
**N-GORPUTZEKO PROBLEMA GRABITAZIONALAREN
EBAZPENERAKO ZENBAKIZKO METODOEN
AZTERKETA.**

Mikel Antonana Otano

Informatika Fakultatea
Euskal-Herriko Unibertsitatea
Donostia

2017



Gaien Aurkibidea

I. Introduction	3
1. Sarrera.	5
2. Zenbakizko integratzaile simplektikoak.	13
3. Problemak.	43
4. Koma higikorreko aritmetika.	61
5. Zientzia konputazioa.	71
II. Ekarpenak.	89
6. IRK: Puntu-finkoaren iterazioa.	91
7. IRK: Newtonen Iterazioa.	115
8. IRK: Eguzki-sistema.	145
III. Ondorioak.	155
9. Eztabaida.	157
10. Konklusioak.	161
IV. Eranskinak	163
A. Ekuazioen garapenak.	165
B. Inplementazioak.	173

C. Nire-Argibideak **177**

Bibliografia **181**

Gaien Aurkibidea (detailed)

I. Introduction	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	11
1.6. Laburpena	12
2. Zenbakizko integratzaile simplektikoak.	13
2.1. Sarrera	13
2.2. Zenbakizko integrazio metodoak	13
2.2.1. Oinarrizko kontzeptuak	13
2.2.2. Sistema-Hamiltondarra	18
2.2.3. Metodo simplektikoak	20
2.3. Runge-Kutta metodo simplektikoak	24
2.3.1. Runge-Kutta metodoak	24
2.3.2. Gauss metodoa	26
2.3.3. IRK implementazioa	29
2.4. Konposizio eta Splitting metodoak	34
2.4.1. Konposizio metodoak	34
2.4.2. Splitting metodoak	36
2.4.3. Eguzki-sistemari egokitutako splitting metodoak	38
2.5. Laburpena	40
3. Problemak.	43
3.1. Sarrera	43
3.2. Pendulu bikoitza	44
3.2.1. Pendulu bikoitz arrunta	44
3.2.2. Pendulu bikoitz zurruna	45
3.3. N-Gorputzen problema	47

3.4.	Eguzki-sistema	49
3.4.1.	Sarrera	49
3.4.2.	Problemak	51
3.5.	Laburpena	57
4.	Koma higikorreko aritmetika.	61
4.1.	Sarrera	61
4.2.	<i>IEEE-754</i> estandarra	61
4.3.	Biribiltze errorea	64
4.4.	Biribiltze errorearen gutxitzeko teknikak	67
4.5.	Laburpena	70
5.	Zientzia konputazioa.	71
5.1.	Sarrera	71
5.2.	Eraginkortasuna	72
5.3.	Hardwarea	75
5.4.	Programazio lengoaiak	80
5.5.	Aljebra lineal dentsorako liburutegiak	83
5.6.	Konpiladorea	87
5.7.	Laburpena	88
II.	Ekarpenak.	89
6.	IRK: Puntu-finkoaren iterazioa.	91
6.1.	Sarrera	91
6.2.	Hairer-en implementazioa	92
6.3.	Gure implementazioa	94
6.3.1.	Metodoaren birformulazioa	95
6.3.2.	Geratze irizpidea	97
6.3.3.	Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak	99
6.3.4.	Biribiltze errorearen estimazioa	101
6.3.5.	Algoritmoa	103
6.4.	Zenbakizko esperimentuak	105
6.4.1.	Problemak	105
6.4.2.	Energia errorearen jatorria	105
6.4.3.	Errore azterketa estatistikoa	107
6.4.4.	Biribiltze errorearen estimazioa	113
6.5.	Laburpena	113

7. IRK: Newtonen Iterazioa.	115
7.1. Sarrera.	115
7.2. IRK-Newton estandarra.	116
7.3. IRK-Newton eraginkorra.	121
7.3.1. Ekuazio-sistema.	121
7.3.2. IRK metodo simplektikoen garapena.	124
7.3.3. IRK metodo simetriko simplektikoen garapena.	124
7.4. IRK-Newton estandarra (formulazio berria).	128
7.5. IRK-Newton eraginkorra (formulazio berria).	132
7.6. IRK Newtonen iterazio Mixtoa.	136
7.6.1. Sasi-Newton iterazioa.	136
7.6.2. IRK-Newton Mixtoa	136
7.7. Zenbakizko esperimentuak.	140
7.7.1. Problemak	140
7.7.2. Biribiltze errorearen azterketa.	140
7.7.3. Puntu-finkoa versus Newton iterazioa	141
7.8. Laburpena.	143
8. IRK: Eguzki-sistema.	145
8.1. Sarrera.	145
8.2. Eguzki-sistemaren integraziorako metodoak (review).	145
8.2.1. Efemerideak.	145
8.2.2. Eguzki-sistemaren integrazio luzeak.	149
8.3. Implementazio berria.	152
8.4. Denbora birparametrizazioa.	153
8.4.1. Adibidea.	154
8.5. Laburpena.	154
III. Ondorioak.	155
9. Eztabaida.	157
9.1. Koordenatu sistemak.	157
9.2. Hamiltondar banagarriak.	157
9.3. IRK Newton.	157
10. Konklusioak.	161
10.1. Sarrera.	161
10.2. Laburpena.	161

IV. Eranskinak	163
A. Ekuazioen garapenak.	165
A.1. Kepler hasierako baliodun problema.	165
A.2. Koordenatu sistemak.	168
A.3. Newton eraginkorraren garapena.	171
B. Implementazioak.	173
B.1. Egitura orokorra.	173
B.2. IRK puntu-finkoa.	175
B.3. IRK Newton.	175
B.4. IRK Eguzki-sistema.	176
B.5. Konposizio-Splitting metodoak.	176
C. Nire-Argibideak	177
C.1. IRK-Newton.	177
C.2. FMA.	178
C.3. Hitz-zerrenda.	178
Bibliografia	181

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

Vaclav Havel

I. Atala

Introduction

1. Kapitulua

Sarrera.

1.1. Ikerketaren testuingurua.

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

Garai batean, N-gorputzen problemak teori analitikoen bidez aztertzen ziren baina konputagailuen sorrerarekin, zenbakizko integrazioak tresna nagusia bilakatu ziren. Azken hamarkadetan, bai konputazio teknologien aurrerapenari esker bai algoritmo berrien sorrerari esker, zenbakizko azterketek garapen handia izan dute. Zenbakizko simulazioen laguntzaz, eguzki-sistemaren dinamikaren funtsezko galdera batzuk ezagutu ditugu eta berriki, Karplus-en taldeak 2013. urteko kimika Nobel saria [81] 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 [35] 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. N-gorputz kopurua edozein izanik, hauen arteko kolisioak gerta daitezkeen problemak. Integrazio hauetan, konplexutasun handiari aurre egin behar zaio. Gorputz kopurua miliotakoa [55] izan dateke eta kolisiotik gertuko egoeren ondorioz, kalkulueta egindako zenbakizko errore txikiiek soluzioan eragin handia izan dezakete.

Gure helburua, eguzki-sistemaren epe luzeko eta doitasun handiko integrazioetarako egoki 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 [95, 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, luraren orbitan izandako aldaken eraginez gertatu zirela azaltzen duen teoria (Milankovitch 1941) [12] baiezatzeko, planeten orbiten efemeride zehatzetan oinarritu dira.

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

Konputazio-teknologi aurrerapenak handiak izan arren, eguzki-sistemaren simulazio hauek konputazionalki oso garestiak dira eta exekuzio denbora luzeak behar dituzte; adibidez, Laskar-ek [70, 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 [69].

1.2. Motibazioa.

Metodo simplektikoen artean erabilienak, izaera esplizituko algoritmoak dira. Oro har problema zurruna ez bada, metodo esplizituak metodo implizituak baino era-ginkorragoak dira. Metodo implizituetan ekuazio sistema ez-lineala askatu behar da (eragiketa garestia) eta honek, metodo esplizituekiko CPU denbora 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 implizituetan ez da halakorik gertatzen, urrats luzeagoak eman ditzakete nahiz eta problema zurruna izan.

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

Gaussen metodo implizitu simplektikoaren azterketa egingo dugu. Hainbat auto-rek (Hairer [46, 47] eta Sanz Serna[58]) metodo honen potentziala nabarmendu dute. Azken urtetan, espazioko satelite artifizialen arloan ere, Gaussen integracio metodoarekiko interesa azaldu dute [17, 13].

Gaussen integracio metodo implizituen abantaila nagusienetako malgutasuna da. Ekuazio implizituak ebazteko, teknika ezberdinak konbinatu daitezke eta ondorioz, integratu nahi dugun problemari egokitzeko 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 differentialeko sistemak integratzeko metodo simplektikoak, implizituak izan behar dute. Bestalde, Gauss metodoak paralelizagarriak dira, hau da, ekuazio differentzial konplexuak kalkulatu behar ditugunean, s -ataletako funtzio konputazioak paraleloan exekutatu daitezke. Azkenik ez dugu ahaztu behar, ordena altuko Gauss metodoak existitzen direla eta hauek beharrezkoak ditugula doitasun handiko integracioetarako.

Atal hau bukatzeko, Sanz Sernaren [89, 1992] hitzak berreskuratuko ditugu.

On the other hand, little has been undertaken in the construccion of practical high-order methods and the design of serious symplectic software is still waiting consideration.

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 integrazorako Gaussen metodo implizituaren implementazio eraginkorra proposatzea edota, bide horretan aurrera-pausoak ematea da. Helburu hau lortzeko, honako aspektu hauek bereziki zain-

duko ditugu: eguzki-sistemaren problemaren ezaugarriak, biribiltze erroreen garapena eta egungo konputagailuen gaitasunari egokitutako algoritmo azkarren diseinua.

N-gorputzeko problema grabitazionalari dagokionez, eguzki-sistemaren eredu simplea integratuko dugu. Eguzki-sistemaren gorputzak masa puntuak kontsideratuko ditugu eta gure ekuazio diferentzialek, gorutz hauen arteko erakarpen grabitazionalak bakarrik kontutan hartuko dituzte. Beraz, eguzki-sistemaren eredu konplexuagoetako erlatibilitatea ez da erlatabil, gorutzaren formaren eragina, eta beste zenbait indar ez-grabitazionalak ez da kontutan hartu.

Zeintzuk dira eguzki-sistemaren problemaren ezaugarri bereziak? Batetik, planeten mugimendu orbitala, perturbazio txikiak dituen mugimendu Kepleriarrada. Beraz, mugimendu Kepleriarra zehazki kalkula daitekeenez, eguzki-sistemaren planeten orbiten konputazioaren oinarria da. Bestetik, badugu gorutz 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-planetak eragin oso txikia daukate, eragina, masaren eta distantziaren alderantzizkoaren proportzionala baita. Eguzki-sistema egonkorra kontsideratzen da, hau da, hurrengo bilioi urteetan planeten arteko talkarik ez da espero gertatzea. Orbiten denbora eskalak anitzak dira; ilargiaren luraren inguruko orbitaren periodoa 27.32 egunetakooa, luraren eguzkiaren ingurukoa 1 urtekoa eta Neptunorena 163 urtekoa. Eguzki-sistemaren egitura aberats honi, abantaila gehien ateratzen dion planteamendua bilatuko dugu.

Konputagailuen koma-higikorreko aritmetika ondo ulertzear garrantzitsua da. Zenbaki errealen adierazpen finitua 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 tarteko irtenbideak landu behar dira, esate baterako, doitasun ezberdinak nahasten dituzten implementazioak.

Konputazioko teknologiaren garapenean, algoritmo azkarren diseinua baldintzatzen duten bi ezaugarri azpimarratu behar dira. Batetik, konputagailuak orokorrean paraleloak dira eta algoritmo azkarrak 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. Al-

goritmo baten kode unitateak paraleloan exekutatzeak badu gainkarga bat eta beraz, algoritmoaren exekuzioa parallelizazioaz azkartzea lortzeko, unitate bakoitzaren tamainak esanguratsua izan behar du. Gure eguzki-sistemaren eredua simplea da eta logikoa da pentsatzea eredu konplexuagoetan, parallelizazioak abantaila handiagoa erakutsiko duela. Bestalde, gorputzen kopurua handia den problemetan, hauen arteko interakzio kopuru handia kalkulatu behar da ($\mathcal{O}(N^2)$) eta indar hauen hurbilpena modu eraginkorrean kalkulatzeko metodo ezagunak daude: *tree code*[11] eta *fast multipole method*[23] izeneko metodoak. Baino gure probleman gorputz kopurua txikia denez, teknika hauek gure eremutik kanpo utzi ditugu.

1.4. Ekarpenak.

Tesiaren lana hiru ataletan banatu dugu. Lehen urratsean, Gauss metodoaren urratsa emateko puntu-finkoaren iterazioaren bidezko implementazioa aztertu dugu eta gure implementazioen oinarriak finkatu ditugu. Bigarren fasean, Gauss metodoaren urratsa emateko, Newton iterazioaren bidezko implementazio eraginkorra lortzeko ahalegin berezia egin dugu. Problema zurruna denean, puntu-finkoaren iterazio ez da eraginkorra eta Newtonen iterazioa aplikatu behar da. Gainera problema ez-zurruna izanik ere, Newton iterazioak interesgarriak izan daitezke; bereziki doitasun altuko (doitasun laukoitza) konputazioetan, metodoaren konbergentzia ezaugarri onak direla-eta. Hirugarren fasean ...

Jarraian, atal bakoitzean egindako ekarpen nagusienak laburtuko ditugu:

1. IRK puntu finkoa.

Gauss metodoaren puntu finkoaren implementazioaren azterketa sakon bat egin dugu eta horretarako, Hairer-en implementazioa [47] hartu dugu gure lanaren abiapuntua. Kalitatezkoa implementazio hau hobetzeko aukerak ikuhi ditugu eta implementazio sendoago bat proposatu dugu. Gure ekarpenak hauek izan dira:

(a) Metodoaren birformulazioa.

Gauss implizitua aplikatzen dugunean, metodoa definitzen duten birlbildutako koefiziente errealkak ($\tilde{a}_{ij}, \tilde{b}_i \in \mathbb{F}$) erabiltzen dira. Formula estandarra erabiliz, koefiziente hauek ez dute metodoa simplektikoa izateko baldintza zehazki betetzen eta beraz, izaera simplektikoen propietate onak galtzen dira. Metodoaren birformulazio baliokide bat proposatu dugu, horrela simplektizitatea 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 goizegi geratzen dela baieztatu dugu. Arrazoik bi direla ikusirik, bere geratze irizpidea bi zentzutan garatu/zorroztu dugu. Lehenik, Hairer-en implementazioan, hobekuntza neurketa ataletako differentziaren norma batean oinarritzen da. Normarekiko independentea den geratze irizpidea aplikatzea zuzenagoa da, eta horregatik, ataletako edozein osagaiaren differentzia txikitzen den bitartean iterazioak egiten jarraitza finkatu dugu. Bigarrenik, iterazioetan osagai guztien hobekuntza ez du zertan beherakorra izan behar, eta okertzen diren tarteko iterazioak gerta daitezke. Arazo hau gainditzeko, iterazioren batean osagai guztien differentzia handitzea gertatzen denean, seguritateko bi iterazio gehigarri emango ditugu, iteraziotik irten aurretik.

(c) Atalen espresioaren aldaketa.

Integrazioan batura konpensatu estandarra aplikatzen dugunean, zenbakizko soluzioa $\tilde{y}_n, e_n \in \mathbb{F}^d$ lortzen dugu non $\tilde{y}_n + e_n \approx y(t_n)$ den. Hori dela-eta, metodoaren atalen espresioan \tilde{y}_n -ren ordez, $\tilde{y}_n + e_n$ era-biltzea proposatu dugu. Aldaketa honekin, zenbakizko soluzioaren doitasuna zerbaite hobetuko dela espero da.

$$Y_{n,i} = y_n + \left(e_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j} \right).$$

(d) 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 soluzioaren $\hat{y}_n + \hat{e}_n \approx y(t_n), n = 1, 2, \dots$ differentzia gisa kalkulatuko dugu. Erabiltzaileari zenbakizko soluzioaren estimazioa ezagutzeko, exekuzio bakarrean eta *CPU* gainkarga txikiarekin, bi integrazioak sekuentzialki kalkulatzeko aukera eskainiko zaio.

2. IRK Newton.

(a) Ekarpen nagusia.

S-ataletako IRK metodoa, Newton iterazioaren bidez *d*-dimentsioko ekuazio differentzial 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 baliokide moduan berridatzi dugu. Ekuazio-sistema baliokidea, $d \times d$ tamainako $[s/2] + 1$ matrize errealen LU-deskonposaketa bidez askatuko dugu. Tamaina txikiko matrizeen LU deskonposaketa azkarra denez, konputazionalki eraginkorra izatea espero dugu.

(b) Doitasun laukoitzeko implementazioa.

Doitasun laukoitzeko exekuzioetan, funtziobalioztapena oso garestia da eta funtziobalioztapenen kopurua gutxitzea bilatuko dugu. Newton osoa aplikatzen dugunean pena mereziko du, Gaussen Newton iterazioko implementazioaren ekuazio lineala askatzeko metodo iteratiboa aplikatzea.

(c) Newton mixtoa.

3. IRK Eguzki-sistema.

Hirugarren urratsean, eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioan arituko gara. Ekarpenean handiena, atalen hasieraketa berri bat aplikatzea da alde Keppleriarraren fluxuan oinarrituz. IRK metodoak eskaintzen digun malgutasunari esker eta N gorputzetako problema grabitazionalaren ezaugarriez baliatuz implementazio ezberdinak egin ditugu. Implementazio hauen eraginkortasuna, egungo integratzaile simplektiko esplizituekin konparatu ditugu.

4. Birparametrizazioa.

Azken urratsean, esperimentalki, eguzki-sistemaren integrazioan denboraren birparametrizazio teknikaren aplikazio simple bat erakutsiko dugu. Integratzaile simplektikoak luzera finkoko urratsa eduki behar du eta zentzu honetan, birparametrizazioa eraginkortasuna hobetzeko beste bide bat da.

1.5. Tesiaren egitura.

Tesiaren lehenengo (1 – 5) kapitulueta, zenbakizko integrazio simplektikoak eta zientzia konputazionalaren 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 integraziorako metodo simplektiko eta esplizitu nagusienak laburtu ditugu. Hirugarren kapituluau, lan honetan zenbakizko esperimentuetan eraibili ditugun hasierako baliodun problemen zehaztasunak eman ditugu. Laugarren kapituluau koma-higikorreko aritmetikan murgildu gara eta biribiltze errorearen

inguruko gaiak argitu nahi izan ditugu. Bostgarren kapituluan, egungo konputazio zientziaren hardware eta software kontzeptu nagusienak ezagutarazi nahi izan ditugu.

Tesiaren (6 – 8) kapituluetan, gure implementazio berriak garatu ditugu eta zenbakizko esperimentuen bidez, hauen eraginkortasuna erakutsi dugu. Lehenik, 6. kapituluan Gauss metodoaren puntu finkoaren iterazioaren implementazio berria eman dugu. Ondoren, 7. kapituluan Gauss metodoaren Newtonen iterazioan oinarritutako implementazio eraginkorrik azaldu ditugu. 8. kapituluan, eguzkisistemaren integracioneko implementazio deskribapena egin dugu.

Tesiaren (9 – 10) kapituluetan, gure hipotesiaren eztabaidea eta lanaren konklusioak idatzi ditugu.

Tesiaren bukaeran, hiru eranskinetan lanaren informazio osagarria bildu dugu. A-eranskinean, tesian zehar erabilitako hainbat frogentzako zehaztapenak eman dira. B-eranskinean, garatutako kodeak bildu eta erabiltzaileari erabilgarri izan dakiokoen informazioa laburtu dugu. Azkenik C-eranskinean, erabilitako notazioaren inguruko argibideak eman ditugu.

1.6. Laburpena

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 [62, 20]. Gaur egun, era horretako integrazioetarako hainbat zenbakizko metodo erabiltzen dira, bereziki bere izaera Hamiltondarra mantentzen duten metodo simplektikoak [30, 87, 31]. 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 integracio-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 integracio metodoak

2.2.1. Oinarritzko kontzeptuak.

Ekuazio diferentzial arruntak, egoera aldaketak dituzten problemen azterketarako eredu matematikoak dira [45]. 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), ekonomi azterketeetan, ...

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 denbora eta egoeraren arabera adierazi 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 [46],

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

Goiko ekuazio-sistema bektoriala (2.2), ekuazio-sistema 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 independentea, idatz daiteke. Hori horrela izanik, notazioa sinplifikatzeko 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 [25, 46].

1. Fluxua.

Fase-espazioko edozein y_0 balioari, $y(t_0) = y_0$ 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, $y(t_0) = y_0$ soluzio zehatzetik abiatuta, integrazio metodoaren urrats bat eman ondoren lortutako zenbakizko soluzioak, benteako soluzioarekiko duen aldeari deritzo.

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

- (b) Errore globala, zenbakizko soluzioaren t_0 hasierako unetik t_k une arteko errore globalari esaten zaio,

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

- (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 bantu,

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

Euler metodo esplizitua.

Eulerrek 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 konplexutasuna bakarra, f funtzioaren ebaluazio da. Lehen ordenako metodoa da,

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

eta beraz, doitasuna bikoitzeko, lan konputazionala bikoitzu behar dugu. Ikusiko dugunez, ordena altuagoko metodoekin, doitasuna handiagoa lortuko dugu, lan konputazional gutxiagorekin.

Euler metodo implizitua.

Eulerrek 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. Horretarako, iterazio metodo bat aplikatu behar da.

Iterazio metodoak

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

1. Puntu-finkoaren iterazioa.

Demagun $x = f(x)$ 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 askatzeko, non $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eta $x^{[0]} \in \mathbb{R}^n$ soluzioaren hasierako hurbilpen bat emanda, 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 Jacobiarren ebaluazioa, ekuazio sistema lineala askatu eta f funtziaren 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,

$$\dot{y} = \lambda y, \tag{2.5}$$

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 gertatzen da. Metodo implizituaren bidezko zenbakizko soluzioa zerorantz gerturatzentz 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 eraginkorra den ekuazio differentialei problema *zurrunak* (*stiff*) esaten zaie [46]. Problema *zurrunden* artean problema garrantzitsuak ditugu, esaterako eskala anitzeko sistemak.

2.2.2. Sistema-Hamiltondarak.

Hamiltondar sistemak [90], ekuazio differentzial mota garrantzitsu bat dira. $H(p, q)$ funtzi leunari dagokion *Hamiltondar sistema* osatzen duten $2d$ ekuazio differentzialak, era honetan definitzen dira,

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

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

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

Beste notazio laburtu hau ere erabili ohi da,

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

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

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

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

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

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

Funtzio Hamiltondarra hauxe da,

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

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 zehatzta,

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

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 [87, 98], Hamiltondarra modu honetan bana daiteke $H = H_k + H_I$, non alde nagusia H_K planeta bakoitzaren eguzkia-ren inguruko mugimendu Keplerriarri dagokion eta H_I , aldiz, planeten arteko interakzioek eragiten duten perturbazio txikiari.

2.2.3. Metodo simplektikoak.

Hamiltondar sistemaren problemetarako, Euler esplizitua eta Euler implizitua ez dira zenbakizko metodo egokiak. Problema hauen propietate geometrikoak mantentzen dituzte integratzaile bereziak beharrezkoak dira [58, 91]. 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 [58] eta ondorengo, azalpen ulergarriak jasotzen dituzten [46] eta [73] lanak aipatu daitezke.



2.1. Irudia: Google-n ngram aplikazioan "symplectic integrators" gaiaren bilaketan lortutako irudia.

Adibidea. Metodo simplektikoen abantaila azaltzeko, penduluaren problema aukeratu dugu [42]. Penduluaren problemaren (masa $m = 1$, $l = 1$ luzerako makila eta $g = 1$ grabitazioa) $d = 1$ askatasuneko sistema Hamiltondarra,

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

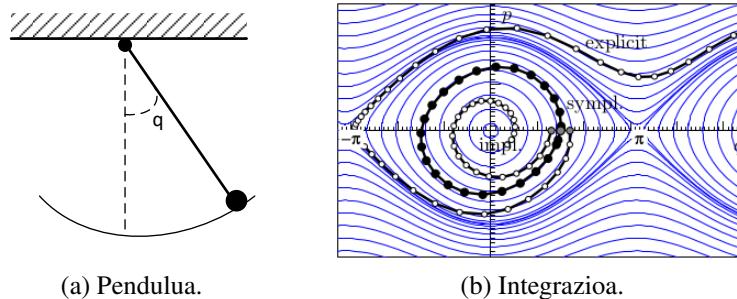
eta ekuazio diferenzialak,

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

2.2. irudian ikusi daitekeenez, Euler esplizitu eta implizituaren konportamendu kualitatiboki okerra da. Era honetan definitzen den Euler simplektikoa [46] ordea,

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

sistemaren energia kontserbatzen du integrazio luzean zehar.



2.2. 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 simplektikoa $(p(0), q(0)) = (0, 1.5)$; Euler implizitua $(p(0), q(0)) = (0, 1.3)$.

Metodo simplektikoak bi taldeetan banatuko ditugu: metodo simplektiko inplizituak eta esplizituak. Lehenengo taldean, Runge-Kutta metodo inplizituak (Gauss kolokazio metodoak) ditugu. Metodo hauek zenbakizko metodo estandarrak dira eta ekuazio differentzial orokorreai aplika daitezke. Bigarren taldean, konposizioan eta splitting-ean oinarritutako metodoak ditugu. Azken talde honeako metodoak, bakarrik Hamiltondar sistemei aplika daitezke eta gainera, Hamiltondarrak banagarria izan behar du. Konposizio eta splitting metodoak oso eraginkorradak dira.

Metodo simplektikoen propietateak.

Funtsezkoa da, integratzaile simplektiko baten bidez lortutako H Hamiltondar sistemaren zenbakizko soluzioa, perturbatutako beste Hamiltondar \tilde{H} baten soluzio zehatza gisa ulertzea [91]. Kontutan hartu behar da, zenbakizko integrazioak eragiten dituen perturbazio hauek, sistema dinamiko baten H Hamiltondar eredueraikitzerakoan, hartzen diren hurbilpenek edo datu ez ziurrek eragiten duten baino errore maila txikiagoa suposatzen dutela.

Adibidea. Demagun, askatasun maila bakarra duen sistema Hamiltondar banagarria $H = T(p) + V(q)$, Euler metodo simplektikoaren (2.9) bidez integratzen dugula. (p_n, q_n) zenbakizko soluzioak, integratu nahi dugun S Hamiltondar sistemaren $(p(t_n), q(t_n))$ soluzio zehatza hurbiltzen du. Modu honetan, benetako

fluxua φ_h^H eta zenbakizko integrazioa ϕ_h^H izendatzen baditugu,

$$\begin{aligned}(p_{n+1}, q_{n+1}) &= \phi_h^H(p_n, q_n), \\ (p(t_{n+1}), q(t_{n+1})) &= \varphi_h^H(p(t_n), q(t_n)),\end{aligned}$$

eta Euler simplektikoa $p = 1$ ordenako metodoa denez,

$$\phi_h^H(p_n, q_n) - \varphi_h^H(p(t_n), q(t_n)) = \mathcal{O}(h^2).$$

Defini daiteke beste S_2 Hamiltondar sistema bat, zeinekin Euler simplektikoa bigarren ordenako den? Hau da, (p_n, q_n) zenbakizko soluzioa, S soluziotik baino gertuago dagoen S_2 sistema?

$$\phi_h^{\tilde{H}}(p_n, q_n) - \varphi_h^{\tilde{H}}(p(t_n), q(t_n)) = \mathcal{O}(h^3).$$

Taylor seriea garatuz, lortuko dugu S_2 sistema ($f = -\partial H/\partial q$, $g = \partial H/\partial p$),

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p &= f(q) + \frac{h}{2}g(p)f'(q), \\ \frac{d}{dt}q &= g(p) - \frac{h}{2}g'(p)f(q),\end{aligned}$$

non honako Hamiltondarrari dagokion,

$$\tilde{H}_2 = T(p) + V(q) + \frac{h}{2}T'(p)V'(q) = H + \mathcal{O}(h).$$

2.3. irudian, pendulu problemaren (2.8) hasierako balio hauei ($p(0) = 0$, $q(0) = 2$) dagokien integrazioa erakutsi dugu. Izarrak, $h = 0.5$ urratsari dagokion zenbakizko soluzioa da. $H = \text{const}$ puntuko lerroak, penduluaren benetako soluzioa irudikatzen du. $\tilde{H}_2 = \text{const}$ marra lerroak, perturbatutako Hamiltondar sistemaren soluzioa irudikatzen du. Zenbakizko soluzioaren eta perturbatutako Hamiltondar sistemaren ibilbideak bat datoza ikusi daiteke.

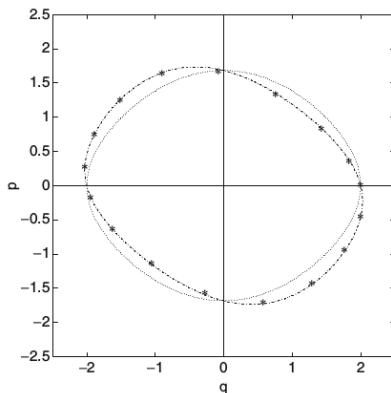
Kasu orokorra, posible da S_p Hamiltondar sistema perturbatua eraikitzea, zeinekin Euler simplektikoa p ordenakoa den. Beraz, konklusio gisa esango dugu, Hamiltondar sistema bati aplikatzen diogun metodo simplektikoaren zenbakizko soluzioa, perturbatutako Hamiltondar sistema baten soluzio ia zehatz kontsideratu behar dugula.

Sarrera hau bukatzeko, metodo simplektikoen propietate nagusienak azpimarratuko ditugu [46, 58].

1. Metodo simplektikoek, energia oso ondo kontserbatzen dute.

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

$$H(p(t), q(t)) = \text{Const.}$$



2.3. Irudia: Penduluaren problema: zenbakizko soluzioa (izarrok), benetako soluzioa (puntu lerroak) and perturbatutako soluzioa (marra lerroak) [91]

Zenbakizko soluzioak ordea, ez du $H(p_n, q_n)$ konstante mantentzen. Integracio metodoa simplektikoa bada, aritmetika zehatzarekin energia errorea bornatua mantentzen da eta drift-arik gabe. Koma-higikorreko aritmetikarekin, biribiltze errorearen eraginez energia errorea denboraren erro karatuaren arabera hasiko 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, p eta q egoera aldagaien errorea $\mathcal{O}(h^p)$ da eta hazkunde lineala. Oro har, integratzaile arruntek errore hazkunde koadratikoa dute eta ondorioz, integracio luzeetan konportamendu txarra azaltzen dute.

3. Metodo simplektiko garrantzitsuenak simetrikoak dira.

4. Urrats luzera finkoa erabili behar da izaera simplektikoa ez galtzeko [58].

Metodo gehienak eraginkorrik izateko, errore estimazio baten arabera integrazioan zehar urrats luzera egokitzen dute. Soluzioaren aldaketa azkarra gertatzen diren uneetarako urratsa txikia, eta aldiz, urratsa handia soluzioa leuna den uneetarako.

2.3. Runge-Kutta metodo simplektikoak.

1988. urtean, Sanz-Sernak [58] *Gauss metodoa* simplektikoa zela ohartu zen, sataleko ordena altueneko metodoa ($p = 2s$) izanik. Runge-Kutta metodo implizitua da eta hainbat propietate interesgarri ditu.

2.3.1. Runge-Kutta metodoak.

Runge-Kutta metodoak [46], 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 taulan moduan laburtu ohi dira,

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

Hasierako baliodun problemaren (2.2) $y_n \approx y(t_n)$ 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,

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

Bi idei dago, Runge-Kutta metodoaren oinarrian. Lehenik, integrala

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

non $\dot{y}(t) = f(t, y(t))$ den, b_i pisuak eta c_i nodoak dituen hurrengo koadratura formularekin hurbiltzen da,

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

Bigarrenik, $Y_i \approx y(t_0 + c_i h)$ atalen 0 eta c_i arteko integrala, beste koadratura formularekin hurbiltzen da,

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

Metodo esplizituak (ERK) eta implizituak (IRK).

Runge-Kutta 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,

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

$Y_{n,i}$ 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 *Implicit Midpoint method*-aren definizioa,

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

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

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

ERK lau-ataletako metodo klasikoa, $p = 4$ ordenakoa dugu. Ordena altuko *ERK* metodoak aurkitzea konplexua da, koefizienteek bete behar dituzten ordena baldintzen kopurua esponentzialki hazten baitira. 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 sinplifikazio baldintza* hauen [22] arabera definitzen dira,

$$B(p) : \sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q}, \quad q = 1, \dots, p. \quad (2.13)$$

$$C(\eta) : \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{q-1} = \frac{c_i^q}{q}, \quad i = 1, \dots, s, \quad q = 1, \dots, \eta. \quad (2.14)$$

$$D(\zeta) : \sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} a_{ij} = \frac{b_j}{q} (1 - c_j^q), \quad j = 1, \dots, s, \quad q = 1, \dots, \zeta. \quad (2.15)$$

2.1. taulan, *IRK* metodo nagusienak laburtu ditugu.

2.1. Taula: Runge-Kutta metodo implizituak.

Metodoa	Baldintzak	Ordena
Gauss	$B(2s)$	$C(s)$
Radau IA	$B(2s-1)$	$D(s)$
Radau IIA	$B(2s-1)$	$C(s)$
Lobatto IIIA	$B(2s-2)$	$D(s-1)$
Lobatto IIIB	$B(2s-2)$	$D(s-2)$
Lobatto IIIC	$B(2s-2)$	$D(s-1)$

Simplektikotasuna.

Sanz-Sernak [58] Runge-Kutta metodoa simplektikoa izateko baldintza nahikoa eta beharrezkoa,

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s, \quad (2.16)$$

dela frogatu zuen.

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

2.3.2. Gauss metodoa.

Gauss metodoa beste *IRK* metodoekin alderatuta, bi ezaugarri bereizten ditu: Runge-Kutta metodo simplektiko bakarra eta s -ataletako ordena altueneko ($p = 2s$) *IRK* metodoa da.

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 soluzioa, diskretizazio puntuetan ez ezik, interpolazio polinomio batek modu jarraian emandako soluzioa adierazten du.

Guillou-k eta Soule-k (1969), Wright-ek (1970) [46] kolokazio metodoaren definizioa eta modu honetan kalkulatutako s-ataleko Runge-Kutta metodoa balio-kideak direla, frogatu zuten.

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau, \quad b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau \quad (2.17)$$

non $l_i(\tau)$ Lagrangiar polinomioa dugu $l_i(\tau) = \prod_{l \neq i} \frac{(\tau - c_l)}{(c_i - c_l)}$.

Gauss nodoak. Gauss metodoak c_i ($1 \leq i \leq s$) koefizienteak "sth shifted Legendre" polinomioaren zeroak aukeratuz,

$$\frac{d^s}{dx^s} (x^s (x-1)^s),$$

Nodo hauetan oinarritutako Runge-Kutta metodoa $p = 2s$ ordena du.

Gauss metodoaren koefizienteak.

$s = 1$, $s = 2$ eta $s = 3$ atalako, Gauss metodoaren [46] Butcher koefiziente taulak [46] zehaztuko ditugu,

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

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

Gauss metodoaren propietateak.

Jarraian, Gauss metodoaren ezaugarri orokorrak azalduko ditugu:

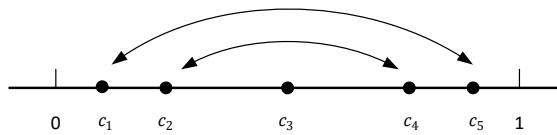
1. Metodo simplektikoa ([2.16](#)).
2. Metodo simetrikoa.

Runge-Kutta metodoa, simetrikoa izateko baldintzak hauak 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 simetrikotan, c_i balioak integrazio urratsaren erdigu-nearekiko simetrikoa dira (ikus [2.4. irudia](#)).



2.4. Irudia: Kolokazio metodoen simetria.

3. Ordena altuko metodoa. Edozein ordenako Gauss metodoa eraiki daiteke. Doitasun handiko konputazioetarako ordena altuko metodoak beharrezkoak dira: doitasun bikoitzeeko aritmetikan ($u \approx 10^{-16}$) $p \geq 8$ ordenako metodoak gomendagarriak dira eta doitasun laukoitzeeko aritmetikan ($u \approx 10^{-35}$) ordena altuagoko metodoak beharrezkoak dira.

4. Metodo orokorra. Gauss metodoa edozein ekuazio diferentzialari aplika daiteke. Sistema Hamiltondarren problemetan, ez du zertain banagarria izan behar.
5. Paralelizagarria. Ekuazio diferentzial garestiak ditugunean, s -ataletako funtzio konputazioak ($f(Y_i)$, $i = 1, \dots, s$) paraleloan kalkula daitezke.
6. Kolokazio metodoa. Zenbakizko soluzioa diskretizazio puntuetan ez ezik, integrazio tarte bakoitzean polinomio interpolatziale batek modu jarraian emandako soluzioa adierazten du.
7. A-stability and B-stability. A-stable methods have a central role in the numerical solution of stiff problems and Gauss methods are likely candidates.

2.3.3. IRK implementazioa.

IRK algoritmoa.

Jarraian, IRK metodoaren implementazioaren 1 algoritmo orokorraren laguntzarekin, implementazioaren ezaugarri orokor batzuk deskribatuko ditugu.

```

 $y_0 = y(t_0);$ 
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
```

Algoritmo 1: IRK Algoritmo orokorra

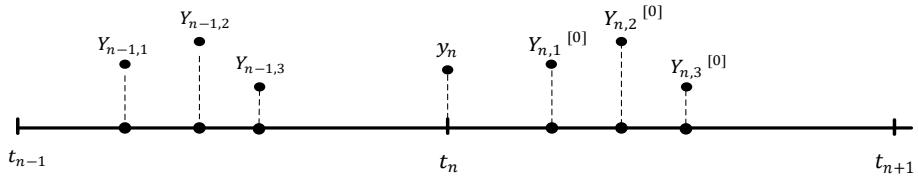
Atalen hasieraketa.

Atalen hasieraketa egokia definitu behar da. Aukera sinpleena $Y_{n,i}^{[0]} = y_n$ hasiera tzea da, baina aurreko urratseko atalen informazioa erabiliz hurbilketa hobea lortu

daiteke [46]. Aurreko urratseko atalen interpolazio polinomio bidezko hasieraketa era honetan adierazi 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, interpolazio polinomio bidez, urrats berriaren atalen hasieraketa $Y_{n,i}^{[0]}$ kalkulatuko dugu (2.5. Irudia).



2.5. Irudia: 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. Interpolazio polinomioa.

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

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 lortu daitezke ([??](#) atala). Interpolazio polinomioaren bidezko hasieraketa, emandako urratsa oso handia 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 [[67](#)], hasieraketa aurreratuei buruzko informazioa aurkitu daiteke.

Iterazio metodoa.

IRK metodoen erronka handiena, ekuazio-sistema ez-linealaren zenbakizko soluzioaren implementazio eraginkorra da [[46, 91](#)]. Problema ez-zurrenetarako, atalen hasieraketa ($Y_i^{[0]}$) egoki bat duen puntu-finkoaren iterazioa erabil daiteke. Problema zurrenetarako, puntu-finkoaren iterazioak 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]}, i = 1, \dots, s;
end
```

Algoritmoa 2: Puntu-finkoaren iterazioa.

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

2. Newtonen iterazioa.

Newton metodoa iterazio bakoitza konputazionalki garestia da. Batetik, $\frac{\partial f}{\partial y}(t_n + c_i h, Y_i^{[k-1]})$, $i = 1, \dots, s$ Jacobiarrik ebaluatu behar dira. Bestetik, s-ataletako IRK metodoa eta d-dimentsioko ekuazio diferentziala baditugu, $sd \times sd$ matrizearen *LU-deskonposaketa* kalkulatu 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]}, 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 diferentzialak, 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 diferentzialak $\ddot{q} = f(q)$ era honetako ekuazio diferentzialen kasu partikularrak dira.

Zenbakizko soluzioa $(p_{n+1}, q_{n+1}) \approx (p(t_{n+1}), q(t_{n+1}))$ era honetan kalkulatuko dugu [58],

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

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

$$\begin{aligned} P_{n,i} &= p_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j}), \\ Q_{n,i} &= q_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} g(t_n + c_j h, P_{n,j}). \end{aligned} \tag{2.19}$$

Problema hauetan, funtsean puntu-finkoaren iterazioa (2 algoritmoa) aplikatuko dugu, baina Hamiltondarraren egiturari esker, iterazioaren konbergentzia hobetuko dugu,

```

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

```

Algoritmo 4: Puntu-finkoaren iterazioa (Metodo partizionatuak).

Bigarren ordeneko EDA

Bigarren ordenako ekuazio diferentzialen $\ddot{q} = f(q)$ azterketa egiteko, lehen ordenako ekuazio diferentzial 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 kalkulatuko dugu [58],

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, Q_{n,i}), \\ q_{n+1} &= q_n + h p_n + h^2 \sum_{i=1}^s \beta_i f(t_n + c_i h, Q_{n,i}), \end{aligned} \quad (2.20)$$

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

$$Q_{n,i} = q_n + h \gamma_i p_n + h^2 \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j}). \quad (2.21)$$

Bigarren ordenako ekuazio diferentzialen puntu-finkoaren iterazioa modu era-ginkorrean 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)
IRK algoritmoa-III (bigarren ordenako EDA).

```
for  $n \leftarrow 0$  to  $(endstep - 1)$  do
    Hasieratu  $Q_{n,i}^{[0]}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
    while (konbergentzia lortu) do
         $F_{n,i} = f(t_n + c_i h, Q_{n,i})$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
         $Q_{n,i} = q_n + h \gamma_i p_n + h^2 \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} f(t_n + c_j h, Q_{n,j})$ ,  $i = 1, \dots, s$ ;
    end
     $\delta p_n = h \sum_{i=1}^s b_i F_{n,i};$ 
     $\delta q_n = h^2 \sum_{i=1}^s \beta_i F_{n,i};$ 
     $p_{n+1} = p_n + \delta p_n;$ 
     $q_{n+1} = q_n + h \gamma_i p_n + \delta q_n;$ 
end
```

Algoritmoa 6: IRK algoritmoa-III (bigarren ordenako EDA)

Batura Konpensatua.

Zenbakizko integrazioaren urratsa 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 konpensatu* teknika [80, 51, 46] erabili ohi da. Teknika hau 4.atalean deskribatu dugu eta zehaztapenak 12 algoritmoan eman ditugu.

2.4. Konposizio eta Splitting metodoak.

Konposizio eta Splitting ideietan oinarritzuz, aplikazio eremu ezberdinatarako hainbat integratzale simplektiko [91] garatu dira. Metodo hauek ez dira orokorrak, problema zehatzetan aplikagarriak baizik, eta metodo oso eraginkorrapak dira.

2.4.1. Konposizio metodoak.

Konposizio metodoak, oinarrizko metodo bat edo gehiago konposatuz eraikitako zenbakizko integrazio metodoak dira [46]. 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 metodoaren propietateak (simetrikoa, simplektikoa,...) jasotzen ditu.

Konposizio orokorrak.

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

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_s h} \circ \dots \circ \phi_{\gamma_1 h}. \quad (2.22)$$

Algoritmoa.

Jarraian, s-ataletako konposizio metodoen implementazioaren 7 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 7: Konposizio metodoen implementazioa.

Konposizio metodoen implementazioaren ezaugarri nagusienak azpimarratuko ditugu:

1. Esplizitua.

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

2. Sekuentziala.

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

3. Memoria gutxi.

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

4. Bigarren ordenako ekuazio diferentzialak.

Bigarren ordenako ekuazio diferentziala ($\ddot{q} = f(p)$), *Störmer-Verlet* metodoan oinarritutako,

$$\begin{aligned} q_{n+1/2} &= q_n + \frac{h}{2} p_n, \\ p_{n+1} &= p_n + h f(q_{n+1/2}), \\ q_{n+1} &= q_{n+1/2} + \frac{h}{2} p_{n+1}, \end{aligned} \tag{2.23}$$

s -ataletako konposizio metodoarekin integratzeko, urrats bakoitzean, ekuazio diferentzialaren s balioztapena egin behar ditugu.

Konposizio simetrikoak.

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

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_s h} \circ \phi_{\gamma_{s-1} h} \circ \cdots \circ \phi_{\gamma_2 h} \circ \phi_{\gamma_1 h} \tag{2.24}$$

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

CO1035: 10 ordenako konposizio metodoa.

Sofroniou eta Spaletta-ren [93, 2004] $s = 35$ eta $p = 10$ ordenako metodoa, orain arteko lortutako ordena altueneko konposizio metodo eraginkorrena kontsideratu daiteke (2.2. taula). Konposizio metodo simetrikoa : oinarrizko metodoa simetrikoa eta $p = 2$ ordenakoa dela baliatuz eraikitako metodoa da.

2.2. Taula: 10 ordenako metodoa konposizio metodoa [46, 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 (2.23) ($\phi_h = \varphi_{h/2}^{H_1} \circ \varphi_h^{H_2} \circ \varphi_{h/2}^{H_1}$) oinarritutako konposizio metodoaren implementazioaren zehaztasunak emango ditugu.

1. Konposizio metodo orokorra.

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_{sh}} \circ \phi_{\gamma_{s-1h}} \circ \cdots \circ \phi_{\gamma_{2h}} \circ \phi_{\gamma_{1h}}$$

2. *Stömer-Verlet* oinarritzko 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,

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

2.4.2. 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 [91, 46].

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

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 $p = 1$ ordenako metodoak,

$$\phi_h = \varphi_h^{[H_2]} \circ \varphi_h^{[H_1]} \quad \text{edo} \quad \phi_h^* = \varphi_h^{[H_1]} \circ \varphi_h^{[H_2]}. \quad (2.25)$$

Adibidea. Era horretako Hamiltondar banagarrikoan $H(p, q) = T(p) + V(q)$, $H_1 = T$ eta $H_2 = V$ izanik, zati bakoitzari dagokion fluxua era horretan 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 metodoa 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 $p = 2$ ordenako metodo simetrikoa,

$$\phi_h = \varphi_{h/2}^{[H_1]} \circ \varphi_h^{[H_2]} \circ \varphi_{h/2}^{[H_1]}. \quad (2.26)$$

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

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

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 horretan ere, splitting teknika metodo simplektikoak eraikitzeko aplika daiteke. Adibidez, $\varphi_t^{[H_2]}$ ezezaguna bada eta Lie-Trotter teknika aplikatuz,

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

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

Splitting orokorrak.

Aurreko splitting metodoen (2.25) orokorpena modu honetan zehaztuko dugu,

$$\phi_h = \varphi_{\beta_s h}^{[H_2]} \circ \varphi_{\alpha_s h}^{[H_1]} \circ \varphi_{\beta_{s-1} h}^{[H_2]} \circ \cdots \circ \varphi_{\beta_1 h}^{[H_2]} \circ \varphi_{\alpha_1 h}^{[H_1]}. \quad (2.27)$$

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

Algoritmoa.

Splitting metodoen implementazioaren 8 algoritmo orokorra, laburtu dugu.

```
for n ← 0 to (endstep-1) do
```

```
    Y0,n = yn-1;
```

```
    for i=1,2,...,s do
```

```
        | Yi,n = (φβi h[H2] ∘ φαi h[H1])(Yi-1,n);
```

```
    end
```

```
    yn+1 = Ys,n;
```

```
end
```

Algoritmoa 8: Splitting metodoak.

Splitting metodoen implementazioarentzat, konposizio metodoen algoritmoei buruz aipatutako ezaugarri berdinak errepikatu beharko genituzke.

2.4.3. Eguzki-sistemari egokitutako splitting metodoak.

Demagun, N-gorputzeko problema grabitazionalaren Hamiltondarra,

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

Eguzki-sistemaren integratorako erabiltzen diren koordenatu sistema nagusiak *Jacobi* edo koordenatu heliozentrikoak dira [98, 31]. Bi koordenatu sistema hauekin, Hamiltondarra beste modu honetan berridatzi daiteke,

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

non alde nagusia H_A planeta bakoitzaren eguzki inguruko mugimendu Kepleria-rra den eta H_B aldiz, planeten arteko interakzioek eragiten duten perturbazio txikia. Koordenatu bakoitzari dagokion Hamiltondar funtzioa (ikus A.2. eranskina), *Jacobi* (H_{Jac}) koordenatuetan H_B bakarrik kokapenen araberakoa eta *Heliozentrikoetan* (H_{Hel}), H_B kokapen naiz abiaduraren araberakoa da.

$$H_{Jac} = H_A(p, q) + H_B(q),$$

$$H_{Hel} = H_A(p, q) + H_B(p, q),$$

$H_A(p, q)$ (mugimendu Keplerrari dagokion zatia), Kepler-en fluxua kalkulatzen duen implementazio bat aplikatuz (3.4.2. atala) zehazki kalkulatuko da.

Eguzki-sistemaren N-gorputzeko problema grabitazionalari egokitutako zenbakizko bi integratzaile simplektiko azalduko ditugu. Lehena, Laskar-ek eta Robutel-ek [72] definitutako $SABA_4$ integratzailea eta bigarrena, Blanes-ek [16, 31] definitutako $ABAH1064$ integratzailea.

$SABA_4$ integratzailea.

Laskarrek (2001) $SABA_n$ eta $SBAB_n$ integratzaile simplektikoak [72] proposatu zituen. Metodoen ordena $K_{SABA_n} = K_{SBAB_n} = \mathcal{O}(h^{2n}\epsilon + h^2\epsilon^2)$ da; urrats luzera handitarako eta ϵ balio txikitarako, gai nagusia ($h^{2n}\epsilon$) izango da.

Bigarren integratzaile famili bat ere $CSABA_n$ eta $CSBAB_n$ (*Corrected integrators*) definitu zituen. Urrats bat gehitutako integratzaileak dira eta ordena $K_{CSABA_n} = K_{CSBAB_n} = \mathcal{O}(h^p\epsilon + h^4\epsilon^2)$, non $p = n + 2$ edo $p = n + 3$ den. Bigarren metodo hauek, urrats tamaina txikia beharrezkoa den doitasun handiko integrazioetarako erabilgarriak dira.

Eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioan [70] 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 2.3. taulan zehaztu ditugu.

2.3. Taula: $CSABA_4$ splitting metodoa [72].

Koeficiente	Balioa	Koeficiente	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		

2.4. 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 integratzaila.

Blanes-ek (2013), *ABA* eta *ABAH* metodo simplektikoak proposatu zituen [16, 31]. *ABA* metodoak, Jacobi koordenatuak erabiltzen direnean egokitutako integratzailak eta *ABAH* integratzailak, koordenatu heliozentrikoak erabiltzen direnean egokitutako integratzailak.

Atal honetan, koordenatu heliozentrikoei egokitutako *ABAH1064*, $p = 10$ ordenako metodoa deskribatuko dugu. Eguzki-sistemaren integratorako 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 ordez honen hurbilpen bat erabiliko dugu,

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

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, 2.4. taulan definitzen diren.

2.5. Laburpena.

Atal honetan, metodo simplektikoen ikuspegi orokorra eman dugu. Hurrengo 2.5. taulan, ordena altuko lau integratzailen simplektikoen ezaugarriak laburtu ditugu. Izaera implizituen implementazioen (1 algoritmoa) eta izaera esplizituen (7, 8 algoritmoak) implementazioen konplexutasuna erakutsi dugu.

Metodo simplektikoei buruzko liburu monografiko hauek gomendatuko ditugu: "Numerical Hamiltonian Problems", Sanz-Serna eta M.P. Calvo's (1994) [58]; "Geometrical Numerical Integration", E. Hairer, C. Lubich eta G. Wanner (2001) [46]; "Simulating Hamiltonian Dynamics", B. Leimkuhler and S. Reich (2004)

2.5. Taula: Integrazio metodo sinplektikoen 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

[73]; "Symplectic geometric algorithms for hamiltonian systems", Feng, Kang and Qin, Mengzhao (2010)[32].

Eguzki-sistemaren epe luzeko simulazioei buruzko lan hauek aipatuko ditugu: "Celestial mechanics: past, present, future", V. A. Brumberg (2012) [20] ; "Review of the works on the orbital evolution of solar system major planets", K. V. Kholshevnikov and E.D. Kuznetsov (2007) [62]; "Modern integrations of the solar system dynamics", A. Morbidelli (2001) [79]; "Trends in 20th century celestial mechanics", T. Ito eta K. Tanikawa (2007) [56]; "Historical reflections on the work of IAU Commission 4 (Ephemerides)", Kaplan et al (2015) [61].

3. Kapitulua

Problemak.

3.1. Sarrera.

Tesiaren erdigunea N-gorputzeko problema grabitazionala da. Gure helburua, eguzki-sistemaren problemaren simulaziorako zenbakizko integratzaile eraginkorra implementatzea da. Eguzki-sistemaren bi eredu simple konsideratu ditugu: lehena, *kanpo-planeten* izeneko problema (eguzkia, kanpo-planetak eta Plutonek osatutakoa), eta bigarren eredu konplexuagoa, *9-planeten problema* izeneko problema (eguzkia, 8 planetak eta Plutonek osatutakoa). Bi eredu hauetan, gorputzak masa puntualak dira eta gorputz hauen arteko erakarpen grabitazionalak bakarrik konsideratu ditugu (erlatibitate efektua eta beste hainbat indar ez-grabitazionalak gure lan-eremutik kanpo utzi ditugu).

Zenbakizko metodo simplektiko nagusienak esplizituak direla eta Hamiltondar banagarriak diren problemei aplika daitezkeela, gogoratu behar dugu. Hortaz gain, problema zurruna bada metodo esplizituak ez direla eraginkorrik eta metodo implizituek abantaila azaltzen dutela esan beharra dago. Gauss metodoa orokorra eta implizitua izanik, gure implementazioa problema zurrunetarako eta Hamiltondar banagarria ez den problemetarako aplikagarria dela ere erakutsi nahi dugu.

Aurretik esandakoari jarraituz, pendulu bikoitzak, problema osagarri gisa aukeratu dugu zenbakizko esperimentuak modu aberatsago eta zabalago batean egiteko. Pendulu bikoitzaren bi bertsio konsideratu ditugu: pendulu bikoitz arrunta eta pendulu bikoitz zurruna.

N-gorputzeko problema grabitazionalaren Hamiltondarra banagarria da baina pendulu bikoitzarena aldiz, ez da banagarria. Bestalde, pendulu bikoitzari malguki bat gehituz problema zurruna bilakatuko dugu eta problema hauen zaitasunei nola aurre egin erakusteko. Gainera, eguzki-sistema kaotiko [68] konsideratzen dela jakinik, pendulu bikoitz arruntak izaera kaotikoa azaltzen duen hasierako balio zehatzak aukeratu ditugu. Problema kaotikoak, hasierako balio edo para-

metroen perturbazioekiko, trunkatze edo birbitze erroreekiko esponentzialki oso 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 grabitazionalean murgildu gara eta eredu ezberdin zehaztapenak eman ditugu: Kepler problema, Hiru-gorputzen problema, kanpo-planeten problema eta 9-planeten problema.

3.2. Pendulu bikoitza.

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

3.2.1. Pendulu bikoitz arrunta.

Planoan pendulu bikoitzaren problema (ikus 3.1. irudia) era honetan definituko dugu: m_1 eta m_2 masadun bi penduluz eta elkar lotuta dauden l_1 eta l_2 luzerako makilez (masa gabekoak konsideratuko ditugunak) osatuta sistema mekanikoa. 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 $\psi = \phi + \theta$.

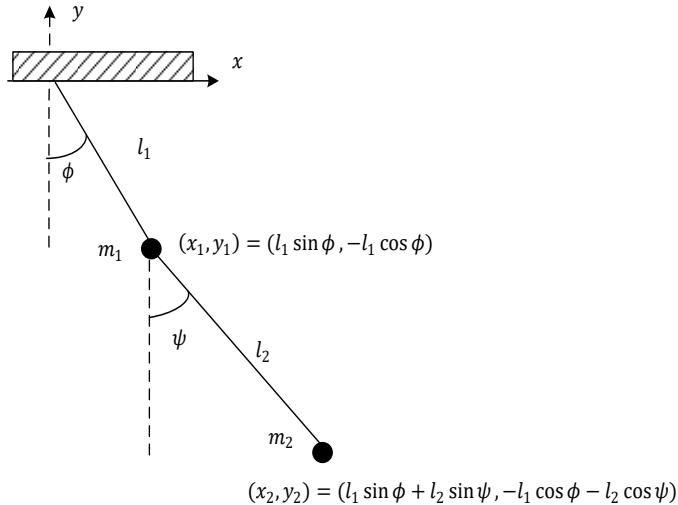
Hamiltondar funtzioa $H(q, p)$ honakoa da,

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

Sistemaren parametroak. Gure esperimentuetarako honako parametroak konsideratuko ditugu,

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

Hasierako balioak. Bi hasierako balio ezberdin konsideratu ditugu [28]: lehenak, izaera ez-kaotiko du eta bigarrenak, izaera kaotikoa duen mugimendua agertzen du.

**3.1. Irudia:** Pendulu bikoitz arrunta.

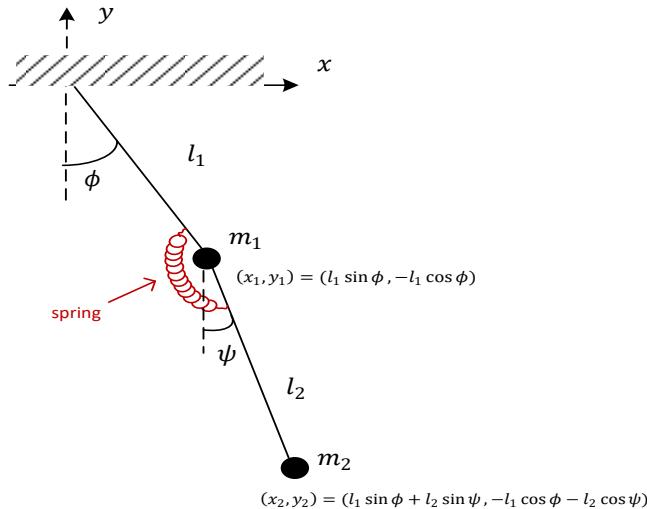
1. Hasierako balio ez-kaotikoak (NCDP): $q(0) = (1.1, -1.1)$ eta $p(0) = (2.7746, 2.7746)$. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioa egin dugu eta zenbakizko soluzioa, $m = 2^{10}$ urratsero itzuli dugu.
2. Hasierako balio kaotikoak (CDP): $q(0) = (0, 0)$ eta $p(0) = (3.873, 3.873)$. $T_{end} = 2^8$ segundoko integrazioa egin dugu eta zenbakizko soluzioa, $m = 2^8$ urratsero itzuli dugu.

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

3.2.2. Pendulu bikoitz zurruna.

Pendulu bikoitz arruntari malguki bat gehitutako sistema da (ikus 3.2. irudia) : l_1 eta l_2 luzerako makilez elkar lotuta dauden m_1 eta m_2 masadun bi pendulu eta hauen artean k malgutasun duen malgukia osatzen duten sistema mekanikoa. $k = 0$ balioarentzat, problema ez da zurruna 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 penduluaren ardatz bertikalarekiko 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, [28] 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-zurrumerako, $h = 2^{-7}$ urrats luzera, trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiagoa izan dadin finkatu dugu eta gainontzeko integrazio guztietarako urrats luzera berdina erabili dugu. $k > 0$ zurruntasun balio batetik aurrera, trunkatze errorea biribiltze errorea baino garrantzitsuago da. $T_{end} = 2^{12}$ segundoko integrazioa egin dugu eta zenbakizko soluzioa, $m = 2^{10}$ urrats oro itzuli dugu.

3.3. N-Gorputzen problema.

Problemaren formulazio eman aurretik, K.Tanikawa-k eta T.Ito-k [56] 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 very difficult to obtain anything new.

Newtonen lege gravitazionalen 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 [63]:

1. Masa zentroaren sei integralak.

Era honetan definitzen dugun P , konstantea dela modu errazean frogatutako, teke,

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

Eta ondorioz,

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

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

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

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

2. Momentu angeluarra.

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

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

3. Energia.

Hamitoniar sistema osoaren energia da eta problemaren beste integrala da,

$$E = H(q, p) = \text{kons.}$$

Problemaren 10 integral hauek, sistemaren ordena gutxitzeko edo zenbakizko integrazioa doitasuna neurtzeko erabili daitezke. Guk koordenatu barizentrikoak (koordenatu sistemaren jatorria masa zentroaren kokapena) erabiliko ditugu eta koordenatu hauetan, $P = 0$ eta $B = 0$ dira. Beraz, gorputzen kokapen eta abidurak $\hat{Q} = 0$ eta $\hat{V} = 0$ izan daitezen, integratzeko erabiliko ditugun hasierako balioak (\hat{q}_i, \hat{v}_i) modu honetan finkatuko ditugu,

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

Momentu angeluarra eta energia, zenbakizko integrazioaren doitasuna neurtzeko erabili ohi dira. Energia zenbakizko integracioen biribiltze errorea neurtzeko integral egokiena da.

3.4. Eguzki-sistema.

3.4.1. Sarrera.

Eguzki-sistemaren planeten orbiten mugimenduaren eredu matematikoa, Hamiltondar sistema bati dagokion ekuazio diferentzial arrunten bidez formulatzen da. Ekuazio diferentzial arrunten sistema, $6N$ ordenakoa da (N planeten kopurua izanik).

Eguzki sistemaren eredu simplea integratuko dugu. Eguzki-sistemaren gorputzak masa puntuak konsideratuko ditugu eta gure ekuazio diferentzialak definitzeko, soilik gorputz hauen arteko erakarpen grabitacionalak kontutan hartu ditugu. Eguzki-sistemaren eredu konplexuagoen erlatibilitatea, gorputzen formaren eragina, eta beste zenbait indar ez-grabitacionalak ez ditugu konsideratu.

Eguzki-sistemaren gorputz nagusien (eguzkia eta planetak) integrazioetara mugatuko gara. Ereduen gorputz kopurua txikia izango da, $N = 6$ (eguzki-sistemaren eredu simplea) eta $N = 10$ (eguzki sistemaren eredu osoa) gorputz kopuruengatik.

Eguzkiak, planetak baino 1.000 aldiz masa handiago du eta hauxe da, eguzki-sistemaren ezaugarri garrantzitsuenetakoak: eguzkiaren grabitazio indar nagusi batetik eta planeten arteko perturbazio txikiiek sortzen duten sistema dinamikoa da. Planetak eta bere sateliteen mugimenduan kolisio gertuko egoerarik edo eszentrikotasun handiko orbitalik ez dago. Beraz, ikuspuntu honetatik sistema dinamiko simplea dela, konsideratu daiteke. Eguzki-sistema egonkorra konsideratzen da, hau da, hurrengo bilioi urteetan planeten arteko talkarik edo planeten kanporatzeko gertatzea, ez da espero [68] [48].

Egonkortasunaren azterketa zehatzago batean, sistema erregularrak eta kaotikoak bereiz ditzakegu. Sistema erregularretan, hasierako balioen perturbazio txikien eragina, denboran zehar poliki hasiko da eta beraz, epe luzeko integrazio zehatzak posible dira. Sistema kaotikoetan aldiz, eboluzioa hasierako balioekiko oso sentikorra da eta gertuko soluzioen differentzia esponentzialki hasiko da. Hasierako uneko differentzia $d(0) = d_0$ bada, orduan distantzia,

$$d(t) \approx d(0)e^{t\lambda}$$

espresioaren arabera hasiko da, non λ Lyapunov esponentziala esaten zaion. Eguzki-sistema kaotikoa kontsideratzen da eta Laskar-ek [68] Lyapunov denbora $\lambda^{-1} \approx 5$ milioi urtetan finkatzen du eta honako espresioa, kalkulatzeko proposatzen du,

$$d(t) \approx d(0)10^{t/10}.$$

Espresio honen arabera, 10^{-10} tamainako hasierako erroreak baditugu, orduan $d(10) \approx 10^{-9}$ eta $d(100) \approx 1$ dira. Ondorioz, eguzki sistemaren $10 - 20$ milioi urteko integrazioetarako, doitasun handiko soluzioak lortuko ditugu baina 100 milioi urteko integrazioen soluzioak ez dira esanguratsuak izango.

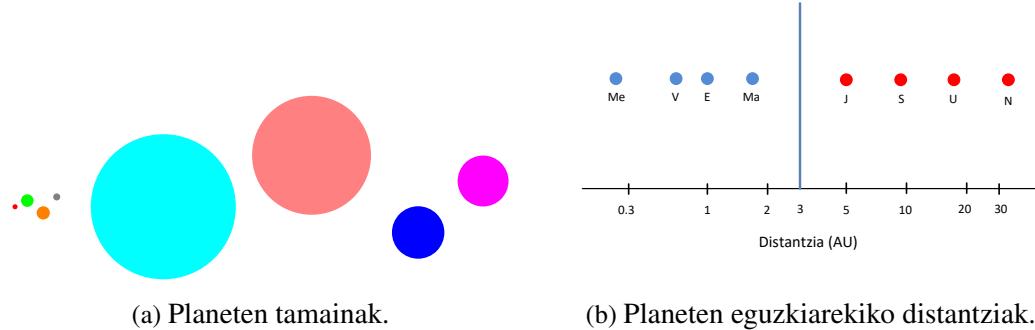
Eguzki-sistemaren jatorria, orain 5×10^9 urtetan finkatzen da eta beraz, eguzki-sistemaren eboluzioa integratzeko, urrats kopuru oso handia beharrezkoa da. Eguzki-sistemaren eredu osoaren (9-planeten problema) integrazioetako ohiko urratsa $h = 0.0025$ urteko bada (orbita txikieneko periodoaren $\%1$),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

Eguzki-sistemaren problemaren eskalak, anitzak dira. 3.3. irudian, planeta nagusien tamainak eta eguzkiarekiko distantziak irudikatu ditugu. Ondorengo 3.1. taulan, eguzki-sistemaren planeten ezaugarri nagusienak eman ditugu. Denbora eskalari dagokionez, ilargiak luraren inguruko orbita 27.32 egunetakoa da, lurrikak eguzkiarekiko inguruko orbitaren periodoa 1 urtekoa eta Neptunorena 163 urtekoa.

Hiru dira erabiltzen diren koordenatu sistema nagusienak:

1. Koordenatu cartesiarrak.
2. Koordenatu heliozentrikoak.
3. Koordenatu jacobiarra.

Ohikoa da ekuazio differentzialak koordenatu heliozentrikoen (eguzkiaren zenetroarekiko) arabera definitzea. Ekuazioen garapen osoa eranskinean eman dugu.



3.3. Irudia: Ezkerreko (a) irudian, planeten arteko tamainen proportzioak eta eskubiko irudian, planeten eguzkiarekiko distantziak irudikatu ditugu.

3.1. Taula: Eguzki-sistemaren planeta nagusien masak, eguzkiarekiko distantziak, 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

3.4.2. Problemak.

Eguzki-sistemaren simulaziorako test problemak deskribatuko ditugu. Bi gorputzen problematik abiatuta, gero eta problema konplexuagoak azalduko ditugu. PW, Sharp-ek [92] eguzki-sistemaren problemen bilduma interesgarria egin zuen, eta bertan problema guzti hauek problema ez-zurrunak konsideratzen dituela nabarmentzekoa da.

Kepler problema.

Kepler problema, bi gorputzen problemaren kasu partikularra da eta honako Hamiltondarra dagokio,

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} - \frac{\mu}{\|q\|}, \quad (3.6)$$

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 diferentzialak era horretan definitzen dira,

$$\dot{q} = p, \quad \dot{p} = -\frac{k q}{\|q\|^3}, \quad (3.7)$$

non $k = \mu/m$ eta $q, p \in \mathbb{R}^3$.

Kepler hasierako baliodun problemaren soluzio zehatza kalkula daiteke: une bateko kokapen eta abiadurak emanik, denbora tarte bat (Δt) igarotakoan (positibo ala negatiboa), zehazki kokapen eta abiadura berriak ezagutu daitezke. Eguzki-sistemaren integracio metodoentzat, Kepler problemaren doitasun handiko eta kalkulu eraginkorra konputatzea, funtsezkoa da. Erreferentiazko Kepler problemaren implementazioak, Danby [26] eta J.Wisdom [99] ditugu.

Kepler problemaren implementazioa garatu dugu eta ideia nagusia, hitzez azalduko dugu. Lehenik, koordenatu cartesiarretatik ($q, p \in \mathbb{R}^3$), koordenatu eliptikoetara (a, e, i, Ω, E), itzulpena egingo dugu. Koordenatu eliptikoetan, E (*eccentric anomaly*) aldagaia izan ezik, beste aldagaiaiak konstante mantentzen dira: beraz E_0 balioa emanda, Δt denbora tartea aurrera egin eta E_1 balioa berria kalkulatuko dugu. Azkenik, koordenatu eliptikoetatik koordenatu cartesiarretara itzulpena eginez, kokapen eta abiadura berriak eskuratuko ditugu.

$$(q_0, v_0) \in \mathbb{R}^6 \longrightarrow (a, e, i, \Omega, E_0) \in \mathbb{R}^6$$

$$\downarrow \Delta t$$

$$(q_1, v_1) \in \mathbb{R}^6 \longleftarrow (a, e, i, \Omega, E_1) \in \mathbb{R}^6$$

Implementazioaren garapenaren zehaztasun guztiak eranskinaren A.1. atalean eman ditugu.

Hiru-gorputzen problema.

Hiru-Gorputzen Problema Murritzuan (*R3BP*) [43, 25], masa ezberdineko hiru gorputz elkarrekiko erakarpen eraginpean, espazioan libreki mugitzen dira. Hona-ko hurbilpenak konsideratuz, definitzen da Hiru Gorputzen Problema Murritzua:

- Ohikoa den moduan Newton eredu grabitazionalean, gorputzak masa puntualak konsideratuko ditugu.
- Horietako bi gorputz nagusiak (m_1, m_2), bere masa zentroaren inguruan orbita zirkularrean mugitzen dira. Adibidez, lurra eta ilargia konsideratu daitezke. Ilargiak ezentrizidate txikiko ($e = 0.05$) mugimendu eliptikoa du eta suposizio hau onargarria da.
- Problema orokorrean, hiru gorputzen masak edozein izan daitezke. Murritzuan aldiz, bi gorputz nagusien masa edozein delarik, hirugarrenarena beste bi gorputzen masa baino askoz ere txikiagoa da. Adibidez satelite artifizial bat konsideratzen badugu, bere masa 1.000 tonatako (10^6 kg) ingurukoa izango da eta ilargiaren masarekin konparatuko bagenu ($I_M = 7.3477 \times 10^{22}$ kg), bere masa askoz ere txikiagoa da.
- Hirugarren gorputzak (m_3) beste bi gorputz nagusien masarekin alderatuta oso masa txikia duenez, ez du m_1 eta m_2 gorputzen mugimenduarekiko eraginik. Hirugarren gorputza, bi gorputz nagusien eraginpean hauen orbitaren plano berdinean mugitzen dela suposatuko dugu.
- Eguzki-sistemaren gainontzeko gorputzen eragina baztertu da. Lurra-Ilargi sistemaren, eguzkiaren grabitazio indarra ez dagoela konsideratu da.

$(x, y) \in \mathbb{R}^2$ masa txikiko gorputzaren kokapen koordenatuak izanik, hauek dira errotazio koordenatu sistemaren dagokion mugimenduaren ekuazioak (4 dimensioko sistema dinamikoa),

$$\begin{aligned}\dot{x} &= p_x + y, \\ \dot{y} &= p_y - x, \\ \dot{p}_x &= p_y - umu \frac{x + \mu}{r_1^3} - \mu \frac{x - (umu)}{r_2^3}, \\ \dot{p}_y &= -p_x - umu \frac{y}{r_1^3} - \mu \frac{y}{r_2^3},\end{aligned}$$

non $r_1 = ((x + \mu)^2 + y^2)^{1/2}$, $r_2 = ((x - umu)^2 + y^2)^{1/2}$, $-\mu = (-m/M + m)$ eta $umu = 1 - \mu$ diren.

Problema ezberdinak deskribatzen dira μ parametroaren arabera: $\mu = 0.01277471$ balioarekin finkatuta, Lurra-IIargia modeloari dagokio. Gorputz nagusi handiena (Lurra) $(-\mu, 0)$ eta gorputz nagusi txikiena (Ilargia) $(1 - \mu, 0)$ posizioan kokatzen dira. Ilargiak orbita zirkularra du luraren inguruan eta ekuazio differentzialek satelitearen mugimendua deskribatzen dute.

Sistema dinamikoaren energia, soluzioan zehar konstante mantentzen da,

$$E = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + p_x y - p_y x - \left(\frac{1 - \mu}{r_1} \right) - \frac{\mu}{r_2} - \frac{1}{2}\mu(1 - \mu).$$

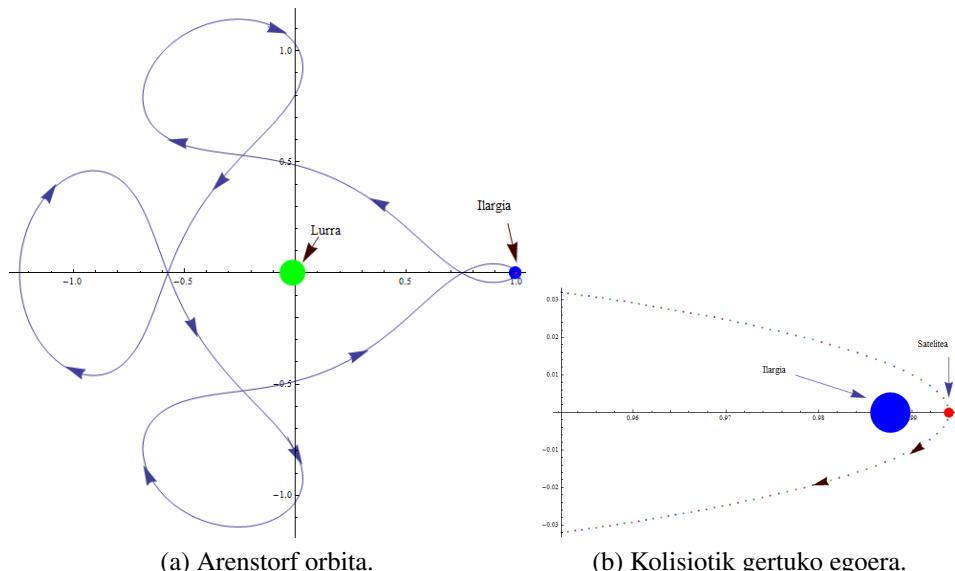
Ezaguna da [43], hasierako balio hauetarako (3.2. taula) soluzioa

$$t = 17.0652165601579625588917206249$$

periodikoa dela (3.4. irudia),

3.2. Taula: R3BP problemaren hasierako balioak.

Gorputza	Balioak
Satelitea	x, y 0.994 p_x, p_y 0.
	0 $-2.00158510637908252240537862224 + 0.994$



3.4. Irudia: R3BP. Arenstorf orbita izeneko soluzio periodikoa. $t = 0$ unean kolisiotik gertuko egoera; Ilargia $(0.987723, 0)$ eta satelitea $(0.994, 0)$ posizioa.

Kanpo-planeten problema.

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

Hasierako balioak [46] liburutik hartu ditugu. Planetei dagokien masak 3.3. taulan eta kokapenak/abiadurak 3.4. 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 zaio eta horregatik, eguzkiaren masak, $m_0 = 1.00000597682$ balioa hartzen du.

3.3. Taula: Kanpo-planeten masak.

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

9-planeten problema.

Eguzki-sistemaren 9-planeten zenbakizko integracioak, kanpo-planeten problemak baino konplexutasun handiago du. Planeten eta eguzkiaren arteko interak-zio kopurua 45 (kanpo-planeten probleman 15) da. Orbita periodo txikiena 50 aldiz txikiagoa (Merkurioren 0.24 urtetako periodoa, Jupiterren 11.86 urtetako periodoarekin alderatuta) da. Merkurioren orbitaren eszentrikotasuna $e = 0.206$ (Jupiterren orbitaren eszentrikotasuna $e = 0.048$) da.

Eredu 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) [35] azken efemeride artikulutik hartu ditugu. Eguzki eta planeten hasierako kokapenak (AU) eta abiadurak (AU/egun),

3.4. 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

Julian data (TDB) 2440400.5 (1969. ekainaren 28) eta ICRFR2 (International Celestial Reference Frame) koordenatu sisteman [3.6.](#) taulan laburtu dugu. Planeta bakoitzari dagokion, GM balioa [3.5.](#) 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, 2011. urteko epe luzeko zenbakizko integratziorako [70] eguzki-sistemaren ereduа deskribatuko dugu. Hasierako integrazioetan, eguzkia, 8 planetak, Pluton eta ilargia bakarrik kontsideratu zituen. Eguzkiaren erlatibilitatea efektua (Saha eta Tremaine-k [88] finkatutako teknikaren arabera) eta eredu errealistaren indar ez grabitazional garrantzitsuenak aplikatu zituen. Azken integrazioetan, Zeres, Palas, Vesta, Iris eta Bamberga asteroideak gehitu zituen zituen.

Ilargia gorputz independente gisa kontsideratu zuen. Ilargiaren lurrarekiko distantzia (380.000 km), beste gorputzekiko distantziekin alderatzen badugu (eguzkiaren 150.000.000 km eta Artizarren 45.000.000 km) oso txikia da. Hori dela eta, ilargiaren kokapena, eguzki-sistemaren barizentroaren konsideratu ordez, lurrarekiko kontsideratuz doitasun handiago lortuko da. Lurraren eguzkiaren kokapena (q_e) eta ilargiaren eguzkiaren kokapen (q_m), hurrenez-hurren,

3.5. 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	$0.109318945074237400e - 10$

lur-ilargi sistemaren barizentroaren eguzkiarekiko kokapena (q_B) eta ilargiaren lurrrarekiko 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 eskubiko aldeko expresioa ebaluatzeako (q_e, q_m) aldagaiaik erabiliko ditugula eta aldagai berriak. (q_B, q_{em}) 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 9: Ilargiaren kalkuluak.

3.5. Laburpena.

Atal honetan, pendulu bikoitzaren problema eta eguzki-sistema grabitazionalaren eredu ezberdineng zehaztasunak eman ditugu. Batetik, pendulu bikoitzaren problemaren hasierako balioak [28] artikulutik hartu ditugu. Bestetik, eguzki-sistema grabitazionalaren problemaren integraziorako hasierako balioak lan hauetatik har-

3.6. Taula: Eguzki eta 9 planeten hasierako balioak, kokapenak (x, y, z) eta abiadurak (v_x, v_y, v_z).

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	-0.40154022645315222236
	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

3.7. Taula

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

3.8. 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

tu ditugu: kanpo-planeten problemarentzat [46] liburutik eta 9-planeten problema-rentzat 2014. urteko efemerideen [35] artikulutik hartu ditugu. Eguzki-sistemaren problemaren integrazorako hasierako balioak jasotzen dituzten beste lan hauek ere aipatu nahi genituzke: P.W. Sharp-ek eguzki-sistemaren problemen bilduma [92] eta Laskar-en [71] artikuluaren informazio osagarria.

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}) erabiltzen da. Zenbaki erreal batzuk, \mathbb{F} sistemaren adierazpen zehatza dute, baina beste batzuk hurbildu egin behar dira. Era berean, eragiketa aritmetikoak ($+, -, *, /$) kalkulu gehienetan ere, emaitzaren hurbilpena egin beha da. \mathbb{R} sistematik \mathbb{F} sistemara bihurtzeko funtzioari 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 [54] 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.

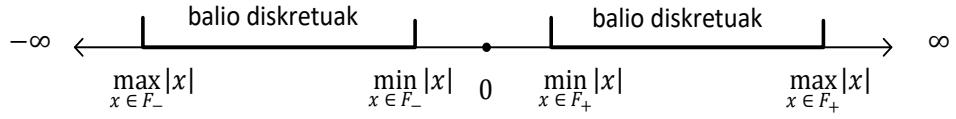
4.2. IEEE-754 estandarra.

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, adierazi daitekeen zenbaki handienaren eta txikienaren arteko ba-

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

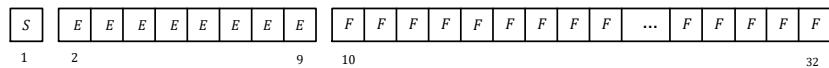
1. m bitez osatutako zatia, mantisa (M) izenekoa. Horietako bit batek (S) zeinuadierazten du. Bestalde M mantisa modu normalizatu honetan emana da, $\pm 1.F$ eta zati erreala (F) bakarrik gorde behar da.
2. Esponentea (E), $(n - m)$ bitez adierazitako zenbaki osoa. Zeinuarentzat ez da bit zehatzik, baizik *bias* izeneko balio bat gehituz 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 [80] 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: garaiatu behar den bit kopuru erdia delako eta gainera, hardware bereziei (adibidez *Intel* makinetan *SSE* moduluak) esker, 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 [59]. Doitasun laukoitza edo altuagoa, software liburutegien bidez emulatzen 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* [36]).
2. *Termino-anitzeko adierazpena*. Zenbakiak ebaluatu gabeko hainbat koma-higikorreko makina zenbaki estandarren batura gisa adierazten dira (adb. *Bailey QD liburutegia*) [50] eta exekuzioaren ikuspegitik, hardware bidezko inplementazioaren abantaila dute.

Doitasun laukoitzeko gure esperimentuetarako, *GCC libquadmath liburutegia* [39] erabili dugu. Doitasun laukoitzean exekutatutako integrazioen zenbakizko soluzioak, soluzio zehatzak konsideratu ditugu eta doitasun bikoitzeko inplementazioaren errorea, soluzio zehatzaren diferentzia gisa kalkulatu dugu.

Laskar-ek epe luzeko eguzki-sistemaren simulazioaren (-250 eta $+250$ milioitako integrazio tartea) konputaziorako kalkuluak [70], 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

fisiko 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 adina txikia aukeratuz, trunkatze errorea biribiltze errorea baino txikiago izango da eta beraz, zenbakizko integracio 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 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 [25].

Aritmetikaren errorea.

Koma-higikorreko zenbakien arteko eragiketa baten emaitzak, ez du zertan \mathbb{F} multzoan adierazpen zehatza izan behar eta orduan, emaitza biribildu egingo da. Adibidez, m digituzko bi zenbakien biderketaren emaitza zehatza adierazteko, $2m$ digituzko mantisa behar dugu (m digituzko galera) [38]. Salbuespena, biderkagaietako bat 2-ren berretura denean gertatzen da, orduan biderketa zehatza baita.

Adibidea. Demagun hiru 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 [25].

Zenbakizko algoritmoen biribiltze errorearen eraginaren azterketa formalak, propietate hauetan oinarritzen dira. Bestalde, errore erlatiboak emaitzaren digitu zuzenak 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 $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n \in \mathbb{F}$,

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

$|\delta| < u$ 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, doitasuna galera azkarra gerta daiteke. Horren adibidea ezabapen arazoa dugu: oso antzekoak diren bi zenbaki 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 errorearen gutxitzeko teknikak.

Batuketa eta biderketa eragiketen biribiltze errorea kalkulatzeko algoritmoak ezagunak dira [27][51]. Algoritmo hauek, *termino-anitzeko adierazpen* implementazioetan erabiltzen dira eta baturaren kasuan, batura konpensatu 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 algorithmoa, 1971.an Dekker-ek [27] asmatu zuen. Koma-higikorreko $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{F}$ bi zenbakien non $|\tilde{x}| \geq |\tilde{y}|$, arteko batuketari $\tilde{z} = \tilde{x} \oplus \tilde{y}$ dagokion biribiltze errorea e , non $\tilde{z} + e = \tilde{x} + \tilde{y}$ den, era honetan kalkulatu daiteke,

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

Algoritmoa 10: Fast2Sum.

4.3.irudiaren laguntzarekin hobeto uler daiteke batuketaren biribiltze errorearen kalkulua [51].

Batura konpensatua.

Era honetako batura errekurtsiboetan,

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

biribiltze errorea gutxitzeko teknika ezaguna da [51, 80, 46]. Ideia da, bi zenbakien baturan egindako biribiltze errorea lortu, eta errore hau hurrengo baturan erabiltzea. Jarraian azaltzen den moduan, urrats bakoitzaren amaieran errore esti-

\tilde{x}	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2
\tilde{y}	\tilde{y}_1	\tilde{y}_2
$\tilde{z} = \tilde{x} \oplus \tilde{y}$	\tilde{x}_1	$\tilde{x}_2 \oplus \tilde{y}_1$
$\tilde{z} \ominus \tilde{x}$	\tilde{y}_1	0
$\tilde{y} \ominus (\tilde{z} \ominus \tilde{x})$	\tilde{y}_2	0

4.3. Irudia: Batuketaren biribiltze errorea.

mazioa (e_i) 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 11: Kahan-en batura konpensatua.

Knuth-ek eta Kahan-ek [80], batura konpensatuko algoritmoaren bidez kalkulatutako z_{n+1} batura honakoa betetzen duela,

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

frogatu zuten.

Jakina da, algoritmoaren gaiak bektoreak, $\tilde{z}_0, e_0, x_0, x_1, \dots, x_n \in \mathbb{F}^d$ diren kasurako orokortu daitekeela. Beraz, 11 algoritmoa n eta d parametroak dituen funtzio familia gisa interpretatu daiteke,

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

zein $\tilde{z}_0, e_0, x_0, x_1, \dots, x_n \in \mathbb{F}^d$ argumentuak emanik, $\tilde{z}_{n+1}, e_{n+1} \in \mathbb{F}^d$ balioak itzultzen dituen, eta $(\tilde{z}_{n+1} + e_{n+1}) \approx (\tilde{z}_0 + e_0 + x_0 + x_1 + \dots + x_n)$ adierazi nahi duen.

Zenbakizko integrazioak.

Zenbakizko integrazioetan, era honetako batura errekurtsiboa kalkulatu behar ditugu [46],

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

non $|\delta_n| < |y_n|$ izan ohi da. Beraz, integrazioaren batura honen birbiltze errorea gutxitzeko, batura konpensatua 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 konpensatuaren bidez lortutako errorearen estimazioa e_{n+1} ,

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

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

$$\left| \begin{array}{l} inc = \tilde{\delta}_n \oplus e_n; \\ \tilde{y}_{n+1} = \tilde{y}_n \oplus inc; \\ e_{n+1} = (\tilde{y}_n \ominus \tilde{y}_{n+1}) \oplus inc; \end{array} \right.$$

end

Algoritmoa 12: Batura konpensatua (zenbakizko integrazioa).

baturan egindako biribiltze errore zehatza da,

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

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* [80] (*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 errore 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 13: 2MultFMA.

Sterbenz Teorema.

Sterbenz teoremaren arabera [94], 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 txikitzeko aplikatuko ditugu.

Koma-higikorreko aritmetikan sakontzeko honako bibliografia azpimarratuko dugu: "Numerical computing with IEEE floating point arithmetic", Michael L.Overton [83], "Handbook of floating-point arithmetic", Jean-Michael Muller [80], "Accuracy and stability of numerical algorithms", Nicholas J Higham [51] eta "A graduate introduction to numerical methods", Rober M Corless [25].

5. Kapitulua

Zientzia konputazioa.

5.1. Sarrera.

Azken hamarkadetan, zientzia konputazioaren hazkundeak oso handia izan da eta bere erabilera ia zientzia arlo guzietara zabalduta dago [40]. Zientzialarien ahalmen handiko tresna berria (zenbakizko simulazioa) eskuragarri dute, neurri handi batetan 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 bakarrik neurtu behar. Hori bezain garrantzitsua da kode ona idaztea [97] eta zentzu honetan hiru ezaugarri hauek bereziki zaindu behar dira:

1. Errorerik gabeko kodea.
2. Kode argia idaztea.
3. Etorkizunean erraz aldatu daitekeen kodea.

Atal honetan, zientzia konputazioaren funtsezko osagaiak azalduko ditugu. Lehenengo, konputazioaren eraginkortasuna aztertzeko eta exekuzioak neurtzeko tresnen zehaztapenak emango ditugu. Ondoren, konputagailu hardware berriak

eta paralelizaio gaitasunak laburtu dugu. Jarraian software ikuspegitik, programazio lengoaiak eta aljebra linealerako (LAPACK) liburutegia landu dugu. Azkenik, konpiladoreari buruzko argibide batzuk eman ditugu.

5.2. Eraginkortasuna

Zientzia konputazioaren implementazio berri baten eraginkortasuna neuritzeko, koma-higikorreko eragiketa kopurua (*flops*) erabili ohi da. Problema handia denean, datuen mugimendua koma-higikorreko eragiketak baino garestiagoa da eta eraginkortasuna, eragiketa kopuruaren arabera neurtea okerra izan daiteke.

Prozesadoreen maiztasun-abiadura hertzetan neurzen da, hau da, *makina ziklo 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) [84].

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 genitzuke. 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.

Unixeko *time* agindua, konputazioen denborak ezagutzeko erabili daiteke [84]:

```
S time ./a.out
<kodearen irteera >

real 0m38.856 s
user 0m38.789 s
sys 0m0.004 s
```

Agindu honekin, *./a.out* C programa exekutatuko da eta ondoren, programa exekutatzeko behar izan duen denboraren informazioa pantailaratuko 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.

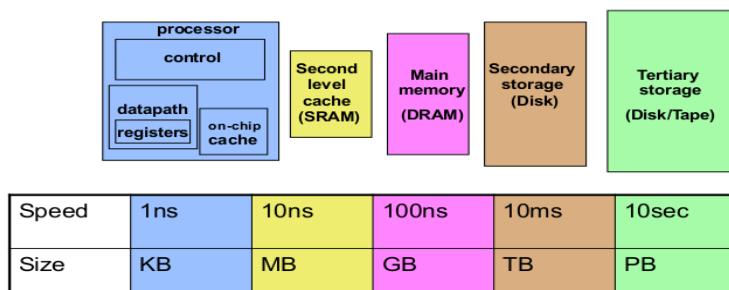
5.3. Hardwarea.

Orokorrean, gaur-egungo konputagailuak (super-konputagailu, eramangarri,...) paleloak 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 fabrikatzaileek konputagailuen gaitasuna hobetzeko, txipan prozesadore bat baino gehiago erabiltzea 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 ulertzea. Gaia nahiko konplexua izanik, ikuspegi orokor bat ematera mugatuko gara.

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 ([5.1.irudia](#)) eta funtzionamendua deskribatuko dugu.



5.1. Irudia: Memoria hierarkia.

CPU-k, koma-higikorreko eragiketak exekutatzen ditu: erregistroetatik datuak irakurri, eragiketak kalkulatu eta emaitza erregistroetan idazten ditu. Memoria nagusia eta erregistroen artean, 2 edo 3 mailako cache memoria dugu: lehen cache memoria (L_1) txiki 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 artekoak). Azkenik, disko gogorrean konputagailuko datuak (argazki, bideo,...) eta erabilgarri ditugun programa guztiak gordetzen dira.

CPU-k datu bat behar duenean, memoria hierarkian zehar bilatuko du: lehenik $L1$ cachean, ondoren $L2$ cachean,...eta hauetan ez badago, memoria nagusira joko du. Memoria nagusi eta cache memoria arteko irakurketa eta idazketa guzti hauetan, informazio konsistentzia mantentzeko hainbat arau aurrera ematen dira.

Cache memoria lerroka egituratuta dago eta lerro bakoitzia 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. Programatzaleak, algoritmo eraginkorrik 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, cacheria 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 implementazio aztertuko ditugu. C lengoainen 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 14): matrizearen lehen osagaia $a(1, 1)$ behar dugunean, memoria nagusitik Cacheria osagai honetaz gain, jarraiko 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 15): bigarren osagaia ($a(2, 1)$) gehitzeko memoria irakurketa berri bat egin behar dugu.

Arkitektura motak.

Prozesadore anitzeko konputagailu hardware berriak, konplexuak eta heterogeneoak dira. Egoera honetan, programatzaleak zaitasun handiak ditu arkitektura berrieik eskaintzen dituzten gaitasunak ondo kudeatzeko [76].

Lehen hurbilpen modura bi sistema nagusi bereiziko ditugu: memoria konpartitutako eta memoria banatutako sistemak. Memoria konpartitutako sistemetan,

```

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 14: 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

```

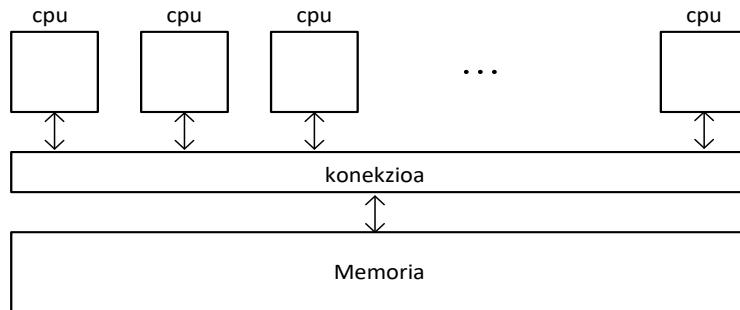
Algoritmoa 15: Memoria atzipena ez-eraginkorra.

prozesadore guztiekin memoria osoa konpartitzen dute eta implizituki konpartitutako datuen atzipenaren bidez komunikatzen dira ([5.2.](#) irudia). Memoria banatu-takotako sistemetan aldiz, prozesadore bakoitzak bere memoria pribatua du eta esplizituki bidalitako mezuen bidez komunikatzen dira ([5.3.](#) irudia). Aipatzeko da, sistema handietan bi memoria motak nahasten direla, hau da, batetik goiko mailan memoria banatuta alde bat eta bestetik, konputazio unitate bakoitzak memoria konpartitutako aldea.

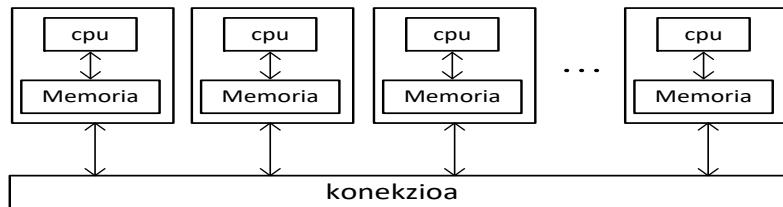
Hirugarren sistema osagarria ere aipatuko dugu, GPU (Graphical Processor Unit) unitateetan oinarritutako konputazioa. Joko-en eta animazio industrian, gra-fiko oso azkarrak beharrak bultzatuta sortutako teknologia da. Oinarrian, imajinak pantailaratzeko prozesagailu asko paraleloan lan egiten dute eta azken hamarkadan, *GPU* unitate hauek zientzia konputaziora zabaldu dira.

Oinarrizko konputagailu paraleloa.

Gure lanerako, oinarrizko konputagailu paraleloak konsideratuko ditugu: memo-ria konpartitutako eta prozesadore anitzeko unitate bat edo gehiagoz osatutako sistemak. Prozesadore anitzeko unitate bakoitzak txipean CPU bat baino gehia-go ditu. Normalean CPU bakoitzak *L1* bere cache memoria du. Aipatzeko da, era honetako sistemetan prozesadore kopurua mugatua dela (normalean ≤ 32)



5.2. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak.

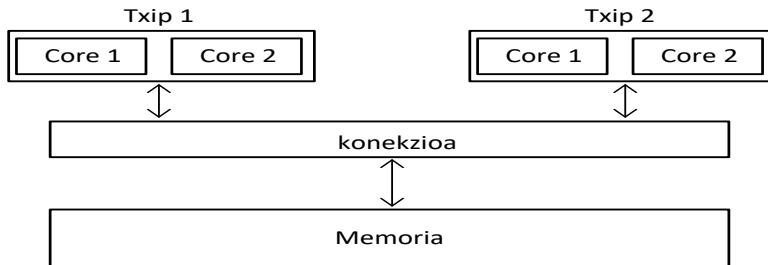


5.3. Irudia: Memoria banatutako sistemak.

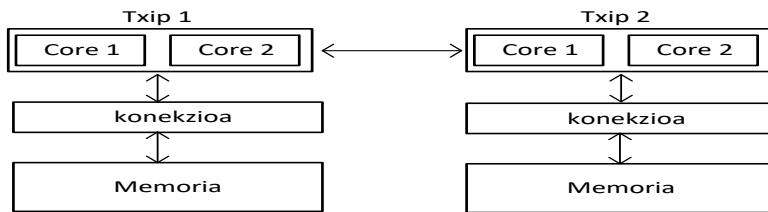
[84, 96].

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 ([5.4..irudia](#)).
2. NUMA sistemak (nonuniform memory access). Txip prozesadore bakotza, hardware berezi baten bidez zuzenean memoria bloke batikonektatuta dago. Zuzenean konektatuta dagoen memori blokearen atzipen denbora, beste txipan zehar konektatutako memoriaren atzipena baina azkarragoa da ([5.5..irudia](#)).



5.4. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak (UMA).



5.5. Irudia: Memoria konpartitutako sistemak (NUMA).

Bektorizazioa (SIMD).

Konputagailuek, *Single Instruction Multiple Data* (SIMD) instrukzioetan oinarritutako paralelizazio eskaintzen dute [80, 5]. CPU-ak eragiketa berdina aplikatzen du bektore erregistroan gorde diren zenbaki multzo bati. Bektore erregistro hauen tamaina 256-biteko ingurukoa ($256/64 = 4$ doitasun bikoitzeko zenbakia) izan ohi da eta oro har, oinarrizko eragiketa aritmetikoak (batuketa, kenketa, biderketa eta zatiketa) aplika daitezke.

Adibide moduan, hurrengo pseudokodearen bidez, iterazio bakoitzean 4 osagaien bektore baten batura erakutsiko nahi dugu,

```

for  $i = 0$ ;  $i < n$ ;  $i += 4$  do
     $A[i : (i + 4)] = A[i : (i + 4)] + B[i : (i + 4)];$ 
end

```

Algoritmoa 16: SIMD (bektorizazioa).

5.4. Programazio lengoaiak.

Fortran eta C, aplikazio zientifikoetan gehien erabiltzen diren programazio lengoaiak dira [52]. Fortran (formula translation) 1950 hamarkadan garatutako goi-mailako lehen lengoia izan zen eta oraindik ere, oso zabaldua da. Fortran estandarraren hainbat bertsio sortu dira: Fortran 66, 77, 90, 95, 2003 eta 2008. Hauetako bertsio bakotzean funtzionalitate berriak eta C lengoaiarekin lan egiteko bateragarritasuna gehitu zaizkio. C lengoia, 1970 hamarkadan jaio zen eta hardwarearekiko hurbiltasun "ezaugarri nagusiak, konpiladoreari kode eraginkorra sortzeko aukera ematen dio. C lengoia *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 lengoaiak, ez dituzte kodea paraleloan exekutatzeko tresnarik, hau da, ez dago konputazio banatu, eta prozesadore ezberdinen artean aldi berean exekuzioak zehazteko modurik. Konputazioa paraleloa implementatzeko, bi dira interfaze aplikazio programa (*API*) moduan implementatuta dauden sistema nagusiak [84]:

1. *MPI* (Message Passing Interface). Erabiliena da, memoria banatutako sistemetarako pentsatua baina memoria konpartitutako sistemeten ere aplika daitekeena.
2. *OpenMP* (Open Specifications for MultiProcessing). Erabiltzeko errazagoa eta memoria konpartitutako sistemeten bakarrik aplika daitekeena.

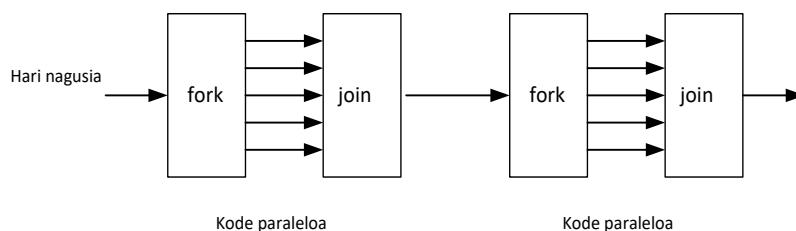
Eraginkortasun altuko konputazioaren (*high performance computing*) programazioa konplexua da: espezializazio handikoa eta konputagailuen hardware jakin baterako egokitutakoa. Zaitasun hauek, proiektu zientifikoak aurrera ateratzeko eta mantentzeko arazo asko eragiten ditu. Azken urteotan, eragozpen hau gainditzeko, programazio lengoia interesgarriak sortu dira (adibidez, Julia [14] edo Chapel [10]) baina oraindik, hauen arrakasta ikustekoa da.

Azkenik, zientzia konputazioan *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 [101] 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* eredu deitzen zaio eta grafikoki (5.6. irudian) adierazi dugu.



5.6. Irudia: OpenMp programazio eredua.

- 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.

- Kode paralelizagarria adierazi.
- Hariaren datu pribatuak zehaztu.
- Harien arteko sinkronizazioa.

Adibidea1. C lengoaian, *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 aldagai guztiak harien artean konpartituta daude eta aldagaiak pribatuak direla zehazteko, esplizituki adierazi behar da. Goiko adibidea salbuespena da; *for* iterazioaren kontagailua (adibideko *i* aldagai) pribatua da.

Algoritmo batean, kodearen zati bat da paralelizagarria [84]. Suposa dezagun, 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. Kontzeptu 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 paralelizazioak duen gainkarga gehitu behar zaio. Gainkarga hau, kontzeptu ezberdinez osatuta dago eta milsegunduko mailako eragiketak izan daitezke.

- Prozesuak edo hariak sortzeko denbora.
- Sinkronizazio denbora.
- Datu konpartitutako komunikazioa.

5.5. 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 gomendagarria da [53]. 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* lengoaian garatuta daude eta ezaugarri hauek dituzte:

1. Datu-mota hauetarako aplika daitezke:
 - (a) S: doitasun arrunta (*float*, 32-bit).
 - (b) D: doitasun bikoitza (*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 handia eskatzen du. Fabrikataile 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 lengoian implementatuta dago eta C lengoaiatik BLAS funtzioen erabilpena errazteko, *cblas* interfazea erabiltzea gomendagarria da.

Adibidea. BLAS liburutegiaren eraginkortasuna, *cblas_dgemm()* matrizeen biderkadura funtzioren bidez aztertu dugu eta gure implementazio arrunta baino $10 \times$ azkarragoa dela baiezta dugu (Taula 5.1.).

5.1. Taula: BLAS liburutegiaren eraginkortasuna. C lengoaiako gure garapena (C-arrunta) eta BLAS liburutegiaren cblas_dgemm() implementazioak konparatu ditugu. n tamainako ezberdineko matrizreak biderkatzu ditugu, eta biderketa bakoitzak n_{test} alditan errepikatu dugu, kasu guztiak eragiketa aritmetiko kopuru berdina izan ditzaten

n	nests	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.

LAPACK.

LAPACK, 1992. urtean garatu zen [4, 51] eta aljebra linealaren problemak ebazteko funtzioen liburutegia da. Jatorrizko bertsioa *Fortran 77* lengoian 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 ebaezpena: $AX = b$.
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]:

1. Problema osoa ebazten dituzten errutinak (drivers). Talde honetan funtziok arruntak eta funtziok espezializatuak daude.

Adibidea.

LAPACKE-dgelsv (LAPACK-ROW-MAJOR, n, nrhs, A, lda, ipiv, B, ldb);
Matrize orokoren (GE), $A * X = B$ sistema lineala ebazten du,

2. Konputazio errutinak. Lan zehatz bat exekutatzen duen errutinak.

Adibidea.

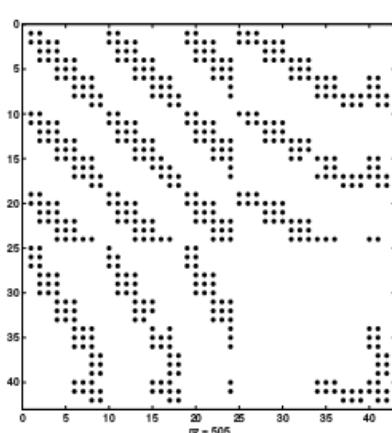
LAPACKE-dgetrf (LAPACK-ROW-MAJOR, n, m, A, lda, ipiv);
Errutina honek $A (n \times m)$ tamainako matrizearen LU faktorizazioa kalkulatzen du, $A = P * L * U$.
LAPACKE-dgetrs (LAPACK-ROW-MAJOR,trans,n,nrhs,A,lda,ipiv,B,ldb);
Errutina honek $A * X = B$ ekuazio sistemaren X soluzioa kalkulatzen du.

3. Errutina laguntzaileak.

Matrize bakanak.

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrizeari bakanak esaten zaio, baldin abantaila atera daitekeen zero osagai kopuru adina baditu. Honek esan nahi du, matrizearen zero ez diren osagaien kopurua n_{nz} ,

$$n_{nz} \ll mn.$$



5.7. Irudia: Matrize bakanak.

Matrizearen bakantasuna, konputazioaren memoria eta exekuzio denbora gutxitzeko 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.

5.6. Konpiladorea.

Konpiladorearen zereginan konplexua da, goi mailan idatzitako programari dagoen makina kodea sortzea (konputagailuaren errekurtoak modu eraginkorrean erabiltzen dituenak) [96]. Konpiladoreak heuristikotan oinarritutako kode aldaketak eragiten ditu, eraginkortasuna hobetzeko asmoarekin. Horregatik, programatzaileak 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 esperimentuetarako 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 [96]. ?? eranskinean, *Makefile* lengoaiaren oinarrizko adibideak eman ditugu.

5.7. 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.

Atal honi dagokion gomendatutako bibliografia: "An introduction to parallel programming", P. Pacheco [84], "Introduction to High Performance Scientific Computing", V. Eijkhout [96], "Performance optimization of numerically intensive codes", Goedecker [40], "Handbook of linear algebra", Leslie Hogben [53].

LAPACK eta BLAS liburutegiak erabiltzeko informazio interesgarria "Intel Math Kernel Library. Reference Manual" [1] dokumentuan aurki daiteke.

II. Atala

Ekarpenak.

6. Kapitulua

IRK: Puntu-finkoaren iterazioa.

6.1. 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 inplizitu simplektikoaren (Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoa) implementazioa proposatu dugu, eta biribiltze errorearen garapena txikia izateko ahalegin berezia egingo dugu. Implementazioa, problema ez-zurrunetan aplikatzeko garatu dugunez, ekuazio-sistema inplizitua, puntu-finkoaren iterazioaren bidez ebatziko dugu (puntu-finkoaren iterazioan eta Newtonen iterazio simplifikatuan oinarritutako implementazioen eraginkortasun azterketak, [46, 58] lanetan kontsultatu daiteke).

Integracioaren exekuzio denborak onargarriak izan daitezten, honako suposizioa egingo dugu: ekuazio diferentzialaren eskuin aldeko funtziaren sarrera eta irteera argumentuak, makina zenbakiak (koma-higikorreko aritmetika hardware bidezko exekuzioa azkarra duen datu-mota) direla. 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 garapen 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 [47] aztertuko dugu. Ondoren, IRK implementazio hau hobetzeko gure proposamenak azalduko ditugu eta azkenik, zenbakizko integrazioen bidez, gure implementazio berriaren abantailak erakutsiko ditugu.

6.2. Hairer-en implementazioa.

IRK implementazio estandarra.

Gure abiapuntua, Hairer-ek [47] proposatutako IRK metodoaren implementazioa (batura konpensatuaren teknikarekin [51] garatutakoa) da. Lan honetan, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodo simplektikoaren implementazio estandarrean, biribiltze erroreak energian errore sistematiko bat eragiten zuela ohartu zen, beste metodo simplektiko esplizituetan gertatzen ez zena. Bere azterketaren ondorioen arabera, errore sistematiko honen jatorriak bi dira:

1. Aplikatutako IRK metodoa ez da simpletikoa (6.8), integrazioan $a_{ij}, b_i \in \mathbb{R}$ koefiziente zehatzak erabili ordez, biribildutako $\tilde{a}_{ij}, \tilde{b}_i \in \mathbb{F}$ erabiltzen direlako.
2. Geratze irizpide estandarrarekin,

$$\Delta^{[k]} = \max_{i=1, \dots, s} \|Y_i^{[k]} - Y_i^{[k-1]}\|_\infty \leq \text{tol} \quad (6.1)$$

(non tol finkatutako tolerantzia den), urrats bakoitzeko aplikatutako puntu-finkoaren iterazioek, errore sistematikoa eragiten dute.

Konponbideak.

Energiaren errore sistematikoa desagertzeko, implementazio estandarrean honako aldaketak proposatu zituen:

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

$$a_{ij} = \hat{a}_{ij} + \tilde{a}_{ij}, \quad b_i = \hat{b}_i + \tilde{b}_i \quad (6.2)$$

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,

$$\Delta^{[k]} = 0 \text{edo } \Delta^{[k]} \geq \Delta^{[k-1]}. \quad (6.3)$$

Hairer-en implementazioaren algoritmoa.

Hairer-ek bere implementazioaren **Fortran kodea** eskuragarri du. Jarraian, bere implementazioaren **17** algoritmoa eta erabilitako batura konpensatuaren teknikaren **18** algoritmoa, zehaztu ditugu.

```

 $y_0 = y(t_0); e_0 = 0;$ 
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
     $(y_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow \text{BaturaKonpensatua}(y_n, e_n, F_n^{[k]});$ 
end
```

Algoritmoa 17: Hairer-en IRK implementazioa

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

```

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

Algoritmoa 18: Hairer-en IRK implementazioaren, batura konpensatua

Hairer-en implementazioaren arazoak.

Hairer-ek bere implementazioa, *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* [41] betetzen duela ondorioztatu zuen. Integracioen azterketa estatistikoa egin zuen biribiltze errorearen ausazkotasuna baiezatzeko. Problemaren hasierako balio zehatz bati dagokion perturbatutako $P = 1.000$ integracio exekutatu zituen eta integracio horien energia errorearen batezbestekoa (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 integracioa, $h = 500/3$ eguneko urrats luzerarekin zuzena da baina aldiz okerra $h = 1000/3$ urratsarekin. Gainera, bere implementazioaren biribiltze errorearen propagazioa optimoa ez dela uste dugu.

6.3. Gure implementazioa.

IRK metodoaren puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioa hobetzeko lau proposamen egingo ditugu. Lehenik, Runge-Kutta metodoaren birformulazio bat proposatuko dugu, metodoa definitzen duten koma-higikorreko koefizienteek, izaera simplektikoa zehazki bete dezaten. Bigarrenik, Hairer-ek proposatutako geratze irizpidearen [47] arazoak gainditzen, geratze irizpide sendoagoa eta normaren independentea garatu dugu.

Hirugarrenik, biribiltze errorea gutxitzeko helburuarekin, koma-higikorreko konputazioak bereziki zaindu ditugu. Kahan-en batura konpensatuaren [60] [51] [80] algoritmoaren aldaera bat aplikatu dugu.

Azkenik, biribiltze errorearen estimazioa monitorizatzeko teknika proposatu dugu. Biribiltze errorearen estimazioa, integracio nagusi eta doitasun txikiago-ko bigarren integracio baten soluzioen arteko diferentzia gisa kalkulatuko dugu. Zenbakizko soluzio hauek, bi modutara kalkulatu daitezke: paraleloan, exekuzio independenteak konsideratuta; edo bi soluzioen integracio sekuentziala kalkulatuz, konputazio kostu gehigarri txikiarekin.

Kontsideratu dezagun, honako hasierako baliodun problema,

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \tag{6.4}$$

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, (6.4) problemaren $y(t)$ soluzioaren $y_n \approx y(t_n)$ ($n = 1, 2, \dots$) zenbakizko soluzioa, integrazio metodo bat aplikatuz lortuko dugu,

$$y_{n+1} = \Phi(y_n, t_n, t_{n+1} - t_n), \quad (6.5)$$

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,

$$\Phi(y, t, h) = y + h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, Y_i), \quad (6.6)$$

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

$$Y_i = y + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_j) \quad i = 1, \dots, s. \quad (6.7)$$

IRK metodoa simplektikoa da, baldin soilik honako baldintza betetzen bada [58],

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (6.8)$$

IRK metodoa simplektikoa bada, (6.4) sistemaren integral koadratikoak zehazki mantenduko ditu eta sistema Hamiltondarra balitz, $H(y)$ funtzioko Hamiltondarraren balioa integrazio tarte luzeetarako ondo kontserbatuko du.

6.3.1. 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 (6.8) beteko. Ondorioz, metodoak ez ditu integral koadratikoak kontserbatuko eta Hamiltondar funtzioaren eboluzioan, drift lineala ageriko da [58].

Arazo hau gainditzeko, IRK metodoa era horretan birformulatuko dugu,

$$Y_{n,i} = y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}, \quad L_{n,i} = h b_i f(Y_{n,i}), \quad i = 1, \dots, s, \quad (6.9)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s L_{n,i}, \quad (6.10)$$

non

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

Runge-Kutta metodoa simplektikoa izateko baldintza (6.8), modu honetan berridatziko dugu,

$$\mu_{ij} + \mu_{ji} - 1 = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (6.11)$$

Birformulazio honek formulazio estandarrarekiko duen abantaila, simplektizidade baldintzaren espresioan biderketarik ez agertzeak, baldintza zehazki beteko duten $\tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak aurkitzeko bidea errazten duela da. 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), $1/2 < |\mu_{ij}| < 2$ denez, $1 - \tilde{\mu}_{ij}$ balioak koma-higikorreko adierazpen zehatza izango duela ziurtatzen du. Laburtuz, hauek ditugu birformulatutako simplektizitate baldintza (6.11) zehazki betetzen duten koma-higikorreko $\tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak,

$$\tilde{\mu} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1 - fl(\mu_{21}) & \dots & 1 - fl(\mu_{s1}) \\ fl(\mu_{21}) & 1/2 & \dots & 1 - fl(\mu_{s2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ fl(\mu_{s1}) & fl(\mu_{s2}) & \dots & 1/2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{s \times s}. \quad (6.12)$$

Bestalde, b_i koefizienteak eta ν_{ij} atalen hasieraketarako interpolazio koefizienteak finkatzeko zehaztapenak ere emango ditugu.

1. hb_i koefizienteak.

Gure implementazioan, $hb_i = h \times b_i$ koefizienteak aurre-kalkulatuko ditugu.

Koefiziente hauek simetrikoak direla 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 (2.3.3.atala), formulazio berriari dagozkion interpolazio ν_{ij} koefizienteak era honetan definituko ditugu,

$$Y_{n,i}^{[0]} = y_n + h \sum_{j=1}^s \nu_{ij} L_{n-1,j}, \quad \nu_{ij} = \lambda_{ij}/b_j \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (6.13)$$

6.3.2. Geratze irizpidea.

Ekuazio implizituaren (6.9) soluzioaren hurbilpena lortzeko, puntu-finkoaren iterazioa gogoratuko dugu: iterazioaren abiapuntua $Y_{n,i}^{[0]}$ finkatu eta $k = 1, 2, \dots$ iterazioetarako, $Y_{n,i}^{[k]}$ hurbilpenak lortu geratze irizpidea bete arte.

```
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 19: IRK puntu-finkoaren iterazioa

Iterazioa, $Y_{n,i}^{[0]} = y_n$ balioarekin edo aurreko urratsetako atalen balioen interpolazioz lortutako balioekin [46] hasieratu daiteke. Urrats luzera h adina txiki aukeratuz gero, iterazioek, (6.9) ekuazio aljebraikoen soluzioa den puntu-finkora konbergituko dute. Gure zenbakizko esperimentuetan nahiz Hairer-ek eginda esperimentuetan ere [47], h urrats luzera txikiarekin integrazioaren urrats gehienetan, puntu-finkoa lortzen dela baiezttatu dugu.

IRK metodoaren implementazio estandarraren geratze irizpidea honakoa da,

$$\begin{aligned} \Delta^{[k]} &= (Y_{n,1}^{[k]} - Y_{n,1}^{[k-1]}, \dots, Y_{n,s}^{[k]} - Y_{n,s}^{[k-1]}) \in \mathbb{F}^{sd}, \\ \|\Delta^{[k]}\| &\leq tol \end{aligned} \quad (6.14)$$

non $\|\cdot\|$ aurre-finkatutako bektore norma eta tol , tolerantzia errorea den. Tolerantzia txikiegia aukeratzen bada, tolerantzia hori ez lortzea eta infinituki iterazioak exekutatzea gerta daiteke. Baino tolerantzia ez bada behar bezain txikia aukeratzen, iterazioa puntu-finkora iritsi aurretik geratuko da eta lortutako $Y_i^{[k]}$ hurbilpenaren errorea, biribiltze errorea baino handiagoa izango da. Gainera, Hairer-ek [47] iterazio errorea modu sistematikoan metatzeko konprobatu zuela.

Hairer-ek proposatutako geratze irizpidea gogoratuko dugu; $\Delta^{[k]} = 0$, puntu-finkora iritsi delako ; edo $\|\Delta^{[k]}\| \geq \|\Delta^{[k-1]}\|$, biribiltze errorea nagusi delako, non

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

Orokorean, geratze irizpide honek ondo funtzionatzen du baina zenbait esperimentuetan, 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 errore agertzen da. Energiaren errore erlatiboaren eboluzioa 6.1.(a) irudian erakutsi dugu. Integrazioaren lehen urratsaren iterazioak aztertzen badugu,

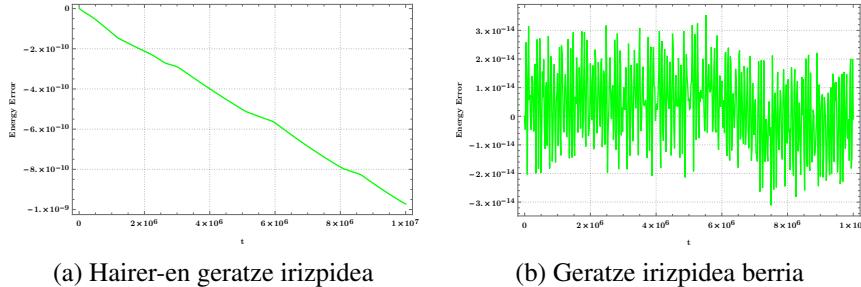
$$\|\Delta^{[1]}\| > \|\Delta^{[2]}\| \cdots > \|\Delta^{[12]}\| = 3.91 \times 10^{-14} \leq \|\Delta^{[13]}\| = 4.35 \times 10^{-14}$$

13.iterazioan geratuko dela konprobatuko dugu. Puntu-finkoaren iterazioa goizegi geratu da, hurrengo iterazioetan ikusi daitekeenez, $\|\Delta^{[13]}\| > \|\Delta^{[14]}\| > \|\Delta^{[15]}\| > \|\Delta^{[16]}\| = 0$ konbergentziaren hobekuntza gertatzen baita.

Hairer-en geratze irizpide aztertu ondoren bi ondorio atera daitezke. Hori azaltzeko, lehenik honako notazioa finkatuko dugu,

$$\Delta_j^{[k]}, \text{ non } \Delta^{[k]} \in \mathbb{F}^{sd} (1 \leq j \leq sd).$$

Lehenik, 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, $\exists j \in \{1, \dots, sd\}$ daiteke osagairik, non $|\Delta_j^{[k]}| < |\Delta_j^{[k-1]}|$ hobetzeko tartea duen eta horregatik, iterazio gehiago eman beharko genitzuke.



6.1. Irudia: Energia errore erlatiboaren eboluzioa, $h = 1000/3$ urrats luzerarekin eguzki-sistemaren kanpo-planeten problemaren integraziorako [47]. (a) Hairer-en geratze irizpidea, (b) Geratze irizpidea berria

Arazo hauei aurre egiteko, geratze irizpidea berri bat proposatuko dugu. Iterazioak $k = 1, 2, \dots$ jarraitzea, $\Delta^{[k]} = 0$ bete arte edo honako baldintza bi iterazio jarraietan betetzen den artean,

$$\forall j \in \{1, \dots, sd\}, \quad \min \left(\{|\Delta_j^{[1]}|, \dots, |\Delta_j^{[k-1]}|\} / \{0\} \right) \leq |\Delta_j^{[k]}|. \quad (6.15)$$

$K, k = K - 1$ eta $k = K$ balioetarako (6.15) baldintza betetzen ez duen lehen zenbaki oso positiboa bada, $y_{n+1} \approx y(t_{n+1})$ era honetan kalkulatuko dugu,

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

Hainer-ek, eguzki-sistemaren kanpo-planeten problemaren $h = 1000/3$ eguneko urrats luzerarekin egindako integrazioa errepikatu dugu eta geratze irizpide berriarekin, energia errorearen eboluzio zuzena dela ikus daiteke (6.1.(b) Irudia).

Tolerantzi testa.

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

Puntu-finkoaren iterazioak amaitzerakoan, urratsa eman aurretik 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 ($rto_i, atol_i, i = 1, \dots, d$), *distantzia normalizatua* definituko dugu,

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

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

6.3.3. Biribiltze errorea gutxitzeko teknikak.

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

Batura errekurtsiboen konputazioen doitasuna hobetzeko teknikari *batura konpensatua* esaten zaio (11) eta zenbakizko integrazioetan erabili ohi da. Atal honetan, batetik IRK metodoetan batura konpensatuaren aplikazio estandarra hobetzeko proposamena azalduko dugu. Beste aldetik, IRK metodoaren gure implementazioan biribiltze errorearen beste jatorri nagusiak (biderketa eta batuketa bat) modu finagoan kalkulatzeko proposamena egingo dugu.

Batura konpensatua.

Integrazioaren 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 $\tilde{y}_0 = f_l(y_0)$ eta $e_0 = f_l(y_n - \tilde{y}_0)$ diren.

IRK metodoaren implizituki $Y_{n,i}$ atalak askatzeko ekuazioetan, \tilde{y}_n balioa erabili ordez, $(\tilde{y}_n \oplus e_n)$ expresioa erabiltzea proposatuko dugu,

$$L_{n,i}^{[k]} = h b_i f(Y_{n,i}^{[k-1]}), \quad Y_{n,i}^{[k]} = \tilde{y}_n \oplus \left(e_n \oplus \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[k]} \right). \quad (6.16)$$

Aldaketa honekin, lortutako zenbakizko soluzioaren doitasuna, batura konpensatu 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 jasotzeko, *FMA* eragiketan oinarritutako teknika (13 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 konpensatua.

Azkenik, batura konpensatua (4.1) aplikatuko dugu,

$$(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[K]}, \dots, L_{n,s}^{[K]}). \quad (6.17)$$

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

```

 $s_0 = \tilde{y}_n$ 
 $ee = \delta_n$ 
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 20: BaturaKonpensatua, $S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[K]}, \dots, L_{n,s}^{[K]})$ funtziaren implementazioa da

6.3.4. 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 kalkulatuko dugu. Jarraian, zehaztapenak emanago ditugu.

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

Function flr (x, r)

```

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

```

Algoritmoa 21: flr

Funtzia 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 funtzia da.

Bigarren zenbakizko soluzioa, $(\hat{y}_n + \hat{e}_n)$, r ($r < m$) balio bat finkatuta eta aurreko implementazioaren kalkulua (6.17), beste era honetan kalkulatuko dugu,

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

Zenbakizko integrazioaren biribiltze errorearen estimazioa, soluzio nagusiarren ($y_n + e_n$) eta r balio txiki baterako (esaterako $r = 3$) kalkulatutako bigarren zenbakizko soluzioaren ($\hat{y}_n + \hat{e}_n$) arteko differentziaren norma bezala kalkulatuko dugu.

$$estimazio_n^i = \|(y_n^i + e_n^i) - (\hat{y}_n^i + \hat{e}_n^i)\|_2, \quad i = 1, \dots, d. \quad (6.18)$$

Biribiltze errorearen estimazioa lortzeko, bi integrazioak sekuentzialki eta *CPU* konputazio kostu txikiarekin kalkulatzeko teknika deskribatuko dugu. Urrats ba-

koitzean, bi integrazioen $Y_{n,i}, \hat{Y}_{n,i}$ ($i = 1, \dots, s$) atalako 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 ditu (ikus [22 algoritmoa](#)).

```

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

Algoritmoa 22: RKG2: errore estimazioa

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

6.3.5. Algoritmoa.

Azkenik, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazio berriari dagoen algoritmoa laburtuko dugu ([23](#) 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
     $E_{n,i} = h b_i f_{n,i}^{[k]} - L_{n,i}^{[k]}$ ;
     $\delta_n = e_n + \sum_{i=1}^s E_{n,i}$ ;
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpensatua( $\tilde{y}_n, \delta_n, L_n^{[k]}$ );
end
```

Algoritmoa 23: 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, m erabiltzaileak finkatutako soluzioen frekuentzia bada, $t_i = t_0 + i * (m \cdot h)$, $i = 1, \dots, N/m$ uneetarako, ohiko da zenbakizko soluzioa fitxategi bitar batean itzultzea.

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,

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

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

6.4. 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.

6.4.1. Problemak.

Bi Hamiltondar sistema konsideratuko ditugu: pendulu bikoitz arruntaren eta kanpo-planeten problemak [46] [28]. Integrazio guztietaan, h urrats luzera, truncatze errorea biribiltze errorea baino txikiago izan dadin aukeratu dugu.

Pendulu bikoitz arrunta

Pendulu bikoitz arruntaren Hamiltondarra eta parametroak, 3.2.1. atalean definitu ditugu. Sistema Hamiltondar honetarako, bi hasierako balio konsideratu ditugu: hurrenez hurren, izaera ez-kaotikoa (NCDP) eta kaotikoa (CDP) duten mugimenduak eragiten dituztenak. Bi hasierako baliodun problema hauek (NCDP eta CDP), energia errorearen eboluzioaren eta biribiltze errorearen estimazioaren azterketa egiteko konsideratuko ditugu. Energia errorearen jatorria aztertzeko integrazio luzerako ordea, problema ez-kaotiko (NCDP) bakarrik konsideratu dugu.

Kanpo-planeten problema

Eguzki-sistemaren kanpo-planeten eredu Newtoniarra, 3.4.2. 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 [89]. Dena den, zenbakizko esperimentuetarako, Hairer-en [47] 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.

6.4.2. 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 soluzio zehatza $y(t_n)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), (6.9)-(6.10) metodoa aplikatuz (b_i, μ_{ij} koefiziente zehatzkin) lortutako zenbakizko soluzioa y_n ordezkatzerakoan eragindako errorea.
2. Iterazio errorea: praktikan, puntu-finkoaren (19) K iterazio finitu aplikatzen da, eta (6.9) 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. Funtzioa zehatza $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, bere 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, zeinek ekidin ezineko iterazio errorea sortuko duen; bestetik, \tilde{f} funtzioaren konputazioan sortatutako biribiltze erroreak.
4. IRK metodoaren koefiziente zehatzak $b_i, \mu_{ij} \in \mathbb{R}$, dagozkien doitasun bikoitzeko koefiziente $\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ erabiltzeagatik eragindako errorea.
5. Algoritmoaren implementazioaren eragiketa aritmetikoak (\tilde{f} funtzioaren ebaluazioa 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 funtzioaren ebaluazioa barne) doitasun laukoitzeko (128-bit) koma higikorreko aritmetikan kalkulatzen duen implementazioa aplikatuko dugu.

B. Implementazio superideala.

Zenbakizko integracio hau, iterazio errorea estimatzeko erabiliko dugu. Konputazio guzia doitasun laukoitzean egindako implementazioa baina geratze irizpidea, doitasun bikoitzean neurrtuko 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 integracioa konsideratuko 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 diogu).

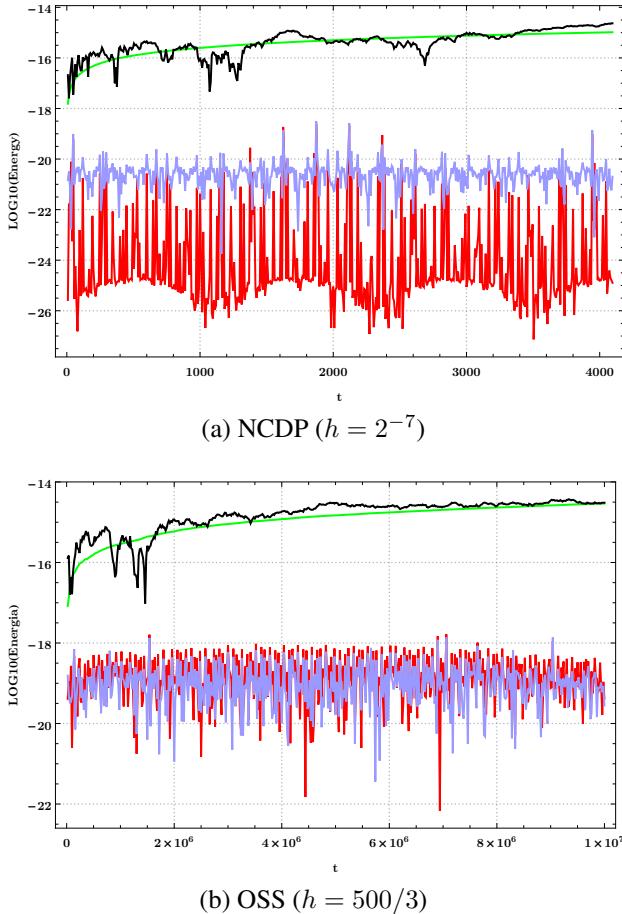
Hasierako baliodun problema bakoitzaren, goian azaldutako A–D implementazio bakoitzari dagokion energia errorearen eboluzioa [6.2.](#) irudian erakutsi dugu. Aukeratutako h urrats luzerarentzat, trunkatze errorea biribiltze errorearen azpitik dagoela baiezta dugu. Metodoaren doitasun bikoitzeko koefizienteak ($\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$) erabiltzeak, ez du eraginik biribiltze errorearen garapenean. Iterazio errorea, biribiltze errorearen oso antzoko da, eta energia errorearen drift lineala eragitea espero daiteke.

6.4.3. Errore azterketa estatistikoa.

Biribiltze erroreak eragiten duen zenbakizko erroreen azterketa fidagarriagoa egiteko, analisi estatistikoa aplikatu dugu (Hairer-en [\[47\]](#) 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 [\[47\]](#). Zenbakizko esperimentuera rako, Hairer-en IRK metodoaren [Fortran kodea](#) exekutatu dugu.



6.2. Irudia: Algoritmo implementazio ezberdinatarako, energiaren errore erlatiboa esaka-la logaritmikoan irudikatu dugu: A-algoritmoa trunkatze errorearen estimazioa (gorriz), B-algoritmoa iterazio errorearen estimazioa (berdez), C-algoritmoa doitasun bikoitzean \tilde{f} funtziokoaren ebaluazioaren eraginaren estimazioa (beltzez), doitasun bikoitzeko $\tilde{b}_i, \tilde{\mu}_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteak aplikatzearen estimazioa (urdinez). Hasierako baliodun problema bakoitzarentzat, irudi bana egin dugu: pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikoa (a) eta kanpo-planeten problema (b).

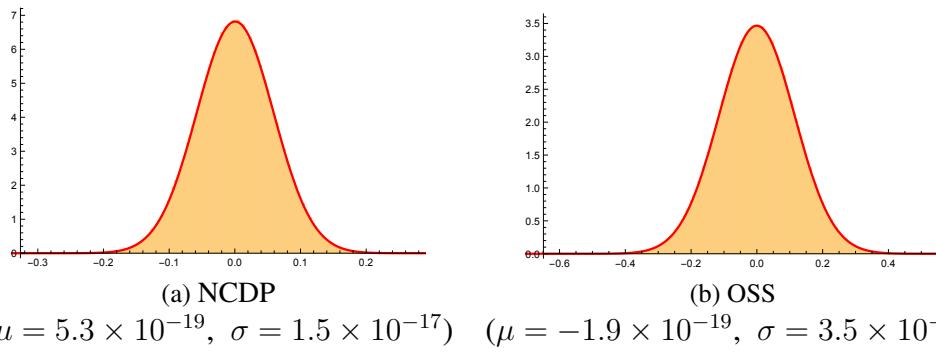
Batetik, DP implementazioaren biribiltze errorearen garapena, FPIEA implementazioaren (aritmetika zehatza) errorearekiko kualitatiboki antzekoa den eta magnitudean gertu dagoen ziurtatu nahi dugu. Bestalde, DP implementazioa, Haireren implementazioarekin konparatu nahi dugu.

Aipatutako hiru implementazioetarako, 6.1. taulan puntu-finkoa lortu den urratzen portzentaia eta iterazio batezbestekoa laburtu ditugu .

6.1. Taula: Puntu-finkoa lortu den urratsen portzentaia eta iterazio batezbestekoa, pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikorako (NCDP), pendulu bikoitzaren problema kaotikorako (CDP), eta kanpo-planeten problemarako (OSS). Zutabetan, hiru implementazioa 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.



6.3. Irudia: DP implementazioarekin lortutako KP energia differentzieng histogramak, eta $N(\mu, \delta)$ 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, energi differentzia $H(y_{km}) - H(y_{km-m})$ ausazkoa izatea espero da, μ batezbestekoa ($\mu = 0$ idealki) eta σ desbideratzea duen banaketa Gausiararekin. Ondorioz, metatutako energia differentzia,

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

$t_{mk} = t_0 + kmh$ 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 [41] 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 differentziak,

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

banaketa Gaussiarra dagokion aztertuko dugu.

Integrazio tarteak $[t_0, t_{end}]$ 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). [6.3.](#) irudian, pendulu bikoitzaren problema ez-kaotikoari (NCDP), eta kango-planeten problemari (OSS) dagozkien histogramak, $N(\mu, \sigma)$ banaketa normalari oso ondo egokitzen zaiela ikus daiteke.

Energia errorearen batezbestekoaren eta desbideratze estandarraren eboluzioa

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

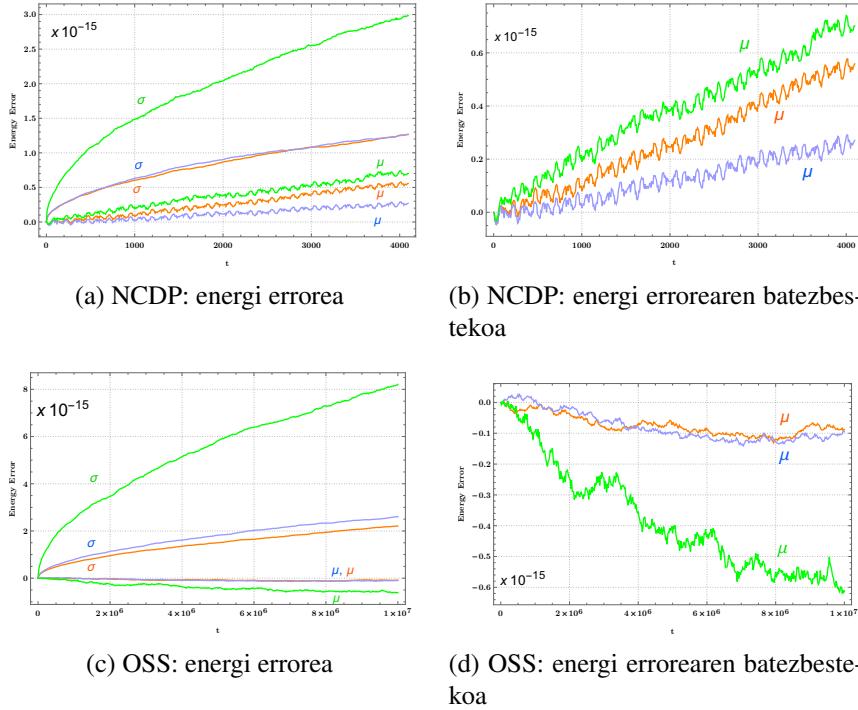
FPIEA, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK implementazio optimoena kontsideratu daiteke, f ebaluatzea, dagokion doitasun bikoitzeko \tilde{f} funtzioa aplikatuko dugula suposatzen badugu. Esperimentu hauetan, FPIEA implementazioaren geratze irizpidea DP implementazioarena baino gogorragoa erabili dugu: iterazioa geratu dugu $\Delta^{[k]} = 0$ delako edo ([6.15](#)) baldintza hamar iterazio jarraitetan bete delako. Era honetan, puntu-finkoa lortu ez den urratsetarako, iterazio errorea ekiditen saiatu gara.

[6.4.](#) irudiko zenbakizko esperimentuetan, DP implementazioaren energi errorearen batezbesteko eta desbideratze tipikoaren eboluzioa ia optimoa da (FPIEA implementazioarekiko gertu).

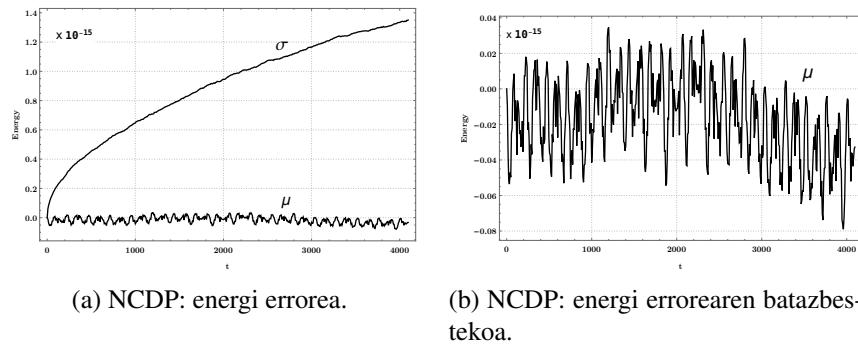
Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodoen implementazioan, energi errorearen batezbestekoan drift lineal txiki bat (NCDP problemarentzat) ekidin ezinezkoa dela sinistuta gaude. Esperimentu hauen energi errorearen eboluzioak, [6.2.](#) irudian erakutsitako iterazio errorea, birbiltze errorearen gertu egoteagatik egindako iruzkinarekin kontsistenteari dira.

Energia drift-a, ez da IRK metodo simplektikoen berezko arazoa. [6.5.](#) irudian, Newton simplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioarekin NCDP problemaren aurreko esperimentua errepikatu dugu eta energi errorearen batezbestekoaren eboluzioan ez da drift linealik agertzen.

Zenbakizko esperimentuen atala amaitzeko, [6.6.](#) irudian, FPIEA, DP eta Hairer-en implementazioen integrazioen kokapen errorearen eboluzioa (batezbestekoa eta desbideratze estandarra) erakutsi ditugu. Emaitza hauek, DP implementazioa,

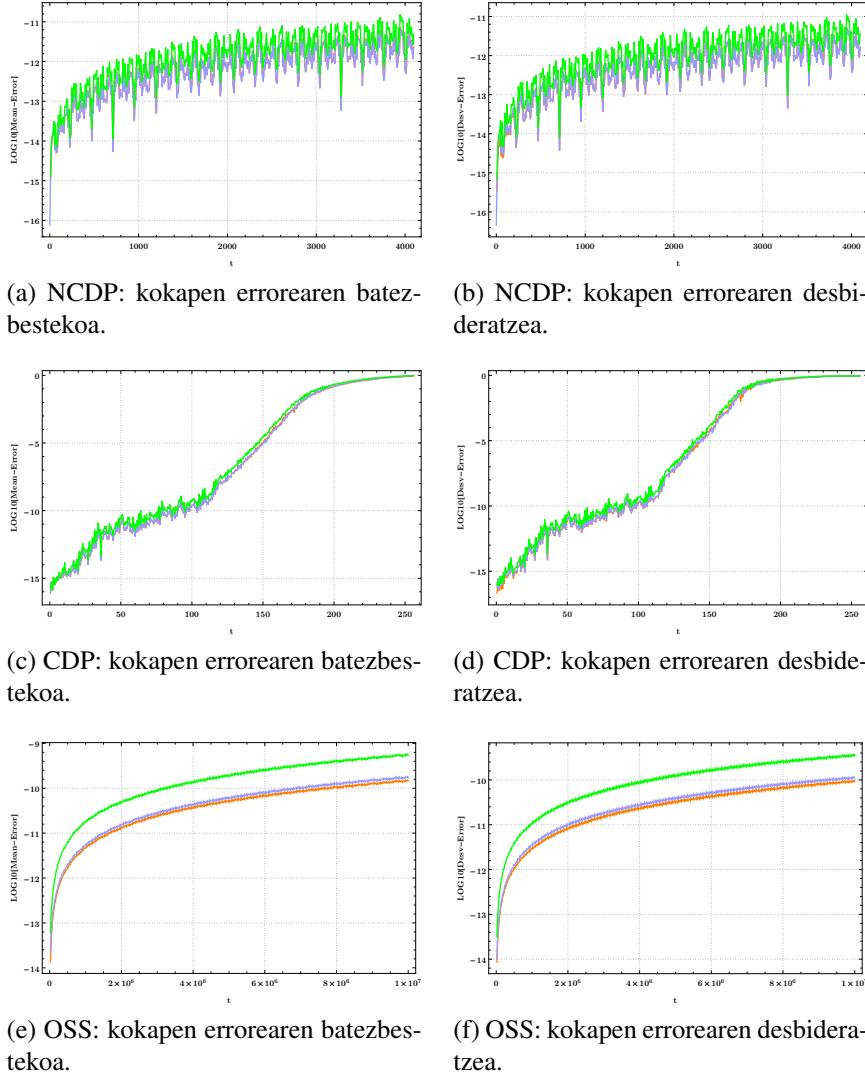


6.4. Irudia: Energi errorearen batezbestekoa (μ) and desbideratze estandarra (σ) (ezkerrean) eta energi errorearen batezbestekoaren zehaztapena (eskubian), DP implementazioarentzat (urdinez), FPIEA implementazioarentzat (laranjaz), eta Hairer-en implementazioarentzat (berdez). Pendulu bikoitzaren problema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



6.5. Irudia: Energi errorearen batezbestekoa (μ) eta desbideratze estandarra (σ), Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK implementazioa aplikatuta

puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazio optimoaren oso gertu da-goenaren ideia indartu egiten dute.



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

6.4.4. Biribiltze errorearen estimazioa

[6.3.4.](#) atalean deskribatutako biribiltze errorearen estimazioa kalkulatzeko teknika aplikatu dugu. [6.7.](#) irudian, hiru problemetarako (perturbatu gabeko hasierako balioa erabiliz) DP implementazioaren integrazioaren kokapen errorea eta kokapen errorearen estimazioa ($r = 3$ balioarekin) irudikatu ditugu. Era berean, hiru problemen hasierako balioen perturbatutako $P = 1000$, DP implementazioaren integrazioen kokapen errorearen batezbestekoa eta kokapen errorearen estimazioaren batezbestekoak konparatu ditugu. Emaitza hauek, proposatutako biribiltze errorearen estimazioa kalkulatzeko teknikaren erabilgarritasuna erakusten dutela uste dugu.

6.5. Laburpena.

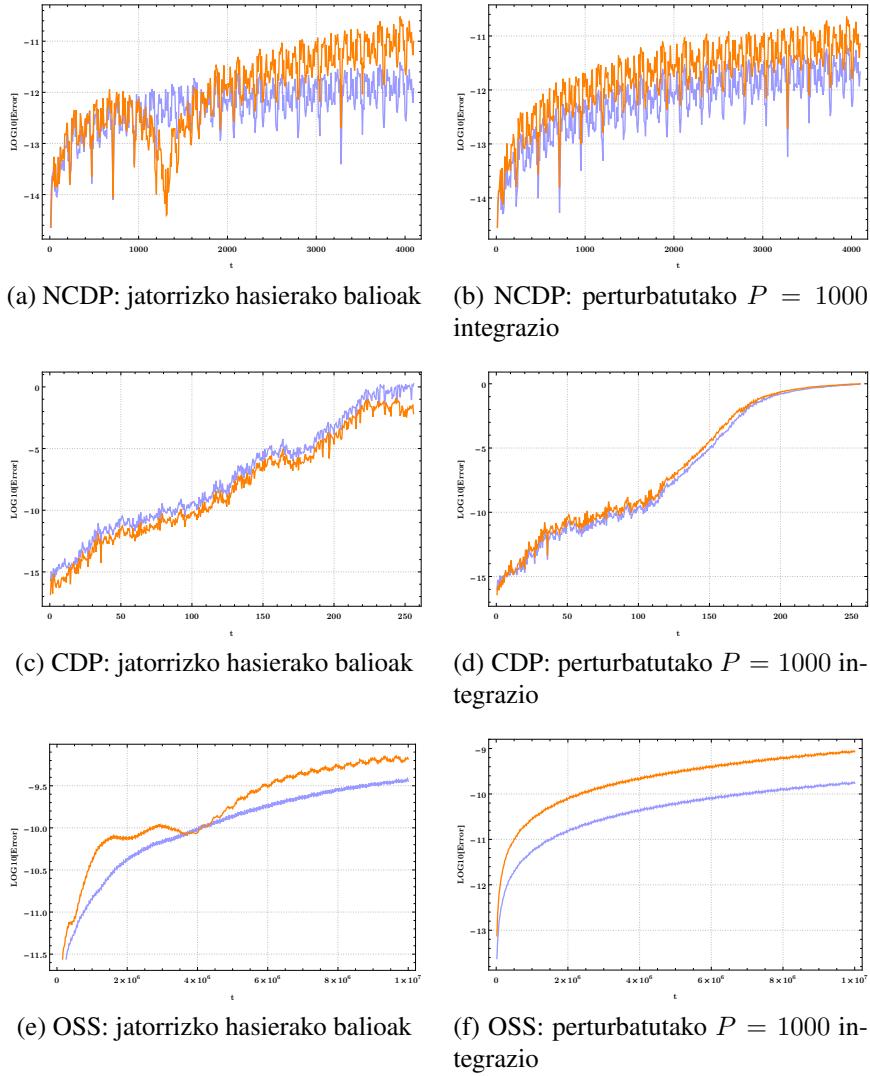
Runge-Kutta metodo implizituak (adibidez, Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoak) Hamiltondar sistemek doitasun altuko integrazioetarako aproposak dira. Problema ez-zurrenetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioa, Newton metodoaren iterazioan oinarritutako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

Implementazio berri honetan, biribiltze errorearen eragina txikitzeko ahalegin berezia egin dugu eta gainera, biribiltze errorearen estimazio kalkulatzeko aukera eman dugu. Gure implementazioak, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazio onenaren birbiltze errorearen eboluzio antzekoa du eta zentzu honetan, gure implementazioa ia optimoa da. Zenbakizko esperimentuek idei hau baiezztatu dute.

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

Bestalde, puntu-finkoaren iterazioaren implementazioaren zenbakizko esperimentu batzuetan, energi errorearen drift lineal txiki bat ekidin ezinezkoa agertu zaigu. Energi errorearen drift-a gainditzea garrantzitsua denenerako, Newtonen iterazioan oinarritutako implementazioa beharrezkoa izan daiteke.

Azkenik, aipatu nahi dugu, atal honen edukiak [Numerical Algorithms](#) aldizkarian publikatutako [7] artikuluan aurki daitezkeela eta implementazioaren [kodea](#) eskuragarri jarri dugula.



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

7. Kapitulua

IRK: Newtonen Iterazioa.

7.1. Sarrera.

Atal honetan, Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoen implementazio eraginkorra ikertuko dugu. Problema zurruna denean, puntu-finkoaren iterazio ez da eraginkorra eta Newtonen iterazioa aplikatu behar da. Gainera problema ez-zurruna izanik ere, Newton iterazioak interesgarriak izan daitezke; bereziki doitasun altuko (doitasun laukoitza) 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 iteratiboki askatu behar da

$$(I_d \otimes I_s - h A \otimes J) \in \mathbb{R}^{sd \times sd}, \quad (7.1)$$

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

Lan hauetan [21, 75, 15], (7.1) matrizearen egitura berezia aprobetxatz, ekuazio-sistema linealak modu eraginkorrean ebazteko proposamena egin zuten. Zehazki, ia blokeka diagonala den (7.1) matrizearen antzekoa da; 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 A matrize koefizienteak, $[s/2]$ balio propio konplexu pareak ditu (s bakoitia denean, balio propio erreal bat gehituta).

Gure ekarpenean, sd -dimentsioko (7.1) ekuazio-sistema, $(s+1)d$ dimentsioko sistema gisa berridatziko dugu, eta $d \times d$ tamainako $[s/2] + 1$ matrizeen LU deskonposaketa (eta tamaina bereko matrize batzuen biderketa) kalkulatz, askatuko dugu. Tamaina txikiko matrizeen LU deskonposaketa azkarra denez, konputazionalki eraginkorra izatea espero dugu. Algoritmoa, IRK metodoa simetriko eta

simplektikoetarako (bi propietateak betetzen dituzten metodoetarako) garatu dugu. Dena den, bai IRK metodo ez-simetriko simplektikoetan, bai IRK metodo simetriko ez-simplektikoetan aplika 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 sinplifikatua era honetan definituko dugu (algoritmoa 24).

```

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 24: Newton sinplifikatua.

non $J \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $J^{[k]} = J(u^{[k]})$ 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. 24 algoritmoaren eskubi aldean, doitasun bikoitzeko (64-bit) implementazioa balitz, eragiketa bakoitzaren doitasuna zehaztu dugu: Jacobiarraren balioztapena eta algebra linealeko eragiketak, doitasun arruntean (32-bit) kalkulatu daitezke.

IRK Newtonen iterazioaren azterketa, era honetan egituratu dugu. Lehenengo, (7.2.) atalean, Newtonen iterazio estandarraren azalpenak eman ditugu eta notazioa finkatu dugu. (7.3.) atalean, Newtonen iterazioen ekuazio-sistema modu eraginkorrean askatzeko teknika deskribatu dugu. Hurrengo, (7.4.)-(7.5.) ataletan, Runge-Kutta formulazio berriarekin aplikatzeko zehaztasunak eman ditugu. (7.6.) atalean, Newtonen iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazio berria aurkeztu dugu. Azkenik, (7.7.) atalean, implementazio berriarekin egindako zenbakizko esperimentuen emaitzak eman ditugu.

7.2. IRK-Newton estandarra.

Demagun honako hasierako baliodun problema,

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \tag{7.2}$$

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, (7.2) hasierako baliodun problemaren $y(t)$ soluzioaren $y_n \approx y(t_n)$, ($n = 1, 2, \dots$) zenbakizko soluzioa, integrazio metodo bat aplikatuz

$$y_{n+1} = \Phi(y_n, t_n, t_{n+1} - t_n), \quad (7.3)$$

lortuko dugu, 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,

$$\Phi(y, t, h) = y + h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, Y_i) , \quad (7.4)$$

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

$$Y_i = y + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_j) \quad i = 1, \dots, s. \quad (7.5)$$

$Y_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, s$ ezezagunen eta sd tamainako ekuazio-sistema ez linea- la (7.5) askatzeko, iterazio metodo bat aplikatu behar dugu. Iterazio metodo sin- pleena, puntu-finkoaren iterazioa da. Problema zurruna denean, puntu-finkoaren iterazio ez da egokia eta orduan, Newtonen iterazioa aplikatu beharra dago. Pro- blema ez-zurruna izanik ere, Newton iterazioak interesgarriak izan daitezke; be- reziki doitasun altuko (doitasun laukoitz) konputazioetan, doitasun ezberdinak nahasten [9] dituen teknikari esker (algebra lienaleko eragiketak eta Jacobiarraren balioztapena doitasun txikiagoan kalkulatza baitago).

Edozein kasutan, Newtonen iterazio bakoitzean, Jacobiarraren s balioztapen eta $sd \times sd$ sistemaren LU deskonposaketa kalkulatu behar direnez, aldaera kon- putazionalki merkeagoak aplikatzen dira.

Newton iterazioa.

Newtonen iterazioa, (7.5) ekuazio implizituko Y_i ($i = 1, \dots, s$) atalentzako $Y_i^{[k]}$ $k = 1, 2, \dots$ hurbilpenak kalkulatzeko algoritmoa, modu honetan definituko du- gu,

$$1) \quad r_i^{[k]} := -Y_i^{[k-1]} + y + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_j h, Y_j^{[k-1]}), \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.6)$$

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

$$\Delta Y_i^{[k]} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} J_j^{[k]} \Delta Y_j^{[k]} = r_i^{[k]} \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.7)$$

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

$$3) \quad Y_i^{[k]} := Y_i^{[k-1]} + \Delta Y_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.8)$$

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 inplementazioa, konputazionalki garestia da. Aukera eraginkorragoen artean, bi aipatuko ditugu:

- Newton simplifikatuaren iterazioak aplikatzea. Aukera honetan, (7.7) ekua-zioaren $J_i^{[k]}$ 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 $Y_i = y_n$, $i = 1, \dots, s$ erabil 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 sinplifikatzen zaigu,

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

- Jatorrizko Newtonen iterazioaren (7.7) ekuazio-sistema, matrize honen,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \quad (7.9)$$

alderantzizkoarekin aurre-baldintzatuta, iterazio metodo [86] baten bidez ebaaztea. Praktikan, (7.7) ekuazio-sistemaren soluzioaren hurbilpen bat lortuko dugu, eta metodo hauek, Sasi-Newton (inexact Newton) izenarekin ezagutzen dira.

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

$$(I_d \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r \quad (7.10)$$

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

Modu estandarrean [21, 75, 15], A matrizearen diagonalizazioa egiten da $\Lambda = S^{-1}AS = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ eta era honetako matrizearen,

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

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

Beste autore batzuk [19, 57], (7.9) ekuazio-sistema askatzeko, iterazio metodo baten bidez matrize alderantzizko honekin,

$$I_d \otimes I_s - h \bar{A} \otimes J, \quad (7.11)$$

non $\bar{A} \in \mathbb{R}^{s \times s}$ (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,

$$\Delta Y_i^{[k]} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} J_j^{[0]} \Delta Y_j^{[k]} = r_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.12)$$

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, $J_i^{[0]}$ Jacobia-rraren 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,

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

$$J_{is}(y) = \left(\frac{\partial f^i}{\partial y^j}(y) \right)_{i,j}^d = \begin{bmatrix} \frac{\partial f^1}{\partial y^1} & \cdots & \frac{\partial f^1}{\partial y^d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f^d}{\partial y^1} & \cdots & \frac{\partial f^d}{\partial y^d} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times d}, \quad is = 1, \dots, s.$$

Newton super-simplifikatuaren iterazioa.

Bigarren simplifikazioa 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 ordezkatuz. Era honetako ekuazio-sistema lortuko dugu,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y^{[k]} = r^{[k]}. \quad (7.13)$$

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

Nahiz eta atalen hasieraketarako, $Y_i^{[0]} = y_n$, ($i = 1, \dots, s$) ez den teknika aplikatu, askotan gertatzen da (7.12) sistema lineala, (7.13) sistemarekin ordezkatzea. Aukera egokia da [102], $J = \frac{\partial f}{\partial y}(t + \bar{c} h, \bar{y})$ aplikatzea, non $\bar{c} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s c_i$ (metodo simetrikoan $\bar{c} = \frac{1}{2}$ da) eta $\bar{y} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s Y_i^{[0]}$. Maiz, $\partial f / \partial y$ konputazio-nalki merkeagoa den hurbilketa batez ordezkatzea, nahikoa izango da.

Newton iterazio bertsio honi super-simplifikatua deitu diogu. Iterazio bakoitzean f funtziaren s ebaluazio eta sd dimentsioko ekuazio-sistema lineala askatu behar da. $(I_s \otimes I_d - h A \otimes J)$ matriza iterazio guztietarako berdina da, bere LU deskonposaketa behin bakarrik egin behar da baina konputazionalki garestia da [21, 44]. 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 (Algoritmoa 25).

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
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpensatua( $y_n, e_n, Y_n^{[k]}$ );
end

```

Algoritmoa 25: IRK (Newton super-simplifikatua).

7.3. IRK-Newton eraginkorra.

7.3.1. Ekuazio-sistema.

Atal honetan, honako ekuazio lineala modu eraginkorrean askatzeko implementazioa proposatuko,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r, \quad (7.14)$$

non $J \in \mathbb{R}^{d \times d}$ eta $r \in \mathbb{R}^{s \times d}$ emandako matrizeak izanik.

S -ataletako IRK metodoa, Newton iterazioaren bidez d -dimentsioko ekuazio differentzial 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 baliokide moduan berridatziko dugu. Ekuazio-sistema baliokide hau, $d \times d$ tamainako $[s/2]+1$ matrize errealen LU deskonposaketa bidez askatuko dugu. Tamaina

txikiko matrizeen LU deskonposaketa azkarra denez, konputazionalki eraginkorragoa izatea espero dugu.

Gauss nodoetan oinarritutako Runge-Kutta kolokazio metodoak, simplektikoa eta simetrikoak [89] dira.

1. Simplektikoa.

Runge-Kutta metodoa simplektikoa izateko baldintza,

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad 1 \leq i, j \leq s. \quad (7.15)$$

2. Simetrikoa.

Runge-Kutta metodoa simetrikoa izateko baldintza,

$$\begin{aligned} b_{s+1-i} &= b_i, \quad c_{s+1-i} = 1 - c_i, \quad 1 \leq i, j \leq s, \\ b_j &= a_{s+1-i, s+1-j} + a_{i,j}, \quad 1 \leq i, j \leq s. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Implementazio eraginkorra garatzeko, goiko bi propietate hauetan oinarrituko gara. S-ataletako IRK metodoaren formulazioa (7.4), modu baliokide honetan berridatzi daiteke,

$$\Phi(y, t, h) := y + z, \quad (7.17)$$

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

$$Y_i = y + \frac{z}{2} + h \sum_{j=1}^s \bar{a}_{ij} f(t + c_j h, Y_j) \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.18)$$

$$z = h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, Y_i), \quad (7.19)$$

non

$$\bar{a}_{ij} = a_{ij} - \frac{b_j}{2}, \quad 1 \leq i, j \leq s \text{ den.} \quad (7.20)$$

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

$$\begin{aligned} (I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) \Delta Y - \frac{1}{2} (e_s \otimes I_d) \Delta z &= r, \\ (-h e_s^T B \otimes J) \Delta Y + \Delta z &= 0, \end{aligned} \quad (7.21)$$

non $e_s = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$, eta $\bar{A} = (\bar{a}_{ij})_{i,j=1}^s$ den. Argi dago, $(\Delta Y, \Delta z)$ (7.21) ekuazio-sistemaren soluzioa bada, orduan ΔY gure jatorrizko (7.14) ekuazio-sistemaren soluzioa dela.

Ekuazio-sistemaren adierazpen matriziala lagungarria izan daiteke,

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

Aldi berean, koefiziente notazioa 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 (7.15) eta simetrikoa (7.16) berridatziko ditugu,

1. Simplektikoa.

Runge-Kutta metodoa simplektikoa da,

$$(B\bar{A}) \text{ antisimetrikoa bada,} \quad (7.22)$$

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,

$$\begin{aligned} b_{s+1-i} &= b_i, & \bar{c}_{s+1-i} &= -\bar{c}_i, & 1 \leq i \leq s, \\ \bar{a}_{s+1-i, s+1-j} &= -\bar{a}_{ij}, & 1 \leq i, j \leq s. \end{aligned} \quad (7.23)$$

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 $s = 7 \rightarrow m = 4, s-m = 3$).

7.3.2. 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. Era berean, honek \bar{A} diagonalizagarria dela eta balio propio irudikari puruak dituela, suposatzen du. Beraz, Q , $s \times s$ tamainako matrize ortogonala existitzen da,

$$Q^{-1}\bar{A}Q = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \quad (7.24)$$

non D , balio erreal positiboen matrize diagonala eta $m \times (s-m)$ tamainako den. (7.21) ekuazio-sistemari, aldagai aldaketa hau aplikatzuz,

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

honako ekuazio-sistema baliokidea lortuko dugu (garapenean (7.24) erabili dugu),

$$\begin{pmatrix} I_m \otimes I_d & -h D \otimes J \\ h D^T \otimes J & I_{s-m} \otimes I_d \end{pmatrix} W - \frac{1}{2} (Q^{-1} e_s \otimes I_d) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r, \quad (7.25)$$

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

Eranskinean (A.3.), ekuazio baliokideak lortzeko eman diren urratsen zehaztapenak eman ditugu.

Sistemaren (7.25) bloke bakanen egiturari esker, LU deskonposaketaren konputazioa, $d \times d$ tamainako matrizeen biderkaduren eta $[s/2] + 1$ matrize errealeen ($d \times d$) LU deskonposaketeten bidez kalkulatuko dugu,

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

7.3.3. IRK metodo simetriko simplektikoen garapena.

Atal honetan, (7.15) propietate simplektikoaz gain, (7.16) simetria propietate ere betetzen dituzten IRK metodoak konsideratuko ditugu. Lehenengo, garapenean erabiliko 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 honetan 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, (7.23) 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 ziurtatzen dutenez, \bar{A} matriza honako matrizearen antzekoa dela ondorioztatu daiteke,

$$P^T B^{\frac{1}{2}} \bar{A} B^{-\frac{1}{2}} P = \begin{pmatrix} 0 & K \\ -K^T & 0 \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

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 singulararen 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,

$$D = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{s-m} \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{s-m} \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.27)$$

s bikoitia bada, D matriza ezkerrean eta s bakoitia bada, D matriza esku-bian ($\sigma_m = 0$) irudikatu dugu.

4. Q matrizea.

Simetrikoak (7.24) izategatik, berdintza hauek baiezta daitezke,

$$Q = (Q_1 \ Q_2) = B^{-1/2} (P_1 \ P_2) \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} = B^{-1/2} (P_1 U \ P_2 V), \quad (7.28)$$

$$Q^{-1} = Q^T B. \quad (7.29)$$

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.

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

$$\Delta Y = (Q \otimes I_d)W = (Q_1 \otimes I_d)W' + (Q_2 \otimes I_d)W'', \quad (7.30)$$

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 (7.23) izatearen lehen baldintzagatik, $e_s^T B P_2 = 0$ eta $e_s^T B Q_2 = e_s^T B P_2 V = 0$ berdintasunak aplikatuz, honako ekuazio-sistema balio-kidea lortuko dugu,

$$\begin{aligned} W' - h(D \otimes J)W'' - \frac{1}{2}(Q_1^T B e_s \otimes I_d)\Delta z &= (Q_1^T B \otimes I_d)r, \\ h(D^T \otimes J)W' + W'' &= (Q_2^T B \otimes I_d)r, \\ -h(e_s^T B Q_1 \otimes J)W' + \Delta z &= 0. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Eranskinean (A.3.), ekuazioak lortzeko urratsen zehaztapenak eman ditugu.

Matrizearen egitura. $S = 6$ ataletako IRK metodoari dagokion ekuazio-sistemaren matrizearen egitura berezia ikus daiteke (7.32). Aldagai aldaketarekin lortutako ekuazio-sistema, blokeka diagonala da eta hau aprobetxatz, Newton iterazioaren implementazio eraginkorra lortuko dugu.

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} I_d & & & -h\sigma_1 J & & -\frac{\alpha_1}{2} I_d \\ & I_d & & -h\sigma_2 J & & -\frac{\alpha_2}{2} I_d \\ & & I_d & -h\sigma_3 J & & -\frac{\alpha_3}{2} I_d \\ \hline h\sigma_1 J & & & I_d & & 0 \\ h\sigma_2 J & & & I_d & & 0 \\ h\sigma_3 J & & & I_d & & 0 \\ \hline -h\alpha_1 J & -h\alpha_2 J & -h\alpha_3 J & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] = \begin{bmatrix} W' \\ W'' \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R' \\ R'' \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7.32)$$

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. Sistemaren (7.31) bigarren ekuaziotik W'' askatu,

$$W'' = -h(D^T \otimes J)W' + (Q_2^T B \otimes I_d)r. \quad (7.33)$$

W' kalkulatzeko ekuazioak. W'' lehen ekuazioan (7.31) ordezkatz, honako ekuazio-sistema lortuko dugu,

$$\begin{aligned} (I_m \otimes I_d + h^2 DD^T \otimes J^2) W' - \frac{1}{2}(Q_1^T B e_s \otimes I_d) \Delta z &= R, \\ -h (e_s^T B Q_1 \otimes J) W' + \Delta z &= 0, \\ \text{non } R &= (Q_1^T B \otimes I_d) r + h (DQ_2^T B \otimes J) r \in \mathbb{R}^{md}. \end{aligned} \quad (7.34)$$

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,

$$(I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2) W_i - \frac{\alpha_i}{2} \Delta z = R_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (7.35)$$

$$-h J \sum_{i=1}^m \alpha_i W_i + \Delta z = 0, \quad (7.36)$$

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 (7.27).

Δz kalkulatzeko ekuazioak. Aurreko (7.35) 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 (7.36) ekuazioan ordezkatz, $\Delta z \in \mathbb{R}^d$ askatzeko ekuazioak lortuko ditugu,

$$M \Delta z = h J \sum_{i=1}^m \alpha_i (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} R_i, \quad (7.37)$$

non

$$M = I_d + J \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 (I_d + h^2 \sigma_i^2 J^2)^{-1} \in \mathbb{R}^{d \times d}. \quad (7.38)$$

Ezezagunak askatzeko laburpena. Sistemaren ezezagunak askatzeko ekuazioak eta ordena laburtuko dugu: lehen, $\Delta z \in \mathbb{R}^d$ (7.37) ekuaziotik askatuko dugu; bigarren, $W' \in \mathbb{R}^{md}$ (7.35) ekuaziotik askatuko dugu; hirugarren, $W'' \in \mathbb{R}^{(s-m)d}$ (7.33) ekuaziotik askatuko dugu; eta azkenik, ΔY (7.30) ekuaziotik askatuko dugu.

7.4. IRK-Newton estandarra (formulazio berria).

IRK puntu-finkoaren implementazioan erabilitako birformulazio (6.atala), IRK-Newton implementazioan ere aplikatuko dugu. Horrela, IRK metodoa simplektikoa izatea ziurtatzen dugu. IRK Newtonen iterazio implementazioan ordea, L_i ($i = 1, \dots, s$) aldagai ezezagunak eta Y_i ($i = 1, \dots, s$) aldagai laguntzaileak kontsideratuko ditugu, biribiltze errorea gutxitzeko helburuarekin [82].

IRK metodoaren formulazio estandarra (7.4), era honetan berridatziko dugu,

$$\Phi(y, t, h) := y + \sum_{i=1}^s L_i, \quad (7.39)$$

non $L_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, s$ implizituki era honetan definitzen diren,

$$L_i = h b_i f(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j), \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.40)$$

eta

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

Newton simplifikatuaren iterazioa.

Formulazio berriari dagokion, Newton iterazioa definituko dugu: $k = 1, 2, \dots$ iterazioetarako, $L_i^{[k]}$ hurbilpenak era honetan kalkulatuko ditugu,

- 1) $Y_i^{[k]} := y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}, \quad i = 1, \dots, s.$
 - 2) Askatu $\Delta L_i^{[k]}$ from
- $$\Delta L_i^{[k]} - h b_i J_i^{[k]} \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.41)$$
- non $J_i^{[k]} = \frac{\partial f}{\partial y}(t + c_i h, Y_i^{[k]})$ for $i = 1, \dots, s$,
- 3) $L^{[k]} := L^{[k-1]} + \Delta L^{[k]}.$

Newton sinplifikatuaren iterazioan, $J_i^{[k]}$ Jacobiarra $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y(t + c_i h, Y_i^{[0]})$ $i = 1, \dots, s$ Jacobiaraz ordezkatzen da eta askatu beharreko ekuazio-sistema honako da,

$$\Delta L_i^{[k]} - h b_i J_i^{[0]} \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s.$$

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,

$$L^{[k]} = \begin{bmatrix} L_1^{[k]} \\ \vdots \\ L_s^{[k]} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{sd}, \quad g^{[k]} = \begin{bmatrix} g_1^{[k]} \\ \vdots \\ g_s^{[k]} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{sd},$$

$$J_{is}(y) = (\partial f^i / \partial y^j(y))_{i,j}^d = \begin{bmatrix} \frac{\partial f^1}{\partial y^1} & \dots & \frac{\partial f^1}{\partial y^d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f^d}{\partial y^1} & \dots & \frac{\partial f^d}{\partial y^d} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times d}, \quad is = 1, \dots, s.$$

Newton super-sinplifikatuaren iterazioa.

Honako bigarren sinplifikazioarekin, $J_i^{[0]} = \partial f / \partial y(t + c_i h, Y_i^{[0]})$, $i = 1, \dots, s$ matrizeak, $J_i^{[0]} \approx J$, $i = 0, \dots, s$ hurbilpena ordezkatuz, ekuazio-sistema lineal hau lortuko dugu,

$$(I_s \otimes I_d - h B A B^{-1} \otimes J) \Delta L = g. \quad (7.42)$$

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, (26) 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
     $\beta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]};$ 
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpensatua( $\tilde{y}_n, \beta_n, L_n^{[k-1]}$ );
end

```

Algoritmoa 26: IRK (Newton super-simplifikatua).

Interpolazio koefizienteak. $L_{n,i}^{[0]}$ atalen hasieraketarentzat dagokien koefizienteak era honetan definituko ditugu. IRK puntu-finkoaren implementazioan finkatu genituen (6.13) interpolazio koefizienteetatik abiatuta modu errazean definituko

ditugu formulazio honi dagozkion interpolazio koefizienteak.

$$\begin{cases} Y_{n,i}^{[0]} = y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_{n,j}^{[0]} \\ Y_{n,i}^{[0]} = y_n + \sum_{j=1}^s \nu_{ij} L_{n-1,j} \end{cases} \Rightarrow L_n^{[0]} = (Mu^{-1}Nu)L_{n-1},$$

$$\Rightarrow (Mu^{-1}Nu)_{i,j}^s = \lambda_{ij}/a_{ij}. \quad (7.43)$$

Geratze irizpidea. Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioaren-tzat definitutako geratze irizpide berdina (6.15) erabiliko dugu baina $L_{n,i}$, $i = 1, \dots, s$ aldagaiei 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 betetzen den artean,

$$\forall j \in \{1, \dots, sd\}, \quad \min \left(\{|\Delta_j^{[1]}|, \dots, |\Delta_j^{[k-1]}|\} / \{0\} \right) \leq |\Delta_j^{[k]}|. \quad (7.44)$$

Batura konpensatua. $\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1} \in \mathbb{F}^d$, 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 konpensatua.

Azkenik, batura konpensatua aplikatuko dugu,

$$(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) = S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]}) \quad (7.45)$$

Function BaturaKonpensatua ($y_n, \delta_n, L_n^{[k-1]}$)

```

 $s_0 = y_n$ 
 $ee = \delta_n$ 
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 27: BaturaKonpensatua $S_{s,d}(\tilde{y}_n, \delta_n, L_{n,1}^{[k-1]}, \dots, L_{n,s}^{[k-1]})$ funtziaren implementazioa da

7.5. IRK-Newton eraginkorra (formulazio berria).

Formulazio berrian, modu eraginkorrean askatu behar dugun ekuazio-lineala honakoa da,

$$(I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J) \Delta L = g, \quad (7.46)$$

$J \in \mathbb{R}^{d \times d}$ eta $g \in \mathbb{R}^{s \times d}$ emandako matrizeak izanik.

Ekuazio-lineala (7.46) ebazteko, aurreko (7.3.2. atala eta 7.3.3. atala) ataletan (7.14) moduko sistemak askatzeko deskribatutako teknika egokituko dugu. Jarrain, IRK metodo simetriko simplektikoetarako (7.3.3. atala) garatutako teknika, formulazio berriko (7.46) sistema ebazteko nola aplikatu daitekeen deskribatuko dugu.

Formulazio estandarretik formulazio berrirako urratsa.

Formulazio berriaren implementazio eraginkorra, formulazio estandarrean eman-dako ekuazioak (7.3.3. atala) moldatuz zehaztuko dugu. Aurreko ataleko ekuazioetan, bi formulazioen aldagaien arteko erlazioak ordezkatuz,

$$\Delta L = (B \otimes I_d) \Delta Y, \quad (7.47)$$

$$r = (B^{-1} \otimes I_d) g, \quad (7.48)$$

formulazio berrirako ekuazio baliokideak lortuko ditugu.

1. Aldagai aldaketa. Formulazio estandarraren aldagai aldaketari (7.30) goiko lehen erlazioa aplikatuz,

$$\Delta L = (BQ_1 \otimes I_d) W' + (BQ_2 \otimes I_d) W''. \quad (7.49)$$

2. $R \in \mathbb{R}^{md}$ matrizea. Formulazio estandarraren R matrizearen ekuazioan (7.34) goiko bigarren erlaziona aplikatuz,

$$\begin{aligned} R &= (Q_1^T \otimes I_d) g + h (DQ_2^T \otimes J) g, \\ R &= Q_1^T g + h DQ_2^T g J^T. \end{aligned} \quad (7.50)$$

3. $W'' \in \mathbb{R}^{(s-m)d}$ matrizea. Formulazio estandarraren W'' matrizearen ekuazioan (7.33) goiko bigarren erlaziona aplikatuz,

$$W'' = -h (D^T \otimes J) W' + (Q_2^T \otimes I_d) g. \quad (7.51)$$

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. Ekuazio-sistemaren (7.46) 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 sinifikatuaren implementazioa, [28](#) 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
     $\delta_n = e_n + \sum_{j=1}^s \Delta L_{n,j}^{[k]};$ 
     $(\tilde{y}_{n+1}, e_{n+1}) \leftarrow$  baturakonpensatua( $\tilde{y}_n, \delta_n, L_n^{[k-1]}$ );
end

```

Algoritmoa 28: IRK (NSS-Eraginkorra).

7.6. IRK Newtonen iterazio Mixtoa.

7.6.1. Sasi-Newton iterazioa.

Hurrengo 7.6.2. ataleko IRK metodoaren implementazio berrirako, Newton iterazio metodoaren (7.41) aldaera bat konsideratuko dugu. Newtonen iterazio bakoitzen ekuazio-sistema hau,

$$\Delta L_i^{[k]} - h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.52)$$

non

$$g_i^{[k]} = -L_i^{[k-1]} + h b_i f\left(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]}\right), \quad i = 1, \dots, s, \quad (7.53)$$

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 ordez, modu iteratiboan askatuko dugu. Barne iterazioa (29 algoritmoa) aplikatuz, $\Delta L^{[k]} \in \mathbb{R}^{sd}$ soluzioaren $\Delta L_i^{[k,0]}, \Delta L_i^{[k,1]}, \Delta L_i^{[k,2]}, \dots$ hurbilpe-nak 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
     $l = l + 1;$ 
     $G_i^{[k,l]} = g_i^{[k]} - \Delta L_i^{[k,l-1]} + h b_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j^{[k,l-1]}, \quad i = 1, \dots, s;$ 
     $\Delta L^{[k,l]} = \Delta L^{[k,l-1]} + (I_s \otimes I_d - h BAB^{-1} \otimes J)^{-1} G^{[k,l]};$ 
end
```

Algoritmoa 29: Barne iterazioa.

non $fl_{32}(x)$, $x \in \mathbb{R}$ zenbakiaren gertuen dagoen IEEE doitasun arrunteko (32-bit) balioa adierazten duen.

IRK implementazio berri honen (30 algoritmoa) (7.52) ekuazio-sistema linea-laren J_i Jacobiar matrizeen ebaluazioak, doitasun arrunta duten Y_i atalekin kalkulatuko ditugu. Beraz, (29 algoritmoa) barne iterazioen geratze irizpidea, $fl_{32}(\Delta L^{[k,l]}) = fl_{32}(\Delta L^{[k,l-1]})$ doitasun arruntean betetzen dela aztertzea nahikoa izango dugu.

7.6.2. IRK-Newton Mixtoa

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 ((7.41) iterazioaren ekuazio-sistema, (7.42) 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, (7.52) ekuazio-sistema linealaren $\Delta L^{[k]}$ soluzio zehatzaren $\Delta L^{[k,0]}$ hurbilpena konsideratu eta barne iterazioak (29 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 (7.52)-(7.53), $\Delta L^{[k]}$ soluzioaren $\Delta L^{[k,\ell]}$ hurbilpenak (berriz ere doitasun arruntean) 29 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 konpensatua (11 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 konpensatua.

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

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 ([28 algoritmoa](#)) askatuko ditugu.
- $\mu_{ij} \in \mathbb{F}$ koefizienteek, zehazki [\(6.8\)](#) propietate simplektikoa eta simetria propietatea $\mu_{j,i} = \mu_{s+1-i,s+1-j}$ betetzen dituzte.
- $g_i^{[k]} (i = 1, \dots, s)$ hondarren [\(7.53\)](#) konputaziorako, $y \in \mathbb{R}^d$ balioaren ordez, $\tilde{y} + e$ ($\tilde{y}, e \in \mathbb{F}^d$) espresioa erabili beharko litzateke. Hori horrela egingo balitz, eragina oso txikia izango litzateke, eta azken Sasi-Newton iterazioan (4.fasea) bakarrik kontutan hartza erabaki dugu. Gainera, azken Sasi-Newton iterazioan $\tilde{y} + e$ zuzenean balioa erabili ordez, J_i Jacobiarra erabili dugu honako hurbilpenarekin,

$$h b_i f \left(t + c_i h, \tilde{y} + e + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]} \right) - L_i^{[k-1]} \approx \\ \left(h b_i f_i^{[k]} - L_i^{[k-1]} \right) + h b_i J_i e,$$

non $f_i^{[k]} = f \left(t + c_i h, \tilde{y} + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k-1]} \right)$.

Jarraian, implementazioaren implementazioaren [30](#) algoritmoa 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 *****/;

 $\delta = e + \sum_{i=1}^s \Delta L_i^{[k,\ell]};$ 
 $(\tilde{y}^*, e^*) = S_{s,d}(\tilde{y}, \delta, L_1^{[k-1]}, \dots, L_s^{[k-1]});$ 

```

Algoritmoa 30: IRK implementazio Mixtoa

7.7. 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.

7.7.1. Problemak

Pendulu bikiotz zurruna

Pendulu bikoitz zurrunaren problemaren Hamiltondarra eta parametroak, [3.2.2](#). atalean definitu dugu. 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, [28] artikulutik izaera ez-kaotikoa duen hasierako balioa hartu dugu: $q(0) = (1.1, -1.1)$ and $p(0) = (2.7746, 2.7746)$. $k \neq 0$ 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, non sistemaren energia $k \rightarrow \infty$ handitzen den heinean, bornatua dagoen.

Integrazio guztiak, $h = 2^{-7}$ urrats luzera erabiliz egin ditugu; problema ez zurrunarentzat ($k = 0$) trunkatze errorea biribiltze errore 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.

7.7.2. 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 hiru k balioetarako, energi 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 birbiltze erroreari nagusitzen zaion. Biribiltze errorearen konparaketa sendoago izan dadin ([47] lanean bezala), azterketa estatistikoa egin dugu. Problema bakoitzarentzat, hasierako balioak $\mathcal{O}(10^{-6})$ errore tamainako ausaz perturbatutako $P = 1000$ integracio konputatu ditugu.

7.1. irudien zenbakizko integrazioek, gure implementazio berriaren birbiltze errorearen propagazio ona erakusten dute. Alde batetik, $k = 0$ eta $k = 2^{10}$ balioetarako, puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako implementazioak energia batez-bestekoan, 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 proporcionalak dira.

7.7.3. Puntu-finkoa versus Newton iterazioa

7.1. taulan, k parametroaren lau balioetarako, bi implementazioen eraginkortasunaren adierazle nagusienak laburtu ditugu.

7.1. Taula

C	0	2^3	2^6	2^8
E_0	-14.39	-5.75	-5.64	-5.64

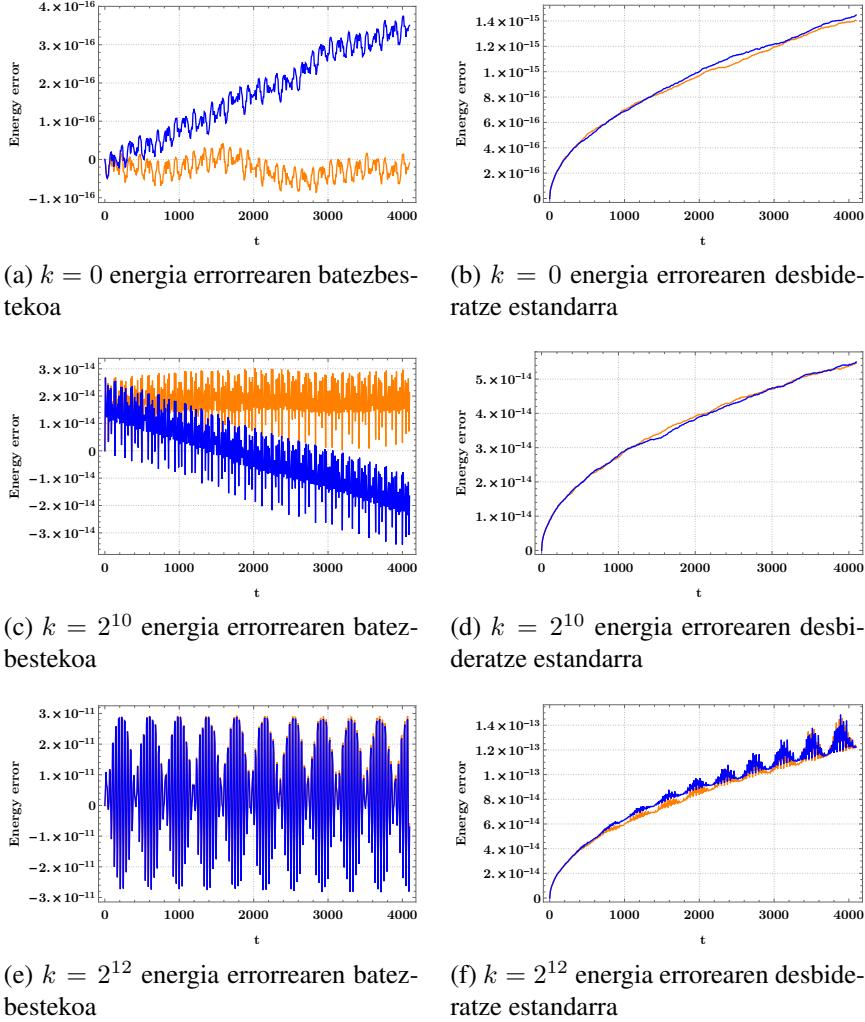
Fixed-points it.

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 cputenborak konparatu ditugu. Hortaz gain, bi implementazioen urratseko iterazio



7.1. Irudia: Energia errore batezbestekoaren (ezkerrean) eta desbideratze estandarraren eboluzioa (eskubian), 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)

batezbestekoak (It. per step) alderatu ditugu eta Newton implementazioan, urratseko sistema linealen ebazpen batezbestekoa (L.solves per step) eman dugu. Zenbakizko soluzioaren doitasuna neurtzeko, energia errore erlatibo 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 implementa-

zioa baino eraginkorragoa da. Baino, pendulu bikoitzaren zurruntasun maila handitzen dugunean, puntu-finkoaren iterazio kopurua gero eta handiagoa den bitartean, Newton implementazioaren iterazio kopurua zerbait txikiagoa da k balio handienetarako. Beraz, zurruntasuna handitzen dugunean, Newton implementazioa gero eta eraginkorragoa bilakatzen da. $k = 2^{18}$ baliotik aurrera, puntu-finkoak ez du konbergitzen eta Newton implementazioak, iterazio kopuru antzekoarekin konbergitzen du.

7.8. Laburpena.

IRK metodoen Newton simplifikatuaren iterazioen ekuazio-sistema, modu eraginkorrean askatzeko implementazioa proposatu dugu. Newtonen iterazioan oinarrtitako IRK metodoaren implementazio berria aurkeztu dugu eta implementazio honen biribiltze errorearen hedapena egokia dela baiezttatu dugu. Problema zurrutetarako, Newton simplifikatuaren iterazioa, puntu-finkoaren iterazioa baino eraginkorragoa dela ikusi dugu.

Newtonen iterazioan oinarrtitako IRK metodoen implementazioen inguruko lan hauek aipatuko ditugu: "On the implementation of implicit Runge-Kutta methods", J.C. Butcher [21], "Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations", E.Hairer et al [46].

Azkenik, aipatu nahi dugu, atal honen edukiak [Numerical Algorithms](#) aldizkarian publikatutako [6] artikuluan aurki daitezkeela eta implementazioaren [kodea](#) eskuragarri jarri dugula.

8. Kapitulua

IRK: Eguzki-sistema.

8.1. Sarrera.

Koordenatu kartesiarrak erabiltzearen abantaila.

8.2. Eguzki-sistemaren integrazorako metodoak (review).

Tesiaren sarreran azaldu genuenez, gure helburua eguzki-sistemaren epe luzeko eta doitasun handiko implementazio eraginkorra proposatzea da. Atal honetako ekarpena azaldu aurretik, egungo eguzki-sistemaren simulazioen errepasoa aztertzea interesgarria dela iruditzen zaigu. Bi eratako simulazioak aztertuko ditugu: efemerideak, eguzki-sistemaren eredu konplexuak integratzen dituzte eta integracio tarte "motzak"dira; Laskar-ek eta bere taldeak, paleoklimatologi ikerketentzako egindako simulazio luzeak.

8.2.1. Efemerideak.

Konputagailuen aurreko garaian, efemerideak teoria analitikoetan oinarritutako serie funtzioen bidez kalkulatzen ziren. Soluzio hauetan, Fourier-en serie trigonométriko luzeen ebaluazioa egin behar zen. 1960 hamarkadan, eguzki-sistemaren ezagutza hobetu zenean (espazio bidaiaik eta behatoki astronomikoen aurrerapenak medio), serie oso luzeak kalkulatu behar zituzten, eta zenbakizko integrazioen bidezko soluzioak eraginkorragoak bilakatu ziren [61].

Eguzki-sistemaren gorpuzten efemeride modernoak, mugimenduaren ekuazio diferentzialen zenbakizko integrazioaren bidez kalkulatzen dira. Integrazioaren

hasierako balioak eta ereduaren parametroak, sateliteen bidez jasotako datuei egokitzen zaizkie.

Efemerideak, *Chebyshev* polinomio moduan adierazten dira. Integrazio tarreak, 2.000. urte inguruko ehunka urtekoak izaten dira. Zenbakizko integrazio hauetan, biribiltze errorea gai garrantzitsua da. 128-biteko aritmetika erabiltzeko aukera oso garestia delako bere erabilera baztertzen da eta 64-bit doitasuneko aritmetika hobetzeko teknika konputazionalki 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 gravitacionalak kontutan hartzen dituzte. Mugimenduaren ekuazio diferentzialak hauek dira [33],

$$\ddot{x}_{\text{Planet}} = \sum_{A \neq B} \mu_B \frac{r_{AB}}{\|r_{AB}\|^3} + \ddot{x}_{GR}(\beta, \gamma, c^{-4}) + \ddot{x}_{AST,300} + \ddot{x}_{J_2}.$$

- 8 planetak, ilargia, Pluton eta 300 asteroide.
- GR: erlatibilitatea (Einstein-Imfeld-Hoffmann, c^{-4} PPN hurbilketa).
- J_2 : eguzkia esferikoa ez izatearen eragina.
- Urrats luzera, $h = 0.055$ egunekoa da.

Erlatibilitatea efektua.

Eguzkiaren erlatibilitatea kontutan hartzen duten ekuazio diferentzialak azalduko ditugu.

$$\dot{q}_i = v_i, \quad i = 0, 1, \dots, N \tag{8.1}$$

$$\begin{aligned}
\dot{v}_i = & \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{Gm_j}{\|q_j - q_i\|^3} (q_j - q_i) \left(1 - \frac{2(\beta + \gamma)}{c^2} \sum_{k=0, k \neq i}^N \frac{Gm_k}{\|q_k - q_i\|} - \frac{2\beta - 1}{c^2} \sum_{k=0, k \neq j}^N \frac{Gm_k}{\|q_k - q_j\|} \right. \\
& + \gamma \left(\frac{v_i}{c} \right)^2 + (1 + \gamma) \left(\frac{v_j}{c} \right)^2 - \frac{2(1 + \gamma)}{c^2} v_i v_j \\
& \left. - \frac{3}{2c^2} \left(\frac{(q_i - q_j)v_j}{\|q_j - q_i\|} \right)^2 + \frac{1}{2c^2} (q_j - q_i) \dot{v}_i \right) \\
& + \frac{1}{c^2} \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{Gm_j}{\|q_j - q_i\|^3} ((q_i - q_l)((2 + 2\gamma)v_i - (1 + 2\gamma)v_j))(v_i - v_j) \\
& + \frac{3 + 4\gamma}{2c^2} \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{Gm_j \dot{v}_j}{\|q_j - q_i\|} \quad (8.2)
\end{aligned}$$

8.1. Taula: Konstanteak

c	299792.458 km/s	Argiaren abiadura
au	149597870.700 km	Unitate Astronomikoa
β	1.0	PPN parametroa
γ	1.0	PPN parametroa

Asteriodeak.

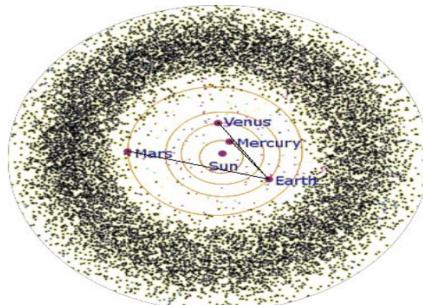
Astroideek, bereziki Marte planetaren mugimenduarengan eragina dute (8.1. irudia) eta kontutan hartzekoak, barne planeten mugimenduaren doitasun handiko emaitzak behar ditugunean. Bost asteroide nagusiren masak (Ceres, Pallas, Vesta, Iris eta Bamberga) Merkurio eta Pluton planeten mailakoak direnez, integrazioetan gehitzen dira. Beste asteroide txikien talde handia, estimazioen bidez simula-tzen dira.

Hiru efemerideak.

Gaur-egun, eguzki-sistemaren planeten hiru efemeride kalkulatzen dira.

1. Jet Propulsion Laboratory (*EEBB*) NASA-ko erakundeak DE (Development Ephemerides) izeneko efemerideak.

1984.urtean kalkulatu zen lehen efemeridea (DE-200) eta 2.014.urteko da *DE-430* [35] publikatutako azken efemeridea. Kalkulatutako integrazio tar-tea, (1550 – 2650) izan da.



8.1. Irudia: Asteroideak.

Zenbakizko integrazio metodoa: urrats luzera eta ordena aldakorreko *Multistep Adams* metodoa, [65] DIVA/QIVA. QIVA doitasun laukoitzeko (128-bit) bertsioari deitzen zaio: mugimenduaren ekuazioen Newton zatia, doitasun laukoitzean kalkulatzen da eta ekuazioaren gainontzko zatia, doitasun bikoitzean.

2. Institut de Méchanique Céleste et de Calcul des Ephémérides (IMCCE, Paris Observatory) INPOP (Intégrateur Numerique Planétaire de l'Observatoire de Paris) izeneko efemerideak.
2.000.arte, teori analitikoetan oinarritutako efemerideak garatu zituzten. 2.003.urtean kalkulatu zuten lehen zenbakizko integrazio bidezko efemeridea eta INPOP13c (2.014) [34] publikatutako azkena da.

Zenbakizko integrazio metodoa: 12 ordeneko *Adams-Cowell* metodoa da eta urrats finkoa aplikatzen du.

Doitasuna: C lengoian implementatuta dago eta *Intel* makinetako 80-biteko doitasuna erabiltzen du. Era berean, modu merkean doitasun handitzeko, doitasun laukoitza simulatzu urrats zuzentzaile (corrector step) bat aplikatzen zaio [34].

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 EPM2.013 (2.014) [85] publikatutako azken efemeridea da.
- Zenbakizko integrazio metodoa. *Everhart* izeneko IRK metodoa (Gauss-Radau) da. 23 ordeneko metodoa eta urrats luzera finkoa aplikatzen du.
- Doitasuna. Implementazioak (software package ERA), *Intel* makinetako 80-biteko doitasuna erabiltzen du.

(8.2.) taulan, planeten efemerideen doitasunaren eboluzioa ikus daiteke. Hiru efemerideak antzeko doitasuna azaltzen dutela gehitu beharra dago.

	Le Verrier		DE200		DE421, INPOP08, EPM2008		DE430, INPOP15a, EPM2014	
	<i>c. 1900</i>		<i>1980</i>		<i>2008</i>		<i>2014–2015</i>	
	angle "	distance km	angle "	distance km	angle "	distance km	angle "	distance km
Mercury	1	450	0.020	5	0.0030	0.40	0.0002	0.020
Venus	0.5	100	0.020	2	0.0004	0.02	0.0002	0.004
Earth			0.010	1	0.0004	0.01	0.0002	0.002
Mars	0.5	150	0.010	3	0.0004	0.01	0.0002	0.002
Jupiter	0.5	1400	0.1	50	0.0050	2.	0.0040	1.5
Saturn	0.5	3000	0.2	350	0.0010	0.2	0.0002	0.2
Uranus	1	12700	0.4	5000	0.0100	100.	0.0050	50.
Neptune	1	22000	1.0	8000	0.0100	300.	0.0050	200.
Pluto			2.5	80000	0.0200	1200.	0.0200	500.

8.2. Irudia: Efemerideen doitasunaren eboluzioa.

8.2.2. Eguzki-sistemaren integrazio luzeak.

A.Morbidellik [79] eguzki-sistemaren zenbakizko integrazioen algoritmoen garapenaren azterketan, garai hauek bereizten ditu:

1. Garai klasikoa.

90. hamarkada hasiera arte, urrats luzera aldakorreko integratzaileak erabilten dira: Runge-Kutta (Dormand et al. 1987), Bulirsch and Stoer (1966), Radau (Everharht, 1985), eta Störmer (1990). Garai honetan integrazio tarreak, $10^4 – 10^6$ urte artekoak dira.

2. Garai simplektikoa.

Wisdom eta Holman-en [95, 1991] lanarekin, eguzki-sistemaren azterketa-rako integratzaile simplektikoen erabilera zabaldu zen. Garai honetan, ($10^8 – 10^9$) urte arteko eguzki-sistemaren integrazioak egin ziren.

3. Garai estatistikoa.

Planeten eta gorputz txikien (asteroide, meteoritoak) arteko kolisio gertuko egoerak kalkulatzen dituzten algoritmoak garatu ziren. Implementazio berri hauetan, milaka gorputzen integrazio azkarra egin daiteke. Horrela, asteroide eta meteoritoen orbiten distribuzio azterketa estatistikoak egin ziren.

4. Planeten sorrera garaiko azterketak.

Eguzki-sistemaren sorrerari buruzko simulazioak nagusituko dira; masa handiko gorputzen arteko kolisio gertuko egoerak gertatzen diren integrazioak dira.

Eguzki-sistemaren integrazioetarako nagusiki, bi integratzaile famili aplikatzentz da:

1. Integratzaile simetrikoak.

Metodo simetrikoen artean nagusienan, 4 ordeneko *Hermite* [3] integratzailea da. Urrats luzera tamaina aldakorreko integratzailea da, modu errazean implementatu daiteke. Hermite integratzailea konputazionalki garestia da eta bereziki, gorputz kopuru handia dituzten eta kolisio gertuko egoerak maiz gertatzen diren problemetan (eguzki-sistemaren sorrera, ...) aplikatzentz da.

2. Simplektikoak.

Gaur-egun, eguzki-sistemaren epe luzeko integrazioetarako, integratzaile simplektikoak nagusitu dira.

Eguzki-sistemaren integrazio luzeei buruzko beste errebizio dokumentu interesarri hauek aholkatu nahiko genitzek: [62] (Kholshevnikov 2007, 2.007), [20] (Brumberg, 2.013) eta [56] (Ito eta Tanikawa, 2.007).

Eguzki-sistemari egokitutako integratzaile simplektikoak.

Wisdom-ek eta Holman-ek [95, 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. N-gorputzen problemaren Hamiltondarra, Jacobi koordenatuak aplikatuz, bi zatitan banatu zuten,

$$H(q, p) = H_K(p) + H_I(q) \quad , \quad H_K \gg H_I,$$

non H_K , Hamiltondar Kepleriarra (planeten eguzkiarekiko mugimendu kleperiarra) eta H_I , interakzioen Hamiltondarra (planeten arteko grabitazio interakzioak) diren. Integrazioaren urrats bakotzean, Hamiltondar bakotzaren soluzioa tartekatuz, problema osoaren ebazpena kalkulatzen da.

WH integratzailea, ondorengo metodoen aurrekaria kontsideratu bada ere, bere aplikagarritasuna 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 gorputzen arteko kolisio

gertuko egoerak dituzten problemak, modu eraginkorrean integratzeko eragozpen bat da. Arazo hauek gainditzeko, urteetan zehar algoritmo honen aldaerak proposatu dira eta jarraian, nagusienak aipatuko ditugu.

Levinson eta Duncan-ek [74, 1994], *WH* implementazioa, integratzaile ez sinplektiko batekin konbinatu zuten kolisio egoeren kalkulua hobetzeko. *SWIFT* paketean, *RMVS3* izeneko integratzailea implementatu zuten. Duncan, Levinson eta Lee-k [29, 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, urratsa luzera txikituz aurre egin zioten. Implementazio honek, *SYMBA* izena du. Chambers-ek [24] koordenatu Heliozentrikoeitan oinarritu zen eta kolisia egoerak gertatzen diren uneetan, beste integratzaile (Bulirsch-Stoer metodoa) batekin konbinatuz integratzen du. Implementazio honek, *MERCURY* izena du. Levinson eta Duncan-ek (2000), aurreko implementazioaren arazo batzuk konponduz, *Modified SYMBA* izeneko garapen berria burutu zuten. Kvaerno eta Leimkuhler [66] eta beste autore batzuk ere, antzeko ideiak landu dituzte.

Wisdom eta Holmanek proposatutko Hamiltondarraren banaketa, *Leapfrog* metodoaren bidez integratzen da eta beraz, 2 ordeneko da. Orden altuagoko ($p > 2$) metodoak definitzeko, koefiziente negatiboak erabili behar dira [103, 72] eta ez dira interesgarriak, *Leapfrog* metodoa hauek baino eraginkorragoa baita.

Adibidea. Yoshidaren $p = 4$ ordenako metodoa. ϕ_h oinarrizko metodoa *Leapfrog* izanik, metodoaren konposaketari dagokion 4 ordeneko konposizio metodoa, era honetan definitzen da,

$$\Psi_h = \phi_{\gamma_1 h} \circ \phi_{\gamma_0 h} \circ \phi_{\gamma_1 h},$$

non $\gamma_0 = -2^{1/3}/(2 - 2^{1/3})$ eta $\gamma_1 = 1/(2 - 2^{1/3})$.

Beranduago, McLachlan-ek [77, 1995], Laskar-ek eta Robutel-ek [72, 2001] koefiziente negatiboen arazoa gainditu zuten eta ordena altuko Splitting eskemak aurkitu zituzten. Berriki, Blanes et al [16, 2012] ordena altuko Splitting eskema berriak eta eraginkorrapak aurkitu ditu.

Azken aldian, Hernandez eta Bertschinger-ek [49, 2015] N-gorputzen problema grabitacional eta kolisioidunetarako 2 ordeneko integratzaile sinplektiko berri bat proposatu dute. Hernandez eta Bertschinger-ek [49] koordenatu kartesiarretan oinarrituz, N-gorputzen problema 2-gorputzen problemetan banatzen dute eta

honako Hamiltondarraren banaketa proposatzen dute,

$$\begin{aligned} H &= T + V, \\ H &= T + \sum_i \sum_{i>j} V_{ij}, \\ H &= T + \sum_i \sum_{i>j} (K_{ij} - T_{ij}) \end{aligned} \tag{8.3}$$

8.3. Implementazio berria.

Eguzki sistemarako honako idei berri bat azalduko dugu. Honako ekuazio diferentziala dugularik,

$$\dot{y} = k(y) + \epsilon g(y)$$

Alde kepleriarraren fluxua ezaguna dugu,

$$\begin{aligned} \varphi_{\Delta t}^k : \mathbb{R}^d &\longrightarrow \mathbb{R}^d \\ y_0 &\longrightarrow y_1. \end{aligned}$$

Aldagai aldaketa bat egin daiteke,

$$\begin{aligned} y(t_0 + \Delta t) &= \varphi_{\Delta t}^k(z(t_0 + \Delta t)), \quad y(t_0) = z(t_0), \\ z(t_0 + \Delta t) &= \varphi_{-\Delta t}^k(y(t_0 + \Delta t)). \end{aligned}$$

Aldagai berriarekiko ekuazio diferentziala mantso aldatzen den funtzioa da,

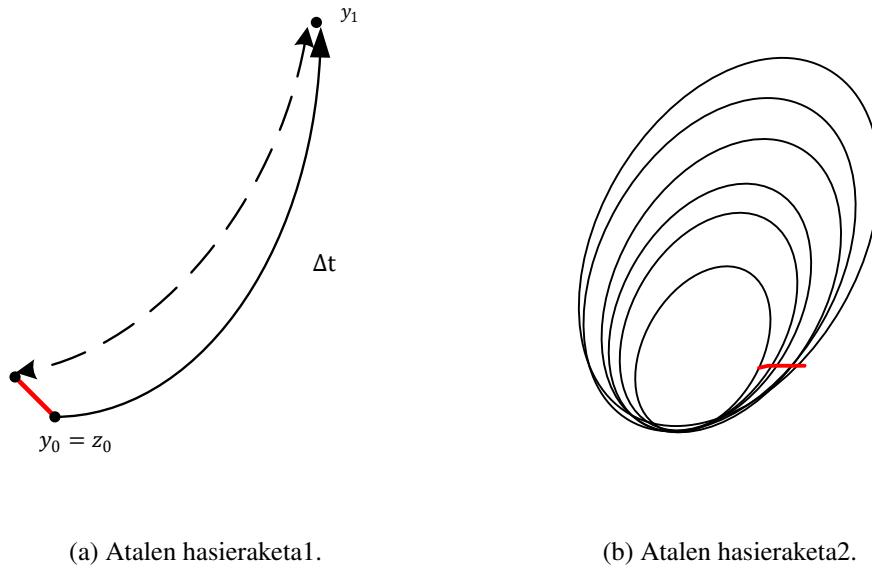
$$\dot{z} = \epsilon r(z, t).$$

Idea hau bi modutara aplika daiteke,

1. Gauss implizituaren integracio metodoan.
2. Atalen hasieraketa ona lortzeko. Orokorrean, interpolazio bidezko hasieraketa ona izateko, urratsa txikia izan behar du (periodo bat baino txikiagoa izan behar du). Teknika hau erabiliz, interpolazioaren errorea $\mathcal{O}(\epsilon)$ mailakoa izango da.

Proposamen honetan hasieraketa z aldagai berria erabiliz era honetan egingo dugu:

- Y_{n-1} atalei kepler **denboran atzeratuz**, Z_{n-1} aldagai berriarekiko atalak lortuko ditugu.
- Z_{n-1} alatak interpolatz, $Z_n^{[0]}$ hasieraketak lortuko ditugu.
- $Z_n^{[0]}$ atalei kepler **denboran aurreratuz**, $Y_n^{[0]}$ hasieraketak lortuko ditugu.

**8.3. Irudia:** (a) irudian, (b)

8.4. Denbora birparametrizazioa.

Sarrera.

Uurrats luzera finkoa, ez da kolisio gertuko egoerak dituzten sistema dinamikoak edo denbora maila oso ezberdinak dituzten problemak integratzeko eraginkorra. Erregularizazio da arazo honen aurrean teknika arrakastatsuena. Erregularizazioaren bidez, gorputzen arteko distantzia zerorantz hurbildu arren, mugimenduaren ekuazioak ez singularrak mantentzen dira.

Demagun jatorrizko ekuazio differentziala,

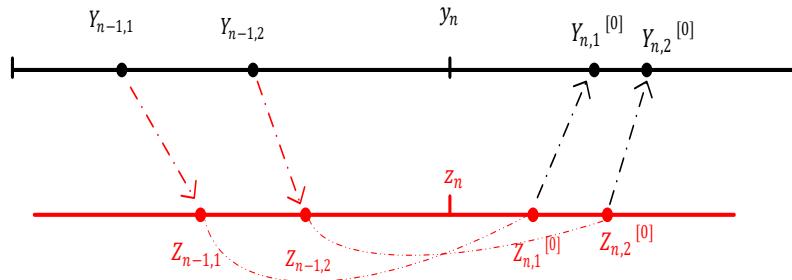
$$\dot{y} = f(y(t)),$$

non y menpeko aldagai eta t aldagai askea den.

Aldagai askeari aldaketa bat aplikatuz ($s()$ izeneko funtzio), ekuazio differentziala leuntzea lortuko dugu.

$$y = z,$$

$$\frac{dt}{d\tau} = s(z)$$



8.4. Irudia: Atalen hasieraketa3.

Honako garapena egingo dugu aldagai berriarekiko (τ) ekuazioak lortzeko.

$$y = z \Rightarrow \frac{dy}{dt} = \frac{dz}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} \Rightarrow \frac{dz}{d\tau} = s(z) f(y(t))$$

Sistema berrian, mugimendua $z(\tau)$ funtziok deskribatzen du: z aldagai berria τ aldagai askearen menpeko da.

8.4.1. Adibidea.

Esperimentu honetan, IRK metodoan denbora birparametrizazioa modu errezean aplika daitekeela erakutsi nahi dugu. N9-Body probleman, merkurio ezentriziitate handiena duen planeta da: merkurio araberako denbora birparametrizazioa planteatuko dugu.

$$s(q) = r_{10}^{3/2} \quad (8.4)$$

$$r_{10} = \|q_1 - q_0\|_2 \quad (8.5)$$

non $q_1 = (q_{1x}, q_{1y}, q_{1z})$ merkurio plantearen kokapena eta $q_0 = (q_{0x}, q_{0y}, q_{0z})$ eguzkiaren kokapena den.

8.5. Laburpena.

**III. Atala
Ondorioak.**

9. Kapitulua

Eztabaida.

9.1. Koordenatu sistemak.

9.2. Hamiltondar banagarriak.

9.3. IRK Newton.

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

Implementazio estandarra.

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

1. 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.

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

2. Zenbaki errealkak.

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

$$\gamma_j = \alpha_j + i \beta_j,$$

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \alpha_1 & -\beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2 & -\beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 & \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha_3 & -\beta_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_3 \end{bmatrix}$$

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} matrizearen, $\bar{A} = P^{-1}DP$ 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,

$$\text{LU deskonposaketa : } 2s^3d^3/3 + \mathcal{O}(d^2),$$

$$\text{Back substitution : } 2s^2d^2 + \mathcal{O}(d),$$

$$\text{inv : } 2s^3d^3$$

Bi implementazioen konplexutasunen laburpena,

9.1. Taula:

s	LU		Back Substitution	
	Estandarra	Berria	Estandarra	Berria
$2m$	$\frac{8m}{3}d^3$	$\frac{2}{3}(2m+1)d^3$	$4m(2d^2)$	$(6m+4)d^2$
$2m+1$	$\left(\frac{8m}{3} + \frac{2}{3}\right)d^3$	$\left(\frac{4m}{3} + \frac{2}{3}\right)d^3$	$(8m+2)d^2$	$(6m+4)d^2$

10. Kapitulua

Konklusioak.

10.1. Sarrera.

New Worlds, New Horizons in Astronomy and Astrophysics. ISBN 978-0-309-15802-2 | DOI 10.17226/12951 /.../PIC/dokumentazioa/bibliografia/nap/3-New Words, New Horizons-2016

Discovery Through the Power of Mathematics, Physics, and the Imagination

Discovery Through the Power of Mathematics, Physics, and the Imagination
Finally, it is important to remember that many of the most far-reaching and revolutionary discoveries in astronomy were not solely the direct result of observations with telescopes or numerical simulations with computers. Rather, they also sprang from the imagination of inspired theorists thinking in deep and original ways about how to understand the data, and making testable predictions about new ideas. Examples range from the prediction that the chemical elements heavier than hydrogen and helium must have been created inside nuclear furnaces in the cores of stars, to the idea that the infant universe underwent a period of extremely rapid expansion called inflation, to the prediction of exotic objects like black holes, neutron stars, and white dwarfs, and the prediction that planets are a typical by- product of normal star formation. In the coming decade, major challenges loom that require the development of fundamental new theories. Observations and computer simulations are necessary components, but to complete the path from discovery to understanding, theorists will need to freely exercise their imaginations.

10.2. Laburpena.

IV. Atala

Eranskinak

A. Eranskina

Ekuazioen garapenak.

A.1. Kepler hasierako baliodun problema.

Keplerren ekuazioa, kokapen eta abiadura berriak kalkulatzeko oinarrizkoa 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 transentalala 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 ordezkatzuz,

$$\begin{aligned}\cos(A + B) &= \cos(A)\cos(B) - \sin(A)\sin(B), \\ \sin(A + B) &= \sin(A)\cos(B) + \cos(A)\sin(B),\end{aligned}$$

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 kartesiarren kalkulua ekuazio hauen bidez egindo 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,

$$\begin{aligned} C &= \cos(\Delta E), \quad S = \sin(\Delta E), \\ ce &= e \cos(E_0) = \|q\| \|v\|^2 - 1, \\ se &= e \sin(E_0) = \frac{(q \cdot v)}{\sqrt{\mu a}}, \\ a &= \frac{\mu \|q\|}{2\mu - \|q\| \|v\|^2}, \\ n &= \frac{\mu^{\frac{1}{2}}}{a^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned}$$

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,

$$b_{11} = (C - 1) \frac{a}{\|q\|}, \rightarrow b_{11} = -\frac{\sin^2(\Delta E)}{1 + \cos(\Delta E)} \frac{a}{\|q\|}$$

A.2. Koordenatu sistemak.

Lehenik koordenatu barizentrikoei $q_i, p_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 0, \dots, N$ dagokien Hamilton-darra gogoratuko dugu,

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

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

$$\begin{aligned} H_K &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|P_i\|^2}{2\mu_i} - \frac{Gm_0m_i}{\|Q_i\|} \right), \quad \mu_i = \frac{m_0m_i}{(m_0 + m_i)}, \\ T_1 &= \frac{1}{m_0} \left(\sum_{0 < i < j \leq N} P_i P_j \right), \\ U_1 &= - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}. \end{aligned}$$

Ekuazio differentzialak.

Hamiltondar bakoitza independientekei konsideratuta dagokio ekuazio differentzialak lortzen ditugu:

1. H_K .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \nabla_p H_k \Rightarrow \dot{Q}_i = P_i \left(\frac{m_0 + m_i}{m_0 m_i} \right), \\ \dot{P}_i &= -\nabla_q H_k \Rightarrow \dot{P}_i = -\frac{G m_0 m_i}{\|Q_i\|^3} Q_i, \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

2. T_1 .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \nabla_p T_1 \Rightarrow \dot{Q}_i = \sum_{j \neq i, j=1}^N \frac{P_j}{m_0}, \\ \dot{P}_i &= -\nabla_q T_1 \Rightarrow \dot{P}_i = 0, \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

3. U_1 .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \nabla_p U_1 \Rightarrow \dot{Q}_i = 0, \\ \dot{P}_i &= -\nabla_q U_1 \Rightarrow \dot{P}_i = \sum_{j \neq i, j=1}^N \left(\frac{-G m_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|^3} (Q_i - Q_j) \right), \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

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,

$$1. \ q_i, \ i = 0, \dots, N.$$

$$\begin{aligned} q_0 &= -\sum_{i=1}^M \frac{m_i Q_i}{M}, \quad M = \sum_{i=0}^N m_i, \\ q_i &= q_0 + Q_i, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

$$2. \ v_i, \ i = 0, \dots, N.$$

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{m_0}{m_0 + m_i} V_i, \quad i = 1, \dots, N \\ P_0 = \sum_{i=0}^N p_i &= \sum_{i=0}^N m_i v_i = 0 \Rightarrow m_0 v_0 + \sum_{i=1}^N m_i v_i = 0 \Rightarrow v_0 = -\frac{1}{m_0} \sum_{i=1}^N m_i v_i. \end{aligned}$$

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,

$$\begin{aligned} Q_0 &= (m_0 q_0 + \dots + m_n q_n) / \eta_N, \quad Q_i = q_i - \left(\sum_{j=0}^{i-1} m_j q_j \right) / \eta_{i-1} \\ P_0 &= \sum_{i=0}^N p_i, \quad P_i = \left(\eta_{i-1} p_i - m_i \sum_{j=0}^{i-1} p_j \right) / \eta_i, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

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

$$H_K = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|P_i\|^2}{2m'_i} - \frac{\mu'_i}{\|Q_i\|} \right),$$

$$H_I = \left(\frac{\mu'_i}{Q_i} - \frac{Gm_0m_i}{q_i} \right) - \sum_{0 < i < j \leq N} \frac{Gm_i m_j}{\|Q_i - Q_j\|}.$$

A.3. Newton eraginkorraren garapena.

Formulazio estandarrean honako ekuazio sistema askatzeko metodoa proposatzen da,

$$(I_s \otimes I_d - h A \otimes J) \Delta Y = r. \quad (\text{A.2})$$

Lehenengo modu orokorrean eta ondoren, metodoa simetrikoa dela kontutan harturik garapenaren zehaztasunak emango ditugu.

Kasu orokorra

Honako ekuazio sistemari,

$$(I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) \Delta Y - \frac{1}{2}(e_s \otimes I_d) \Delta z = r, \quad (\text{A.3})$$

$$(-he_s^T B \otimes J) \Delta Y + \Delta z = 0, \quad (\text{A.4})$$

aldagai aldaketa hau, aplikatuko doigu.

$$\Delta Y = (Q \otimes I_d) W. \quad (\text{A.5})$$

1. Lehen urratsa.

Ekuazioa sistemaren lehen ekuazioari (A.3), aldagai aldaketa (A.5) aplikatu eta $(Q^{-1} \otimes I_d)$ gaia ezkerretik biderkatuz,

$$(Q^{-1} \otimes I_d) (I_s \otimes I_d - h \bar{A} \otimes J) (Q \otimes I_d) W$$

$$- (Q^{-1} \otimes I_d) \left(\frac{1}{2} e_s \otimes I_d \right) \Delta z = (Q^{-1} \otimes I_d) r.$$

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,

$$Q^{-1} \bar{A} Q = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

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,

$$I_s \otimes I_d = \begin{pmatrix} I_m \otimes I_d & 0 \\ 0 & I_{s-m} \otimes I_d \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

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

3. Hirugarren urratsa.

Bigarren ekuazioari (A.3) aldagai aldaketa (A.5) aplikatuz,

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

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,

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

B. 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, 97]. Batetik, garapenak modu argian dokumentatzea behartu gaitu; bertan zehaztasun guztiak aztertu daitezke eta gure lanaren baliagarritasuna baiezztatu daiteke. Bestetik, ikerlariei gure lana erabiltzeko eta hobetzeko aukera eskaintzen diegu.

Konputazio zientzian, idatzitako kodearen 200 lerro oro, errore bat izaten dela [37] 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 bakotzaren argibideak emango ditugu.

B.1. Egitura orokorra.

Implementazioen edukia, direktorio hauetan banatu dugu:

1. CoefficientsData.

Mathematican, IRK Gauss kolokazio metodoaren koefizienteak sortzeko aplikazio bat garatu dugu. Gure esperimentuetarako $s = 6, s = 8$ eta $s = 16$ atalako Gaussen metodoak aplikatu ditugu eta metodo bakoitzari dagokien doitasun bikoitze (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 funtzioak 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 kopuruoa 'threadcount' aldaiaian, zehaztu behar da.

B.2. IRK puntu-finkoa.

Puntu-finkoaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, [kodea](#) helbidean eskuragarri dago. 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:

```
IRKFPI ( t0 , t1 , h,& method ,& u,& system ,& options ,& thestat );
```

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.

B.3. IRK Newton.

Newton sinplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, [kodea](#) helbidean eskuragarri dago. Bi implementazio exekutatu daitezke: Newton sinplifikatuaren 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 ,& thestat );
```

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.

B.4. IRK Eguzki-sistema.

B.5. Konposizio-Splitting metodoak.

Newton simplifikatuaren iterazioan oinarritutako IRK metodoaren implementazioa, [kodea](#) 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 funtziogun nagusiaren deia honakoa da:

```
Solve_Comp ( t0 , t1 , h,& method , basic ,& system ,& options ,& u,& thestat );
```

Exekuzioa Linux terminalatik 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 fluxuanren implementazio berri bat garatu dugu. Implementazio honen C kodean, 'Kepler.c' fitxategian aurkitzen da.

C. Eranskina

Nire-Argibideak

Niretzako dokumentatutako argibide batzuk. Ez ditut tesian sartu behar.

C.1. IRK-Newton.

Newton simplifikatuaren iterazioa.

Newton simplifikatuaren iterazioan formulazio berrian ekuazio honen jatorria:

$$\begin{aligned} \text{Askatu } \triangle L_i^{[k]} \\ \triangle L_i^{[k]} - hb_i J_i \sum_{j=1}^s \mu_{ij} \triangle L_j^{[k]} = g_i^{[k]}, \quad i = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

Frogapena.

Abiapuntua.

$$\begin{aligned} \triangle L_i &= L_i - L_i^{[k]}, \\ L_i - hb_i f(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j) &= 0 \end{aligned}$$

Honako garapena egingo dugu.

$$L_i - hb_i f(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j) = L_i^{[k]} + \triangle L_i - hb_i f(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} (L_j^{[k]} + \triangle L_j)).$$

Eta $f(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij}(L_j^{[k]} + \Delta L_j))$ linealizatuz,

$$\approx L_i^{[k]} + \Delta L_i - hb_i f(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]}) - hb_i f'(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]})(\sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j) =$$

$$\Delta L_i - hb_i J_i (\sum_{j=1}^s \mu_{ij} \Delta L_j) = -L_i^{[k]} + hb_i f(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j)$$

non $J_i = f'(y_n + \sum_{j=1}^s \mu_{ij} L_j^{[k]}) = f'(Y_i)$.

C.2. FMA.

Nola jakin gure *linux* konputagailu batek *FMA* instrukzioak dituen ala ez ? Hona-ko agindua exekutatu eta *fma* flaga azaltzen den ala ez begiratu behar dugu.

```
$ grep fma < /proc/cpuinfo
```

eta konpilatzeko *-mfma* flag-a zehaztu behar da,

```
$ gcc -O2 -Wall -std=c99 -fno-common -mfma adibidea.c
```

C.3. Hitz-zerrenda.

C.1. Taula: Hitz-zerrenda.

Euskaraz	Ingelesez	Laburdura	Adibidea
Ekuazio diferentzial arrunta	Ordinary Differential equation	<i>ODE</i>	$y = f(t, y)$
Hasierako baliodun problema	Initial value problem	<i>IVP</i>	
Zurruna	Stiff		
Simplektikoa	Symplectic		
Desplazamendu	Drift		
	Splitting methods		
	Composition methods		
Runge-Kutta Esplizitua	Explicit Runge-Kutta	<i>ERK</i>	
Runge-Kutta Implizitua	Implicit Runge-Kutta	<i>IRK</i>	
	A-stability, B-stability		
	Implicit Midpoint method		
	Adjoint		
	bias		
	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		
	Graphical Processor Unit	<i>GPU</i>	
	Least Square		
	Least Eigenvalues problems		
Balio singulararen deskonposaketa	Singular values descomposition	<i>SVD</i>	
Ezentrizidadea	Eccentricity		
	Eccentric anomaly		
Astronomical unit (AU)	Unitate astronomikoa		
Julian date	Data juliotar		
LU Decomposition (low, up)	LU-deskonposaketa		
Flops	Koma-higikorreko eragiketa segunduko		
Peak	Exekuzio gaitasuna		
Wall-time, elapsed-time			
CPU-time			
Cache memoria			
spatial/data locality			
Single Instruction Multiple Data		<i>SIMD</i>	
Fork-join			
Application programming interface	Interfaze aplikazio programa	<i>API</i>	
Eraginkortasun altuko konputazioa	High performance computing	<i>HPC</i>	
Problem solving enviroments	Problemak ebazteko inguruneak	<i>PSE</i>	
Portable			
Linear least square problems			
Eigenvalues problems			
Sparse matrices	Matrize bakanak		

Bibliografia

- [1] *Intel Math Kernel Library. Refrence Manual*. Intel, 2015.
- [2] *he 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. 40 {YEARS} {OF} CPC: A celebratory issue focused on quality software for high performance, grid and novel computing architectures.
- [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](#). *arXiv preprint arXiv:1411.1607*, 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] John C Butcher. [On the implementation of implicit runge-kutta methods](#). *BIT Numerical Mathematics*, 16(3):237–240, 1976.
- [22] John Charles Butcher. [Numerical Methods for Ordinary Differential Equations](#). Second edition, Wiley, 2008.
- [23] 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.

- [24] 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.
- [25] Robert M Corless and Nicolas Fillion. [A graduate introduction to numerical methods](#). *AMC*, 10:12, 2013.
- [26] John Danby. [Fundamentals of celestial mechanics](#). *Richmond: Willmann-Bell, | c1992, 2nd ed., 1*, 1992.
- [27] Theodorus Jozef Dekker. [A floating-point technique for extending the available precision](#). *Numerische Mathematik*, 18(3):224–242, 1971.
- [28] DumitruN. Deleanu. [Fast detection of chaotic or regular behavior of double pendulum system: application of the fast norm vector indicator method](#).
- [29] 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.
- [30] 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.
- [31] 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.
- [32] Kang Feng and Mengzhao Qin. [Symplectic geometric algorithms for hamiltonian systems](#). Springer, 2010.
- [33] A. Fienga. [International workshop in astronomy and dynamics](#). In *INPOP planetary ephemerides: from 2013 to 2015.*, Observatoire de Paris, 2015.
- [34] A Fienga, H Manche, J Laskar, and Mickael Gastineau. [Inpop06: a new numerical planetary ephemeris](#). *Astronomy & Astrophysics*, 477(1):315–327, 2008.
- [35] 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.

- [36] 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.
- [37] Daan Frenkel and Berend Smit. [Understanding molecular simulation: from algorithms to applications](#), volume 1. Academic press, 2001.
- [38] Toshio Fukushima. [Reduction of round-off error in symplectic integrators](#). *The Astronomical Journal*, 121(3):1768, 2001.
- [39] GNU. [libquadmath v 1.3](#), 2008.
- [40] Stefan Goedecker and Adolfy Hoisie. [Performance optimization of numerically intensive codes](#). SIAM, 2001.
- [41] 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.
- [42] 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.
- [43] E Hairer, SPNørsett, and G Wanner. [Solving ordinary differential equations I: nonstiff problems, vol. 8](#). 1993.
- [44] E Hairer and G Wanner. [Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems](#). Springer, Berlin, 1996.
- [45] E. Hairer and G. Wanner. [Initial value problems](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, springer, 2015, pages 691–694.
- [46] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. [Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations](#), volume 31. Springer Science & Business Media, 2006.
- [47] 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.

- [48] Wayne B Hayes. [Is the outer solar system chaotic?](#) *Nature Physics*, 3(10):689–691, 2007.
- [49] 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.
- [50] 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.
- [51] Nicholas J Higham. [Accuracy and stability of numerical algorithms](#). Siam, 2002.
- [52] Nicholas J Higham. [Programming languages: An applied mathematics view](#). 2015.
- [53] Leslie Hogben. [Handbook of linear algebra](#). Chapman and Hall/CRC, 2013.
- [54] IEEE. [Ieee standard for floating-point arithmetic](#). 2008.
- [55] 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.
- [56] Takashi Ito and Kiyotaka Tanikawa. Trends in 20th century celestial mechanics. *Publ. Natl. Astron. Obs. Jpn*, 9:55–112, 2007.
- [57] Laurent O. Jay. Preconditioning of implicit runge-kutta methods. *Scalable Computing: Practice and Experience*, 10, 2009.
- [58] MP Calvo JM Sanz-Serna. [Numerical Hamiltonian problems](#). Chapman and Hall, 1994.
- [59] 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.
- [60] W Kahan. Further remarks on reducing truncation errors. *Communications of the ACM*, 8(1):40, 1965.

- [61] 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.
- [62] 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.
- [63] Sergei A Klioner. [Basic celestial mechanics](#). *arXiv preprint arXiv:1609.00915*, 2016.
- [64] D Knuth. [The art of computer programming: Vol 2/seminumerical algorithms](#), 1969.
- [65] Fred T Krogh. [An adams guy does the runge-kutta](#). 1997.
- [66] 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.
- [67] MP Laburta. [Construction of starting algorithms for the rk-gauss methods](#). *Journal of computational and applied mathematics*, 90(2):239–261, 1998.
- [68] 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.
- [69] 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.
- [70] 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.
- [71] Jacques Laskar and Mickael Gastineau. [Existence of collisional trajectories of mercury, mars and venus with the earth](#). *Nature*, 459(7248):817–819, 2009.
- [72] Jacques Laskar and Philippe Robutel. [High order symplectic integrators for perturbed hamiltonian systems](#). *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 80(1):39–62, 2001.

- [73] Benedict Leimkuhler and Sebastian Reich. *Simulating hamiltonian dynamics*, volume 14. Cambridge University Press, 2004.
- [74] Harold F Levison and Martin J Duncan. *The long-term dynamical behavior of short-period comets*. *Icarus*, 108(1):18–36, 1994.
- [75] 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.
- [76] 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.
- [77] Robert I McLachlan. *Composition methods in the presence of small parameters*. *BIT Numerical Mathematics*, 35(2):258–268, 1995.
- [78] Robert I McLachlan and Pau Atela. *The accuracy of symplectic integrators*. *Nonlinearity*, 5(2):541, 1992.
- [79] A Morbidelli. *Modern integrations of solar system dynamics*. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 30(1):89–112, 2002.
- [80] 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.
- [81] Nobelprize.org. *The nobel prize in chemistry 2013*, May 2014.
- [82] Hans Olsson and Gustaf Sderlind. *The approximate runge-kutta computational process*. *BIT Numerical Mathematics*, 40(2):351–373, 2000.
- [83] Michael L Overton. *Numerical computing with IEEE floating point arithmetic*. Siam, 2001.
- [84] Peter Pacheco. *An introduction to parallel programming*. Elsevier, 2011.
- [85] EV Pitjeva and NP Pitjev. *Development of planetary ephemerides epm and their applications*. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 119(3-4):237–256, 2014.
- [86] Yousef Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [87] Prasenjit Saha and Scott Tremaine. *Symplectic integrators for solar system dynamics*. *The Astronomical Journal*, 104:1633–1640, 1992.

- [88] Prasenjit Saha and Scott Tremaine. [Long-term planetary integration with individual time steps](#). *arXiv preprint astro-ph/9403057*, 1994.
- [89] Jesús María Sanz-Serna. [Symplectic integrators for hamiltonian problems: an overview](#). *Acta numerica*, 1:243–286, 1992.
- [90] JM. Sanz-Serna. [Hamiltonian systems](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, Springer, 2015, pages 617–624.
- [91] JM. Sanz-Serna. [Symplectic methods](#). In *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, B Engquist, editor, Springer, 2015, pages 1451–1458.
- [92] 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.
- [93] Mark Sofroniou and Giulia Spaletta. [Derivation of symmetric composition constants for symmetric integrators](#). *Optimization Methods and Software*, 20(4-5):597–613, 2005.
- [94] Pat H Sterbenz. [Floating-point computation](#). Prentice Hall, 1973.
- [95] Gerald J Sussman and Jack Wisdom. [Chaotic evolution of the solar system](#). Technical report, DTIC Document, 1992.
- [96] Robert van de Geijn Victor Eijkhout and Edmond Chow. [Introduction to High Performance Scientific Computing](#). lulu.com, 2011.
- [97] 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.
- [98] Jack Wisdom. [Symplectic correctors for canonical heliocentric n-body maps](#). *The Astronomical Journal*, 131(4):2294, 2006.
- [99] 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.
- [100] Jack Wisdom and Matthew Holman. [Symplectic maps for the n-body problem](#). *The Astronomical Journal*, 102:1528–1538, 1991.

- [101] Wolfram Research, Inc. [Mathematica](#).
- [102] Dexuan Xie. A new numerical algorithm for efficiently implementing implicit runge-kutta methods. *Department of Mathematical Sciences. University of Wisconsin, Milwaukee, Wisconsin, USA*, 2009.
- [103] 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.