.

Honako berdintza hauek kontutan hartuz, $Q^{-1} = Q^T B$, $e s^T B Q_2 = 0$, $Q_2^T B e s = 0$ honako ekuazioak lortuko ditugu,

$$\begin{aligned} W' - h(D \otimes J)W'' - \frac{1}{2}(Q_1^T B e_s \otimes I_d)\Delta z &= (Q_1^T B \otimes I_d)r, \\ h(D^T \otimes J)W' + W'' &= (Q_2^T B \otimes I_d)r, \\ -h(e_s^T B Q_1 \otimes J)W' + \Delta z &= 0. \end{aligned}$$

C. Eranskina

Inplementazioak.

Lan honetan, ekarpen bakoitzari dagokion C lengoaiako implementazio bat garatu dugu eta [kode bilgunean](#) eskuragarri jarri dugu. Kodea eskuragarri jartzeari, lehentasuna eman diogu [8, 110]. Batetik, garapenak modu argian dokumentatzea behartu gaitu; bertan zehaztasun guztiak aztertu daitezke eta gure lanaren baliagarritasuna baiezttatu daiteke. Bestetik, ikerlariei gure lana erabiltzeko eta hobetzeko aukera eskaintzen diegu.

Konputazio zientzian, idatzitako kodearen 200 lerro oro, errore bat izaten dela [43] estimatzen da. Gure implementazioak ondo frogatu baditugu ere, errorerik ez denik izango ezin dugu ziurtatu. Akatsen bat izatekotan, larria ez izatea espero dugu eta edozein kasutan erabiltzaileak jakinaraztea eskertu genuke.

Implementazioen kdea antolatzeko, irizpide berdinak erabili ditugu. Lehenengo, implementazioen egitura orokorra azaldu dugu eta ondoren, garapen bakoitzen argibideak emango ditugu.

C.1. Egitura orokorra.

Implementazioen edukia, direktorio hauetan banatu dugu:

1. CoefficientsData.

Mathematican, IRK Gauss kolokazio metodoaren koefizienteak sortzeko aplikazio bat garatu dugu. Gure esperimentuetarako $s = 6, s = 8, s = 9$ eta $s = 16$ atalaetako Gaussen metodoak aplikatu ditugu eta metodo bakoitzari dagokien doitasun bikoitzeko (64-bit) koefizienteak, azpidirektorio batean bildu ditugu.

2. PerturbationsData.

Errorearen azterketa estatistikoak egiteko, hasierako balio ezagun baten $P = 1000$ hasierako balio perturbatuak sortu ditugu; hasierako balio originalaren

osagai bakoitza ausaz perturbatu dugu ($\mathcal{O}(10^{-6})$ tamainako errore erlatiboarekin). Problema bakoitzari dagokion, $P = 1000$ hasierako balio perturbatuak, fitxategi bitar batean idatzi dugu eta horrela, fitxategi hauetatik hasierako balioak irakurrita, esperimentu bera errepikatu daiteke.

3. Packages.

Esperimentuak, Mathematica ingurunetik exekutatu ditugu eta direktorio honetan, soluzioen azterketak egiteko hainbat funtzi garatu ditugu. Batez, problema bakoitzari dagokion ekuazio diferentzialak eta Hamiltondarra implementatu ditugu. Bestetik, esperimentuen grafikoak irudikatzeko funtzio laguntzaileak garatu ditugu.

4. Examples.

Mathematica erabiliz egindako zenbakizko integrazioen adibideak eman ditugu. Adibide bakoitza, azpidirektorio batean bildu dugu: zenbakizko integrazioa eta honen analisia, modu independentean exekutatu daitezke. Horretarako, integrazioaren soluzioak fitxategi bitarretan idazten dira eta analisiak, fitxategi hauek irakurriko ditu.

5. Code.

C lengoian garatutako gure implementazioa.

Exekuzioa.

Code/Readme.txt fitxategian, implementazioaren argibideak eman ditugu. Implementazioa bi modutan exekutatu daiteke.

1. Linux terminala.

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu.

2. Mathematica ingurunetik.

Bestalde, implementazioa Mathematicatik exekutatzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu. Mathematicatik gure C implementazioaren funtzi nagusia deitu ahal izateko, 'math-IRK.tm' eta 'math-IRK.c' fitxategiak definitu ditugu. Exekutarria, Mathematicatik bateragarria izan dadin, konpilazio eta esteka egiteko moduak *makefile* fitxategian kontsultatu daitezke.

Erabiltzaileak, bere problemaren ekuazio diferentzialak eta integrazioen emaitzak definituko dituela espero da.

Paralelizazioa.

IRK metodoen s-ataletako funtzioen konputazioak ($f(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$) paraleloan exekutatu daitezke. Gure implementazioan, OpenMP erabili dugu: *PARALLEL* konpilazio parametroarekin aktibatu daiteke eta orduan, prozesadore kopuru 'threadcount' aldaiaian, zehaztu behar da.

C.2. IRK puntu-finkoa.

Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, <https://github.com/mikellehu/IRK-FixedPoint> helbidean eskuragarri da. Bi modutara exekutatu daiteke: puntu-finkoaren iterazio estandarra edo puntu-finkoaren iterazio partizionatua.

Code/Readme.txt fitxategian, IRK puntu-finkoaren implementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzi nagusiaren deia honakoa da:

```
IRKFP ( t0 , t1 , h,& method ,& u ,& system ,& options ,& the stat );
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, implementazioa Mathematicatik exekutatzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

Implementazio honetan, ez dugu *BLAS* liburutegia erabili.

C.3. IRK Newton.

Newton simplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, <https://github.com/mikellehu/IRK-Newton> helbidean eskuragarri da. Bi implementazio exekutatu daitezke: Newton simplifikatuaren implementazio eraginkorra eta artikuluan, proposatutako Newton iterazioan oinarritutako IRK implementazio berria.

Code/Readme.txt fitxategian, IRK puntu-finkoaren implementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzi nagusiaren deia honakoa da:

```
IRKNEWTON ( t0 , t1 , h,& method ,& u ,& system ,& options ,& the stat );
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, implementazioa Mathematicatik exekutatzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

Implementazio honetan, *BLAS* eta *LAPACK* liburutegiak erabili ditugu.

C.4. IRK Eguzki-sistema.

Kepler-en fluxuaren aldagai aldaketan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, <https://github.com/mikelehu/IRK-SolarSystem> helbidean eskuragarri dago.

Code/Readme.txt fitxategian, implementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzio nagusiaren deia honakoa da:

```
IRKFPSS ( t0 , t1 , h,& method ,& u,& system ,& options ,& the stat );
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, implementazioa Mathematicatik exekutatzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

C.5. Konposizio-Splitting metodoak.

Newton simplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, <https://github.com/mikelehu/Composition> helbidean eskuragarri dago. Bi implementazio exekutatu daitezke: konposizio metodoak (CO1035) eta splitting metodoak (ABAH1064).

Code/Readme.txt fitxategian, konposizio/splitting implementazioaren argibide guztiak eman ditugu. Integrazioaren funtzio nagusiaren deia honakoa da:

```
Solve_Comp ( t0 , t1 , h,& method , basic ,& system ,& options ,& u,& the stat );
```

Exekuzioa Linux terminaletik exekutatu daiteke eta exekutatzeko adibidea bat "terminal.c" fitxategian eman dugu. Bestalde, implementazioa Mathematicatik exekutatzeko prest dago eta "Examples" direktorioan hainbat adibide eman ditugu.

Eguzki-sistemari egokitutako Splitting metodoak aplikatzeko, Kepler fluxuaren implementazio berri bat garatu dugu. Implementazio honen C kodean, 'Kepler.c' fitxategian aurkitzen da.

D. Eranskina

Zerrendak

Hitz-zerrenda.

D.1. Taula: Hitz-zerrenda.

Euskaraz	Ingelesez	Laburdura	Adibidea
Ekuazio diferenzial arrunta	Ordinary Differential equation	<i>ODE</i>	$\dot{y} = f(t, y)$
Hasierako baliodun problema	Initial value problem	<i>IVP</i>	
Zurruna	Stiff		
Simplektikoa	Symplectic		
Drift	Drift		
Splitting metodoak	Splitting methods		
Konposizio metodoak	Conposition methods		
Runge-Kutta Esplizitua	Explicit Runge-Kutta	<i>ERK</i>	
Runge-Kutta Implizitua	Implicit Runge-Kutta	<i>IRK</i>	
Batura konpensatua	compensated summation		
Biribiltzea	roundoff		
Portabilitate	portable		
Doitasun arrunta	Single precision		
Doitasun bikoitza	Double precision		
Doitasun laukoitza	Quadruple precision		
Multiple-digit representation	Digito-anitzeko adierazpena		
Multiple-term representation	Termino-anitzeko adierazpena		
Haria	Thread		
Balio singularen deskonposaketa	Graphical Processor Unit	<i>GPU</i>	
Eszentrikotasuna	Least Eigenvalues problems		
	Linear least square problems		
	Eigenvalues problems		
	Singular values descomposition	<i>SVD</i>	
Unitate astronomikoa	Eccentricity		
LU deskonposaketa	Eccentric anomaly		
	Astronomical unit	<i>AU</i>	
	LU Decomposition		
	Backward substitution		
Koma-higikorreko eragiketa segunduko	Float operations per second	<i>flops</i>	
Peak	Exekuzio gaitasuna		
	Wall-time, elapsed-time		
CPU denbora	CPU-time		
Cache memoria	Cache memory		
	Spatial/data locality		
Single Instruction Multiple Data	Single Instruction Multiple Data	<i>SIMD</i>	
	Fork-join		
Interfaze aplikazio programa	Application programming interface	<i>API</i>	
Erredimendu altuko konputazioa	High performance computing	<i>HPC</i>	
Problemak ebazteko inguruneak	Problem solving enviroments	<i>PSE</i>	Mathematica
Matrize bakanak	Sparse matrices		

Irudien zerrenda.

Irudien Zerrenda

2.1. Pendulu arrunta	23
2.2. Kolokazio metodoen simetria	28
2.3. Atalen hasieraketa: interpolazioa	30
3.1. Pendulu bikoitz arrunta	43
3.2. Pendulu bikoitz zurruna	44
3.3. Planeten tamainen proportzioak	48
4.1. Koma-higikorreko zenbakien multzoa	56
4.2. 32-biteko koma-higikorra	56
4.3. Batuketaren biribiltze errorea	62
5.1. IRK metodoaren geratze irizpidea	75
5.2. Energia errorearen jatorria	84
5.3. Energia differentzien banaketa	85
5.4. Energia errorearen batezbesteko eta desbideratze estandarra	87
5.5. Newton sinplifikatuaren iterazioa: energia errorea	87
5.6. Kokapen erroreak	88
5.7. Errorearen estimazioa	90
6.1. Biribiltze errorearen azterketa	120
7.1. RKIK metodoaren integrazio eskema orokorra	127
7.2. Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu. (a) irudian, ekuazio differentzialen ebaluazio kopuruarekiko (FCN) eraginkortasuna neurtu dugu. (b) irudian, CPU denborarekiko eraginkortasuna neurtu dugu. Irudi bakoitzean, Gauss-en nodoetan oinarritutako $s = 6$ atalako bi bertsio konparatu ditugu: IRK berdez eta RKIK griesez.	131

- 7.3. Eraginkortasun grafikoa eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu dugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, ekuazio diferentzialen ebaluazio kopurua (FCN). Gaussen nodoetan oinarritutako s atalako RKIK metodo simplektikoen lau integracio konparatu ditugu: $s = 6$ urdinez, $s = 8$ gorriz, $s = 9$ berdez, eta $s = 16$ grisez 132
- 7.4. Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, CPU denbora (exekuzio paraleloan Wall-Time). (a) konputazioa modu sekuentzialean egin dugu eta (b) modu paraleloan hari kopurua 2 izanik. Irudi bakoitzean, Gaussen nodoetan oinarritutako s atalako RKIK metodo simplektikoen lau integracio konparatu ditugu: $s = 6$ urdinez, $s = 8$ gorriz, $s = 9$ berdez, eta $s = 16$ grisez. 133
- 7.5. Eraginkortasun grafikoa, eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu dugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, ekuazio diferentzialen ebaluazio kopurua (FCN). Hiru integracio metodo konparatu ditugu: $s = 8$ ataleko RKIK metodoa grisez, ABAH1064 urdinez eta CO1035 gorriz 134
- 7.6. Eraginkortasun grafikoak eskala logaritmiko bikoitzean irudikatu ditugu. Ardatz bertikalean, energiaren errore erlatibo maximoa eman dugu eta ardatz horizontalean, CPU denbora (exekuzio paralelotan Wall-Time) erakutsi dugu. (a) konputazioa modu sekuentzialean egin dugu eta (b) modu paraleloan, hari kopurua 2 izanik. Irudi bakoitzean, hiru integracio metodo konparatu ditugu: $s = 8$ RKIK grisez, ABAH1064 urdinez eta CO1035 gorriz 134
- 7.7. Energia errorearen eboluzioa lau integracio metodoetarako erakutsi dugu. Ezkerreko irudian, $s = 8$ atalako RKIK metodoaren $h = 10,667$ urrats luzerarekin egindako integrazioak erakutsi ditugu: kalkulu guztietarako 64-biteko (*double*) doitasunarekin (urdinez) eta bestetik, 64-biteko eta 80-biteko (*long double*) implementazio mistoa erabiltzen duna (laranjaz). Eskuineko irudian, splitting/konposizio metodoak erakutsi ditugu: ABAH1064 (laranjaz) eta CO1035(urdinez) 136

7.8. Kokapen eta abiaduraren erroreen estimazioak erakutsi ditugu. (a) eta (b) irudietan, $s = 8$ ataleko RKIK metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 10,667$ urrats luzera aplikatutako integracioarentzat. (c) eta (d) irudietan, <i>ABAH1064</i> splitting metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 4.76$ urrats luzerako integracioarentzat. Kolore bakoitza planeta bakoitzari dagokion errorea da: Merkurio (urdin ilunez), Artizarra (marroi argiz), Lurra (berdez), Marte (gorriz), Jupiter (more argiz), Saturno (marroi ilunez), Urano (urdin argiz), Neptuno (laranja argiz), Pluto (morez)	137
7.9. Orbita eliptikoaren a erdi-ardatz nagusiaren eta e eszentrikotasunaren erroreen estimazioak erakutsi ditugu. (a) eta (b) irudietan, $s = 8$ atalako RKIK metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 10,667$ urrats luzerarekin integratuz. (c) eta (d) irudietan, <i>ABAH1064</i> Splitting metodoaren errore estimazioak eman ditugu, $h = 4.76$ urrats luzerarekin integratuz. Kolore bakoitza planeta bakoitzari dagokion errorea da: Merkurio (urdin ilunez), Artizarra (marroi argiz), Lurra (berdez), Marte (gorriz), Jupiter (more argiz), Saturno (marroi ilunez), Urano (urdin argiz), Neptuno (laranja argiz), Pluton (morez)	138
7.10. Momentu angeluarraren errore erlatiboaren eboluzioa erakutsi dugu. RKIK ($s = 8$) metoda integratu dugu $h = 9.0$ eta $h = 10.63$ urrats luzerarekin.	139
8.1. Atalen hasieraketa (Kepler fluxuaren aldagai aldaketa)	158
8.2. Asteroideak	160
A.1. Intel Xeon konputagailuak	175
A.2. Memoria hierarkia	176
A.3. Memoria konpartitutako sistemak	178
A.4. Memoria banatutako sistemak	178
A.5. UMA sistemak	179
A.6. NUMA sistemak	179
A.7. OpenMP programazio modeloa	182
A.8. Matrize bakanak	187

Taulen zerrenda.

Taulen Zerrenda

2.1. CO1035 konposizio metodoa	35
2.2. $CSABA_4$ splitting metodoa	39
2.3. $ABAH1064$ splitting metodoa	40
2.4. Integrazio metodo simplektikoen laburpena	40
3.1. Eguzki-sistemaren parametro nagusienak	48
3.2. Kanpo-planeten masak	50
3.3. Kanpoko planeten problemaren hasierako balioak	51
3.4. Planeten GM balioak	52
3.5. 9-planeten hasierako balioak	53
3.6. Eguzki-sistemaren planeta, Ilargia eta asteroide nagusien parametroak	54
3.7. Ilargiaren Lurrarekiko hasierako balioak	54
4.1. IEEE-754 koma-higikorreko formatuak	57
5.1. Puntu-fikoaren iterazio portzentaia eta iterazio kopuruaren batez-bestekoa.	85
6.1. LU deskonposaketak	106
6.2. Puntu-finkoa versus Newton iterazioa	119
A.1. BLAS liburutegiaren eraginkortasuna.	186
D.1. Hitz-zerrenda.	206

Bibliografia

- [1] *Intel Math Kernel Library. Refrence Manual*. Intel, 2015.
- [2] The openmp api specification for parallel programming, 2017.
- [3] Sverre Aarseth, Christopher Tout, and Rosemary Mardling. *The Cambridge n-body lectures*, volume 760. Springer, 2008.
- [4] Edward Anderson, Zhaojun Bai, Christian Bischof, L Susan Blackford, James Demmel, Jack Dongarra, Jeremy Du Croz, Anne Greenbaum, Sven Hammarling, Alan McKenney, et al. *LAPACK Users' guide*. SIAM, 1999.
- [5] KV Vladimirov Andrey. *Test-driving intel xeon phi coprocessors with a basic n-body simulation*. *Coflax International*, 3:2, 2013.
- [6] Mikel Antonana, Joseba Makazaga, and Ander Murua. Efficient implementation of symplectic implicit runge-kutta schemes with simplified newton iterations. *arXiv preprint arXiv:1703.07697*, 2017.
- [7] Mikel Antonana, Joseba Makazaga, and Ander Murua. Reducing and monitoring round-off error propagation for symplectic implicit runge-kutta schemes. *Numerical Algorithms*, pages 1–20, 2017.
- [8] Harald Atmanspacher and Sabine Maasen. *Reproducibility: Principles, Problems, Practices, and Prospects*. John Wiley & Sons, 2016.
- [9] Marc Baboulin, Alfredo Buttari, Jack Dongarra, Jakub Kurzak, Julie Langou, Julien Langou, Piotr Luszczek, and Stanimire Tomov. Accelerating scientific computations with mixed precision algorithms. *Computer Physics Communications*, 180(12):2526 – 2533, 2009.
- [10] Pavan Balaji. *Programming models for parallel computing*. MIT Press, 2015.
- [11] Josh Barnes and Piet Hut. *A hierarchical o (n log n) force-calculation algorithm*. *nature*, 324(6096):446–449, 1986.

- [12] André Berger. *A brief history of the astronomical theories of paleoclimates*. Springer, 2012.
- [13] Gregory Beylkin and Kristian Sandberg. *Ode solvers using band-limited approximations*. *Journal of Computational Physics*, 265:156–171, 2014.
- [14] Jeff Bezanson, Alan Edelman, Stefan Karpinski, and Viral B Shah. *Julia: A fresh approach to numerical computing*. *SIAM*, 2014.
- [15] Theodore A Bickart. *An efficient solution process for implicit runge–kutta methods*. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14(6):1022–1027, 1977.
- [16] Sergio Blanes, Fernando Casas, Ariadna Farres, Jacques Laskar, Joseba Makazaga, and Ander Murua. *New families of symplectic splitting methods for numerical integration in dynamical astronomy*. *Applied Numerical Mathematics*, 68:58–72, 2013.
- [17] Ben K Bradley, Brandon A Jones, Gregory Beylkin, Kristian Sandberg, and Penina Axelrad. *Bandlimited implicit runge–kutta integration for astrodynamics*. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 119(2):143–168, 2014.
- [18] Dirk Brouwer. *On the accumulation of errors in numerical integration*. *The Astronomical Journal*, 46:149–153, 1937.
- [19] Luigi Brugnano, Gianluca Frasca Caccia, and Felice Iavernaro. *Efficient implementation of gauss collocation and hamiltonian boundary value methods*. *Numerical Algorithms*, 65(3):633–650, 2014.
- [20] VA Brumberg. *Celestial mechanics: Past, present, future*. *Solar System Research*, 47(5):347–358, 2013.
- [21] Kevin Burrage. *Parallel methods for initial value problems*. *Applied Numerical Mathematics*, 11(1-3):5–25, 1993.
- [22] John C Butcher. *On the implementation of implicit runge-kutta methods*. *BIT Numerical Mathematics*, 16(3):237–240, 1976.
- [23] John Charles Butcher. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Second edition, Wiley, 2008.
- [24] J Carrier, Leslie Greengard, and Vladimir Rokhlin. *A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations*. *SIAM journal on scientific and statistical computing*, 9(4):669–686, 1988.

- [25] John E Chambers. [A hybrid symplectic integrator that permits close encounters between massive bodies](#). *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 304(4):793–799, 1999.
- [26] Philippe Chartier, Ander Murua, and Jesus Maria Sanz-Serna. [Higher-order averaging, formal series and numerical integration i: B-series](#). *Foundations of Computational Mathematics*, 10(6):695–727, 2010.
- [27] Martyn Corden. [Differences in floating-point arithmetic between intel® xeon® processors and the intel® xeon phi™ coprocessor x100 product family](#), 2013.
- [28] Robert M Corless and Nicolas Fillion. [A graduate introduction to numerical methods](#). *AMC*, 10:12, 2013.
- [29] John Danby. Fundamentals of celestial mechanics. *Richmond: Willman-Bell, | c1992, 2nd ed.*, 1, 1992.
- [30] Theodorus Jozef Dekker. [A floating-point technique for extending the available precision](#). *Numerische Mathematik*, 18(3):224–242, 1971.
- [31] DumitruN. Deleanu. [Fast detection of chaotic or regular behavior of double pendulum system: application of the fast norm vector indicator method](#).
- [32] Jack Dongarra, Stanimire Tomov, Piotr Luszczek, Jakub Kurzak, Mark Gates, Ichitaro Yamazaki, Hartwig Anzt, Azzam Haidar, and Ahmad Abdelfattah. [With extreme computing, the rules have changed](#). *Computing in Science & Engineering*, 19(3):52–62, 2017.
- [33] Michael Driscoll, Evangelos Georganas, Penporn Koanantakool, Edgar Solomonik, and Katherine Yelick. [A communication-optimal n-body algorithm for direct interactions](#). In *Parallel & Distributed Processing (IPDPS), 2013 IEEE 27th International Symposium on*, IEEE, 2013, pages 1075–1084.
- [34] Martin J Duncan, Harold F Levison, and Man Hoi Lee. [A multiple time step symplectic algorithm for integrating close encounters](#). *The Astronomical Journal*, 116(4):2067, 1998.
- [35] Siegfried Eggl and Rudolph Dvorak. [An introduction to common numerical integration codes used in dynamical astronomy](#). In *Dynamics of small solar system bodies and exoplanets*, Springer, 2010, pages 431–480.
- [36] Daniel C Fabrycky. [Non-keplerian dynamics](#). *arXiv preprint arXiv:1006.3834*, 2010.

- [37] Ariadna Farrés, Jacques Laskar, Sergio Blanes, Fernando Casas, Joseba Makazaga, and Ander Murua. [High precision symplectic integrators for the solar system](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 116(2):141–174, 2013.
- [38] Kang Feng and Mengzhao Qin. [Symplectic geometric algorithms for hamiltonian systems](#). Springer, 2010.
- [39] A. Fienga. [International workshop in astronomy and dynamics](#). In *INPOP planetary ephemerides: from 2013 to 2015.*, Observatoire de Paris, 2015.
- [40] A Fienga, H Manche, J Laskar, and Mickael Gastineau. [Inpop06: a new numerical planetary ephemeris](#). *Astronomy & Astrophysics*, 477(1):315–327, 2008.
- [41] William M Folkner, James G Williams, Dale H Boggs, Ryan S Park, and Petr Kuchynka. [The planetary and lunar ephemerides de430 and de431](#). *Interplanet. Netw. Prog. Rep.*, 196:1–81, 2014.
- [42] Laurent Fousse, Guillaume Hanrot, Vincent Lefèvre, Patrick Pélissier, and Paul Zimmermann. [Mpfr: A multiple-precision binary floating-point library with correct rounding](#). *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 33(2):13, 2007.
- [43] Daan Frenkel and Berend Smit. [Understanding molecular simulation: from algorithms to applications](#), volume 1. Academic press, 2001.
- [44] Toshio Fukushima. [Reduction of round-off error in symplectic integrators](#). *The Astronomical Journal*, 121(3):1768, 2001.
- [45] Toshio Fukushima. [Numerical comparison of two-body regularizations](#). *The Astronomical Journal*, 133(6):2815, 2007.
- [46] Martin J Gander and Ernst Hairer. [Analysis for parareal algorithms applied to hamiltonian differential equations](#). *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 259:2–13, 2014.
- [47] GNU. [libquadmath v 1.3](#), 2008.
- [48] Stefan Goedecker and Adolfy Hoisie. [Performance optimization of numerically intensive codes](#). SIAM, 2001.
- [49] KR Grazier, WINewman, James M Hyman, Philip W Sharp, and David J Goldstein. [Achieving brouwer’s law with high-order stormer multistep methods](#). *ANZIAM Journal*, 46:786–804, 2005.

- [50] E. Hairer and C. Lubich. *Numerical solution of ordinary differential equations*. In *The Princeton Companion to Applied Mathematics*, Nicholas J. Higham, Mark R. Dennis, Paul Glendinning, Paul A. Martin, Fadil Santosa, and Jared Tanner, editors, Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, 2015, pages 293–305.
- [51] E Hairer, SPNørsett, and G Wanner. *Solving ordinary differential equations I: nonstiff problems*, vol. 8. 1993.
- [52] E Hairer and G Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer, Berlin, 1996.
- [53] E. Hairer and G. Wanner. *Initial value problems*. In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, Springer, 2015, pages 691–694.
- [54] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. *Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*, volume 31. Springer Science & Business Media, 2006.
- [55] Ernst Hairer, Robert I McLachlan, and Alain Razakarivony. *Achieving brouwer’s law with implicit runge–kutta methods*. *BIT Numerical Mathematics*, 48(2):231–243, 2008.
- [56] Wayne B Hayes. *Is the outer solar system chaotic?* *Nature Physics*, 3(10): 689–691, 2007.
- [57] David M Hernandez and Edmund Bertschinger. *Symplectic integration for the collisional gravitational n-body problem*. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 452(2):1934–1944, 2015.
- [58] Yozo Hida, Xiaoye S Li, and David H Bailey. *Algorithms for quad-double precision floating point arithmetic*. In *Computer Arithmetic, 2001. Proceedings. 15th IEEE Symposium on*, IEEE, 2001, pages 155–162.
- [59] Nicholas J Higham. *Accuracy and stability of numerical algorithms*. Siam, 2002.
- [60] Nicholas J Higham. *Programming languages: An applied mathematics view*. 2015.
- [61] Leslie Hogben. *Handbook of linear algebra*. Chapman and Hall/CRC, 2013.
- [62] IEEE. *Ieee standard for floating-point arithmetic*. 2008.

- [63] Tomoaki Ishiyama, Keigo Nitadori, and Junichiro Makino. [4.45 pflops astrophysical n-body simulation on k computer: the gravitational trillion-body problem](#). In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, IEEE Computer Society Press, 2012, page 5.
- [64] Takashi Ito and Kiyotaka Tanikawa. Trends in 20th century celestial mechanics. *Publ. Natl. Astron. Obs. Jpn*, 9:55–112, 2007.
- [65] Laurent O. Jay. Preconditioning of implicit runge-kutta methods. *Scalable Computing: Practice and Experience*, 10, 2009.
- [66] Hugo Jiménez-Pérez and Jacques Laskar. [A time-parallel algorithm for almost integrable hamiltonian systems](#). *arXiv preprint arXiv:1106.3694*, 2011.
- [67] MP Calvo JM Sanz-Serna. *Numerical Hamiltonian problems*. Chapman and Hall, 1994.
- [68] Mioara Joldeş, Olivier Marty, Jean-Michel Muller, and Valentina Popescu. [Arithmetic algorithms for extended precision using floating-point expansions](#). *IEEE Transactions on Computers*, 65(4):1197–1210, 2016.
- [69] W Kahan. Further remarks on reducing truncation errors. *Communications of the ACM*, 8(1):40, 1965.
- [70] George H Kaplan, John A Bangert, Agnes Fienga, William Folkner, Catherine Hohenkerk, Marina Lukashova, Elena V Pitjeva, P Kenneth Seidelmann, Michael Sveshnikov, Sean Urban, et al. [Historical reflections on the work of iau commission 4 \(ephemerides\)](#). *arXiv preprint arXiv:1511.01546*, 2015.
- [71] KV Kholshevnikov and ED Kuznetsov. [Review of the works on the orbital evolution of solar system major planets](#). *Solar System Research*, 41(4): 265–300, 2007.
- [72] Sergei A Klioner. [Basic celestial mechanics](#). *arXiv preprint arXiv:1609.00915*, 2016.
- [73] D Knuth. The art of computer programming: Vol 2/seminumerical algorithms, 1969.
- [74] Sergei Kopeikin, Michael Efroimsky, and George Kaplan. *Relativistic celestial mechanics of the solar system*. John Wiley & Sons, 2011.

- [75] Fred T Krogh. [An adams guy does the runge-kutta](#). 1997.
- [76] Anne Kvaerno and Ben Leimkuhler. [A time-reversible, regularized, switching integrator for the n-body problem](#). *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(3):1016–1035, 2000.
- [77] MP Laburta. [Construction of starting algorithms for the rk-gauss methods](#). *Journal of computational and applied mathematics*, 90(2):239–261, 1998.
- [78] Jacques Laskar. [The limits of earth orbital calculations for geological time-scale use](#). *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 357(1757):1735–1759, 1999.
- [79] Jacques Laskar. [Numerical challenges in long term integrations of the solar system](#). In *Computer Arithmetic (ARITH), 2015 IEEE 22nd Symposium on*, IEEE, 2015, pages 104–104.
- [80] Jacques Laskar, Agnes Fienga, Mickael Gastineau, and Herve Manche. [La2010: a new orbital solution for the long-term motion of the earth](#). *Astronomy & Astrophysics*, 532:A89, 2011.
- [81] Jacques Laskar and Mickael Gastineau. [Existence of collisional trajectories of mercury, mars and venus with the earth](#). *Nature*, 459(7248):817–819, 2009.
- [82] Jacques Laskar and Philippe Robutel. [High order symplectic integrators for perturbed hamiltonian systems](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 80(1):39–62, 2001.
- [83] Benedict Leimkuhler and Sebastian Reich. *Simulating hamiltonian dynamics*, volume 14. Cambridge University Press, 2004.
- [84] Harold F Levison and Martin J Duncan. [The long-term dynamical behavior of short-period comets](#). *Icarus*, 108(1):18–36, 1994.
- [85] Werner Liniger and Ralph A Willoughby. [Efficient integration methods for stiff systems of ordinary differential equations](#). *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 7(1):47–66, 1970.
- [86] Sanz Serna J.M. Diaz J.C Lopez Marcos, M.A. [Are gauss-legendre methods useful in molecular dynamics ?](#) *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 1996.

- [87] Piotr Luszczek, Jakub Kurzak, and Jack Dongarra. [Looking back at dense linear algebra software](#). *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 74(7):2548–2560, 2014.
- [88] Robert I McLachlan. [Composition methods in the presence of small parameters](#). *BIT Numerical Mathematics*, 35(2):258–268, 1995.
- [89] Robert I McLachlan and Pau Atela. [The accuracy of symplectic integrators](#). *Nonlinearity*, 5(2):541, 1992.
- [90] A Morbidelli. [Modern integrations of solar system dynamics](#). *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 30(1):89–112, 2002.
- [91] Jean-Michel Muller, Nicolas Brisebarre, Florent De Dinechin, Claude-Pierre Jeannerod, Vincent Lefevre, Guillaume Melquiond, Nathalie Revol, Damien Stehlé, and Serge Torres. [Handbook of floating-point arithmetic](#). Springer Science & Business Media, 2009.
- [92] Nobelprize.org. [The nobel prize in chemistry 2013](#), May 2014.
- [93] Hans Olsson and Gustaf Sderlind. [The approximate runge-kutta computational process](#). *BIT Numerical Mathematics*, 40(2):351–373, 2000.
- [94] Michael L Overton. [Numerical computing with IEEE floating point arithmetic](#). Siam, 2001.
- [95] Peter Pacheco. [An introduction to parallel programming](#). Elsevier, 2011.
- [96] EV Pitjeva and NP Pitjev. [Development of planetary ephemerides epm and their applications](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 119(3-4):237–256, 2014.
- [97] Kevin P. Rauch and M. Holman. [Dynamical chaos in the wisdom-holman integrator: origins and solutions](#). 1998.
- [98] Yousef Saad. [Iterative methods for sparse linear systems](#). SIAM, 2003.
- [99] Prasenjit Saha, Joachim Stadel, and Scott Tremaine. [A parallel integration method for solar system dynamics](#). *arXiv preprint astro-ph/9605016*, 1996.
- [100] Prasenjit Saha and Scott Tremaine. [Symplectic integrators for solar system dynamics](#). *The Astronomical Journal*, 104:1633–1640, 1992.
- [101] Prasenjit Saha and Scott Tremaine. [Long-term planetary integration with individual time steps](#). *arXiv preprint astro-ph/9403057*, 1994.

- [102] Jesús María Sanz-Serna. [Symplectic integrators for hamiltonian problems: an overview](#). *Acta numerica*, 1:243–286, 1992.
- [103] JM. Sanz-Serna. [Hamiltonian systems](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, Springer, 2015, pages 617–624.
- [104] JM. Sanz-Serna. [Symplectic methods](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, Springer, 2015, pages 1451–1458.
- [105] PW Sharp. [Long initial value test problems from simulations of the solar system](#). Technical report, Department of Mathematics, The University of Auckland, New Zealand, 2001.
- [106] Mark Sofroniou and Giulia Spaletta. [Derivation of symmetric composition constants for symmetric integrators](#). *Optimization Methods and Software*, 20(4-5):597–613, 2005.
- [107] Pat H Sterbenz. [Floating-point computation](#). Prentice Hall, 1973.
- [108] Gerald J Sussman and Jack Wisdom. [Chaotic evolution of the solar system](#). Technical report, DTIC Document, 1992.
- [109] Robert van de Geijn Victor Eijkhout and Edmond Chow. [Introduction to High Performance Scientific Computing](#). lulu.com, 2011.
- [110] Greg Wilson, DA Aruliah, C Titus Brown, Neil P Chue Hong, Matt Davis, Richard T Guy, Steven HD Haddock, Kathryn D Huff, Ian M Mitchell, Mark D Plumley, et al. [Best practices for scientific computing](#). *PLoS Biol*, 12(1):e1001745, 2014.
- [111] Jack Wisdom. [Symplectic correctors for canonical heliocentric n-body maps](#). *The Astronomical Journal*, 131(4):2294, 2006.
- [112] Jack Wisdom and David M Hernandez. [A fast and accurate universal kepler solver without stumpff series](#). *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 453(3):3015–3023, 2015.
- [113] Jack Wisdom and Matthew Holman. [Symplectic maps for the n-body problem](#). *The Astronomical Journal*, 102:1528–1538, 1991.
- [114] Wolfram Research, Inc. [Mathematica](#).

- [115] Dexuan Xie. A new numerical algorithm for efficiently implementing implicit runge-kutta methods. *Department of Mathematical Sciences. University of Wisconsin, Milwaukee, Wisconsin, USA*, 2009.
- [116] Haruo Yoshida. [Recent progress in the theory and application of symplectic integrators](#). In *Qualitative and Quantitative Behaviour of Planetary Systems*, Springer, 1993, pages 27–43.